

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНО-ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ ВЕЩЕСТВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ В ОБЛАСТИ ОХРАНЫ ВОД

Современные математические модели формирования качества воды в водных объектах описывают трансформацию загрязняющих веществ и являются, как правило, многокомпонентными [1,2]. Однако учет разнообразных взаимосвязей и факторов при этом существенно затрудняет решение многокритериальных оптимизационных задач по планированию водоохраных мероприятий, прогнозированию качества воды и др.

Одним из способов разрешения противоречия между сложностью модели и ее одновременной пригодностью для использования в оптимизационных задачах является поиск приемлемых аналитических зависимостей. Один из таких подходов предложен, например, в работе [3], но только для последовательной трансформации четырех соединений азота.

В этой связи безусловный теоретический и практический интерес представляет рассмотрение задачи моделирования трансформации для любого ограниченного количества веществ с учетом процессов их одновременного превращения, как по последовательным, так и параллельным цепочкам.

Основной целью настоящей работы является доведение поставленной задачи до уровня аналитических зависимостей, пригодных для управления качеством воды в реальном времени, решения различных оптимизационных задач в области охраны вод и управления водными ресурсами.

Под компонентами будем понимать отдельные вещества или их соединения, находящиеся в растворенном и взвешенном виде в толще воды, различных формах планктона (бактерио-, фито-, зоо-), донных отложениях, поверхностном стоке.

Определение 1. Необратимый последовательный процесс трансформации $\dot{N}(I)$ – поочередное превращение исходной ($i = 1$) и всех промежуточных компонент ($i > 1$) только в одном направлении в порядке возрастания $i \in [1, I]$.

Определение 2. Необратимый параллельный процесс трансформации i -той компоненты $\ddot{N}(J_i)$ – одновременное превращение её в J_i компонент только в одном направлении для всех $j \in [1, J_i]$

Определение 3. Необратимый последовательно-параллельный процесс трансформации $N(I, J)$ – поочередное превращение исходной ($i = 1$) и всех промежуточных компонент ($i > 1$) только в одном направлении в порядке возрастания $i \in [1, I]$ и одновременно для всех $j \in [1, J]$, $J = \sum J_i + 1$.

Очевидно, что $N(I, J) \subset \dot{N}(I) \wedge \ddot{N}(J_i)$. Процесс схематически представлен на рис. 1.

Определение 4. Обратимый последовательно-параллельный процесс трансформации $P(I, J)$ – поочередное превращение исходной ($i = 1$) и всех промежуточных ($i > 1$) компонент одновременно для всех $j \in [1, J]$ в любом направлении.

Аналогично определениям 1-3: $P(I, J) \subset \dot{P}(I) \wedge \ddot{P}(J_i)$, как конъюнкция обратимых последовательных и параллельных процессов трансформации.

Определение 5. Подуровень (ПУ) $p(I, J)$ процесса $P(I, J)$ – система взаимного массового обмена I компонент между собой, другими аналогичными его подуровнями и внешними источниками.

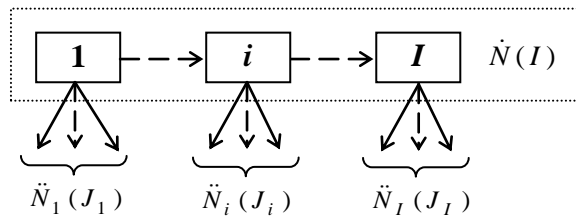


Рисунок 1 – Схема необратимого последовательно-параллельного процесса трансформации $N(I, J)$

Полное математическое описание процесса $P(I, J)$ и последующая калибровка моделей требует значительного объема данных натуральных измерений, проведения специальных исследований, а также учета компонент, многие из которых не поддаются стандартным контрольным измерениям.

Поэтому для решения практических оптимизационных задач вполне допустимо ограничиться случаем превращения компонент в соответствии с уравнениями кинетики 1-го порядка [4], что достаточно хорошо подтверждается экспериментальными данными на реальных водных объектах.

