

УДК 628.394.57:577.472

Василенко С.Л.

### МОДЕЛИРОВАНИЕ СОВМЕСТНОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ БИОГЕННЫХ ЭЛЕМЕНТОВ И РАСТВОРЕННОГО КИСЛОРОДА ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ КАЧЕСТВА ВОДЫ

Азот и фосфор – важнейшие биогенные элементы, содержание в воде которых влияет на состояние биоценоза, процессы самоочищения и в целом определяет биологическую продуктивность природных вод. Основными процессами, определяющими их круговорот и распределение в воде, являются фотосинтез и разложение органических веществ [1].

При изучении вопросов количественной оценки и прогнозирования качества воды, евтрофирования (повышения биопродуктивного потенциала) водных объектов эти биогенные элементы включаются как компоненты в экологические модели разной сложности, представляемые обычно в виде систем дифференциальных уравнений в частных производных [2-4].

Для решения задач оптимизации и прогнозирования качества воды в области охраны вод наиболее приемлемыми представляются модели в виде аналитических зависимостей, вид которых отражает существенные причинно-следственные связи реальных внутриводоемных процессов, а параметры оцениваются по данным натурных измерений с применением статистических методов. В этой связи практический интерес представляет модель совместной последовательно-параллельной трансформации любого конечного числа веществ в виде формульных соотношений [5] и, в частности, ее статистическая модификация для моделирования азотосодержащих компонент [6].

Целью настоящей работы является дальнейшее развитие принятых основных направлений [5, 6], но уже с учетом совместной трансформации в водной среде соединений азота, фосфора, а также изменения растворенного кислорода и биохимического потребления кислорода – показателя косвенной оценки суммарного содержания в воде легкоокисляющихся органических веществ.

За основу примем относительно несложную, но одновременно практически важную модель взаимосвязей компонент [2], приемлемую для выполнения инженерных расчетов (рис. 1).