Рассмотрим один из подуровней $p(I, J)$ процесса $P(I, J)$, где последнее значение J соответствует внешней системе, как частному случаю ПУ процесса $P(I, J)$.

Массовый обмен между самими компонентами в обратимом последовательном процессе $\dot{P}(I)$ можно однозначно определить фиксированным набором параметров k'_{iu} , которые назовем дуальными (взаимными) коэффициентами трансформации между i, u -тыми компонентами данного подуровня такие, что:

$$k'_{iu} = -k'_{ui}, \quad k'_{iu} > 0 \text{ при } i \rightarrow u, \quad k'_{iu} < 0 \text{ при } u \rightarrow i; \quad k'_{II+1} = k'_{II}.$$

Они характеризуют скорость перехода одного вещества в другое, скорость отмирания (роста) планктона в переводе на исследуемые вещества (например, азот или фосфор) и т.п.

В качестве дуальных коэффициентов трансформации могут использоваться и комплексы типа $k'_{iu} = \frac{M_{iu}}{Y_{iu}} \left(\frac{\bar{C}_u}{k_{s_{iu}} + \bar{C}_i} \right)$, где M_{iu} – константа, характеризующая скорость роста планктона, Y_{iu} – коэффициент продуктивности, $k_{s_{iu}}$ – коэффициент насыщения; \bar{C}_i, \bar{C}_u – усредненные концентрации компонент на некотором квазистационарном отрезке времени.

Взаимодействие каждой i -той компоненты ПУ (с концентрацией C_i) в обратимом параллельном процессе $\ddot{P}(J_i)$ с другими ПУ будем характеризовать обобщенным коэффициентом обмена v'_i таким, что $v'_i < 0$ – соответствует поступлению компоненты, $v'_i > 0$ – ее уходу.

Одновременное участие i -той компоненты в процессах $\dot{P}(I)$ и $\ddot{P}(J_i)$ с концентрацией C_i приводит к понятиям: $K'_i = \sum_{u=i+1}^I k'_{iu} + v'_i$ – обобщенный коэффициент трансформации i -той компоненты, $k''_{iu} = k'_{iu} / K'_i$ – нормированный (безразмерный) коэффициент трансформации между парой i, u -тых компонент.

Кроме того, внешние источники (например, донные отложения) могут приносить i -тую компоненту на рассматриваемый подуровень с интенсивностью поступления q'_i , не зависящей от концентрации C_i .

Определение 6. Процесс $P(I, J-1)$ называется замкнутым, если отсутствуют связи с внешней системой: $k'_{II} = q'_i = 0$ и разомкнутым в противном случае.

В замкнутом подуровне связь с внешней системой отсутствует.

Определение 7. Замкнутый процесс $P(I, 0)$, состоящий из одного подуровня, называется изолированным: $k'_{II} = q'_i = v'_{ij} = 0, j = \overline{1, J}$.

Очевидно, что изолированный процесс $P(I, 0)$ совпадает с его подуровнем $p(I, 0)$. При этом трансформация компонент обусловлена только внутренними связями и согласно закону сохранения массы веществ сумма концентраций всех компонент не изменяется с течением времени.

С учетом принятых обозначений необратимые и обратимые процессы трансформации компонент можно записать в следующем символическом виде:

$$\dot{N}(I) \Leftarrow \{k'_{i, i+1} > 0, k'_{II} \geq 0, k'_{iu} = 0, u = \overline{i+2, I}\},$$

$$\ddot{N}(J_i) \Leftarrow \{k'_{ij} > 0, j = \overline{1, J_i}\},$$

$$N(I, J) \Leftarrow \{0 < k'_{iu}, v'_i < \infty, u = \overline{i+1, I}\},$$

$$\dot{P}(I) \Leftarrow \{|k'_{i, i+1}| > 0, |k'_{II}| \geq 0, k'_{iu} = 0, u = \overline{i+2, I}\},$$

$$\ddot{P}(J_i) \Leftarrow \{|k'_{ij}| > 0, j = \overline{1, J_i}\},$$

$$P(I, J) \Leftarrow \{|k'_{iu}, v'_i| < \infty, u = \overline{i+1, I}\}.$$

Последовательно–параллельное превращение веществ можно представить в виде конечного ориентированного несвязного линейного графа с вершинами (узлами) и соответствующими ребрами (ветвями). Узлам графа соответствуют сами компоненты (вещества со своими концентрациями C_i), ребрам – обмен (массоперенос) между компонентами на уровне дуальных внутренних связей, либо обмен компонент с внешней системой или другими аналогичными подуровнями.

Схематически граф одного из подуровней разомкнутого процесса $p(I, J)$ при $I = J$ изображен на рис. 2.

Математически линейный граф однозначно отображается матрицей инцидентий. Этот же граф может быть представлен в эквивалентной математической форме в виде множества I узловых подмножеств A_i . Элементами подмножества A_i являются номера дуг графа, инцидентных i -той вершине, взятые со знаком плюс, если дуга направлена к узлу i , и со знаком минус при противоположном направлении дуги.

Систему дифференциальных уравнений для подуровня $p(I, J)$ определим в следующем виде:

$$RC_i = -K'_i C_i + \sum_{u=1}^{i-1} k'_{iu} C_u + q'_i, \quad i = \overline{1, I}, \quad (1)$$

где R – дифференциальный оператор типа $R \equiv d/dt$ – при расчете изменения компонент во времени или $R \equiv v \frac{\partial}{\partial l} - D \frac{\partial^2}{\partial l^2}$ – при анализе изменения средней концентрации

компонент вдоль водотока, $l \in [0, L]$, v – скорость течения воды, D – коэффициент продольной диффузии, K'_i – обобщенный коэффициент трансформации i -той компоненты, k''_{iu} – нормированный дуальный коэффициент трансформации между парой i, u -тых компонент.

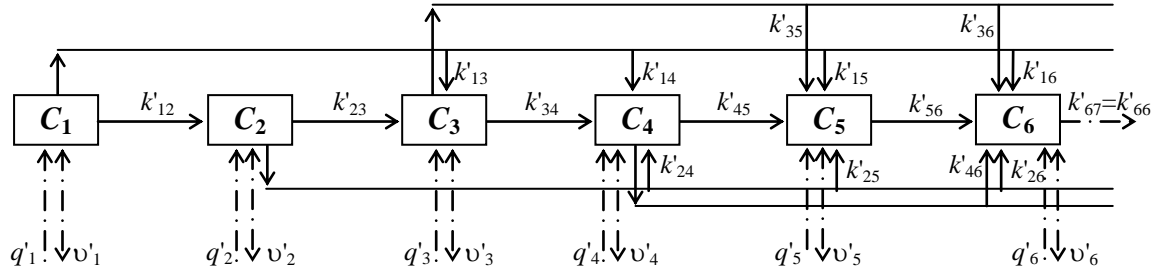


Рисунок 2 – Граф подуровня разомкнутого обратимого последовательно-параллельного процесса трансформации компонент: — дуальные внутренние связи, - - - внешние связи

Приведенная схема и соответствующая ей система уравнений становятся собственно моделью после разработки алгоритма решения этих уравнений с программной реализацией и идентификации параметров (коэффициентов внутреннего и внешнего массопереноса) на основе данных натурных измерений компонент ПУ.

Аналитическое решение системы уравнений (1) может быть найдено на основе последовательных преобразований Лапласа:

- замена оригиналов $C_i(x)$ соответствующими изображениями – функциями комплексной переменной,
- решение полученной системы алгебраических уравнений,
- обратный переход к оригиналам по табличным формулам [5] с учетом начальных условий $C_{0i} = C_i(0)$.

Генератор взаимосвязей. Одна из вспомогательных задач при решении системы (1) – формирование для процесса $p(I, J)$ всех возможных последовательно-параллельных связующих непрерывных цепочек от 1-ого начального до I -го конечного узла. Она решается путем последовательного исключения сначала любого одного узла $1 < u < I$, затем любой пары несовпадающих узлов и так далее до выбрасывания $x = I - 2$ вершин и сохранения последней самой короткой связи с дугой k'_{1I} .

Количество таких вариантов определяется числом сочетаний из $I - 2$ элементов по x : $z_x = \binom{I-2}{x} \equiv \frac{(I-2)!}{(I-2-x)! x!}$, а суммарная их величина составляет $Z = \sum z_x$.

Результаты генерации взаимосвязей на примере $I = 6$ компонент представлены в таблице 1.

Предположим, что обобщенные коэффициенты трансформации не равны между собой, то есть $K'_i \neq K'_r$; $i, r = 1, I$, $i \neq r$.

Опуская достаточно сложные для данной работы промежуточные выкладки и выявленные автором определенные закономерности, решение системы уравнений (1) при $R \equiv d/dt$ для некоторого фиксированного момента времени t можно записать сразу в окончательном виде:

$$C_i = C_{0i} k_i + q'_i f_i + P_i, \quad i = \overline{1, I}, \quad (2)$$

$$P_i = \sum_z \sum_{m=1}^{i_1} \sum_{u=m}^{i-1-x} \left(C_{0m} F_{ib_u} + q'_m G_{ib_u} \right) \prod_{s=m}^{i-1-x} k''_{b_s b_{s+1}} \rho_{b_s b_u}, \quad i \geq i_2 \quad (3)$$

$$f_i = (1 - k_i) / K'_i, \quad k_i = e^{-t K'_i}, \quad (4)$$

$$F_{ir} = K'_r (k_i - k_r) (K'_r - K'_i)^{-1}, \quad (5)$$

$$G_{ir} = K'_r (f_i - f_r) (K'_r - K'_i)^{-1}, \quad (6)$$

$$\rho_{su} = K'_s / (K'_s - K'_u) \wedge s \neq u \vee 1 \wedge s = u, \quad (7)$$

i_1, i_2 – номера узлов соответственно перед первой и после последней удаленной вершиной графа в z -м столбце матрицы взаимосвязей b_{rz} . Индекс z в b_{rz} для простоты записи в (3) опущен. Время t зафиксировано в интегральных коэффициентах консервативности k_i [6, 7]. Для реальных водных объектов размерность всех параметров, отмеченных одним "штрихом", ввиду малых их значений целесообразно соотносить с интервалом времени в одни сутки.

Таблица 1 – Результаты генерации взаимосвязей на примере $I = 6$ компонент

Количество удаляемых вершин графа – x	0	1	2	3	4
Число вариантов – z_x	1	4	6	4	1
Элементы матрицы взаимосвязей $b_{rz}, z = 1, \bar{Z}; r = 1, I - x$	1	1 1 1 1	1 1 1 1 1 1	1 1 1 1	1
	2	3 2 2 2	4 3 3 2 2 2	5 4 3 2	6
	3	4 4 3 3	5 5 4 5 4 3	6 6 6 6	-
	4	5 5 5 4	6 6 6 6 6 6	- - - -	-
	5	6 6 6 6	- - - - - -	- - - -	-
	6	- - - -	- - - - - -	- - - -	-
Узел перед первой удаленной вершиной – i_1	$i-1$	1 2 3 4	1 1 1 2 2 3	1 1 1 2	1
Узел после последней удаленной вершины – i_2	2	3 4 5 6	4 5 6 5 6 6	5 6 6 6	6

Представление решения в виде (2)-(7) компактно, обеспечивает легкую реализацию на ЭВМ, охватывает широкий класс процессов трансформации компонент и достаточно наглядно показывает вклад отдельных составляющих в общее решение. Оно весьма выгодно отличается, к примеру, даже для частного случая необратимого последовательного процесса трансформации $\dot{N}(4)$, рассмотренного в работе [3] на уровне аналитических зависимостей. При увеличении же числа компонент I подобные расчеты сопряжены с очень громоздкими вычислениями, а при анализе дополнительных переходов через дуальные коэффициенты трансформации k'_{iu} – становятся попросту бесперспективными.

И преимущество предлагаемого подхода в этом случае становится очевидным.

Пример 1. Появление в процессе $\dot{N}(6)$ дополнительной связи k'_{35} .

При формировании матрицы взаимосвязей b_{rz} это равнозначно удалению 4-го узла. На уровне массового обмена между узлами $1 \div 3$ все остается без изменений и уже учтено в самом процессе $\dot{N}(6)$ при $x = 0$.

Дополнительные слагаемые, обусловленные дуальным коэффициентом k'_{35} , имеют вид:

$$\begin{aligned}
 P_5 &= C_{01}k''_{12}k''_{23}k''_{35}(F_{51}\rho_{21}\rho_{31} + F_{52}\rho_{12}\rho_{32} + F_{53}\rho_{13}\rho_{23}) + \\
 &\quad + C_{02}k''_{23}k''_{35}(F_{52}\rho_{32} + F_{53}\rho_{23}) + C_{03}k''_{35}F_{53}, \\
 P_6 &= C_{01}k''_{12}k''_{23}k''_{35}k''_{56}(F_{61}\rho_{21}\rho_{31}\rho_{51} + F_{62}\rho_{12}\rho_{32}\rho_{52} + F_{63}\rho_{13}\rho_{23}\rho_{53} + \\
 &\quad + F_{65}\rho_{15}\rho_{25}\rho_{35}) + C_{02}k''_{23}k''_{35}k''_{56}(F_{62}\rho_{32}\rho_{52} + F_{63}\rho_{23}\rho_{53} + \\
 &\quad + F_{65}\rho_{25}\rho_{35}) + C_{03}k''_{35}k''_{56}(F_{63}\rho_{53} + F_{65}\rho_{35}).
 \end{aligned}$$

Пример 2. Для иллюстрации расчета концентраций веществ по модели (2)-(7) определим некоторый фиксированный набор исходных данных согласно таблице 1:

- дуальные коэффициенты трансформации k'_{iu} ,
- коэффициенты обмена v'_i с другими подуровнями,
- интенсивность поступления (убытия) веществ из других подуровней q'_i ,
- начальные условия C_{0i} .

Таблица 2 – Исходные данные для демонстрационного расчета

u i	Дуальные коэффициенты трансформации k'_{iu} , сут ⁻¹						Внешние связи		Обобщенные коэффициенты трансформации K'_i	Начальные условия C_{0i}
	1	2	3	4	5	6	v'_i	q'_i		
1	0	3,5	-0,13	-0,14	-0,15	-0,16	0,1	0,2	3,02	1,0
2	-3,5	0	2,0	-0,24	-0,25	-0,26	0,1	0,2	1,35	0,9
3	0,13	-2,0	0	2,5	-0,35	-0,36	0,1	0,2	1,89	0,8
4	0,14	0,24	-2,5	0	3,0	-0,46	0,1	0,2	2,64	0,7
5	0,15	0,25	0,35	-3,0	0	8,0	-0,1	-0,3	7,9	0,6
6	0,16	0,26	0,36	0,46	-8,0	0,1	-0,2	-0,8	-0,1	0,4

Результаты расчета, в котором принимают участие все параметры, перечисленные в таблице 2, представлены на рис. 3.

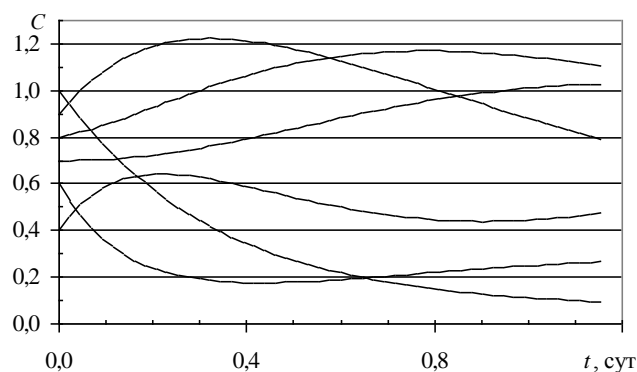


Рисунок 3 – Изменение концентрации компонент для одного из подуровней обратимого последовательно-параллельного процесса P(6,6)

Выводы. Разработанная модель достаточно полно описывает трансформацию компонент, доведена до уровня аналитических зависимостей, унифицирована, проста в

эксплуатации, позволяет манипулировать ее сложностью с учетом внутренних и внешних связей – от обычных балансовых соотношений до сложных процессов последовательно-параллельной трансформации компонент. При этом число взаимодействующих компонент может быть сколь угодно большим.

Все это обуславливает простое использование разработанной модели при решении различных оптимизационных задач, включая управление качеством воды, а в целом полученные результаты отвечают предъявляемым требованиям к моделям, которые используются для целей охраны вод.

Дальнейшие исследования в рамках поставленной задачи моделирования последовательно-параллельной трансформации веществ можно определить по двум основным направлениям:

– преобразование разработанной модели к варианту ее статистической модификации типа [6, 7], обладающей рядом новых полезных свойств: учет неконтролируемых возмущений, переход от дуальных коэффициентов трансформации к интегральным коэффициентам консервативности, линейность относительно параметров, которые идентифицируются по натурным наблюдениям, простые процедуры вычисления оценок параметров модели и др.;

– проверка моделей по данным натурных наблюдений на конкретных водных объектах.

Литература

1. Пряжинская В.Г., Ярошевский Д.М., Левит-Гуревич Л.К. Компьютерное моделирование в управлении водными ресурсами. – М.: Физматлит, 2002. – 494 с.
2. Еременко Е.В. Экологические модели разной сложности для прогнозирования качества воды// Проблемы охраны навколишнього природного середовища та техногенної безпеки: Зб. наук. пр. УкрНДІЕП, Харків, 2000, с. 90-99.
3. Васильев О.Ф., Еременко Е.В. Моделирование трансформации соединений азота для управления качеством воды в водотоках// Водные ресурсы. – 1980, № 5, с. 110-117.
4. Слейбо У., Персонс Т. Общая химия. – М.: Мир, 1979. – 550 с.
5. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. – М.: Наука, 1974. – 832 с.
6. Белогуров В.П., Василенко С.Л. Статистические модели процессов изменения качества воды в водотоках// Управление качеством вод: Сб. науч. тр. – Харьков: ВНИИВО, 1980, с. 61-69.
7. Василенко С.Л., Волошкіна О.С., Красовський Г.Я. Моделі якості води, зумовленої транскордонним переносом забруднюючих речовин у водотоках// Екологія і ресурси: Зб. наук. праць. – К.: УІНСіР РНБОУ, 2003. – Вип.5. – С. 98-105.

УДК 628.394.57:577.472

Василенко С.Л.

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ПОСЛІДОВНО-РІВНОБІЖНОЇ ТРАНСФОРМАЦІЇ РЕЧОВИН ДЛЯ РІШЕННЯ ЗАДАЧ ОПТИМІЗАЦІЇ В ОБЛАСТІ ОХОРОНИ ВОД

Розглядається задача моделювання трансформації речовин у водних об'єктах з урахуванням процесів їх одночасної трансформації по послідовних і рівнобіжних ланцюжках. Модель доведена до рівня простих аналітичних залежностей для будь-якої обмеженої кількості взаємодіючих компонентів. Уведено нові поняття дуальних та узгальнених коефіцієнтів перетворення речовин.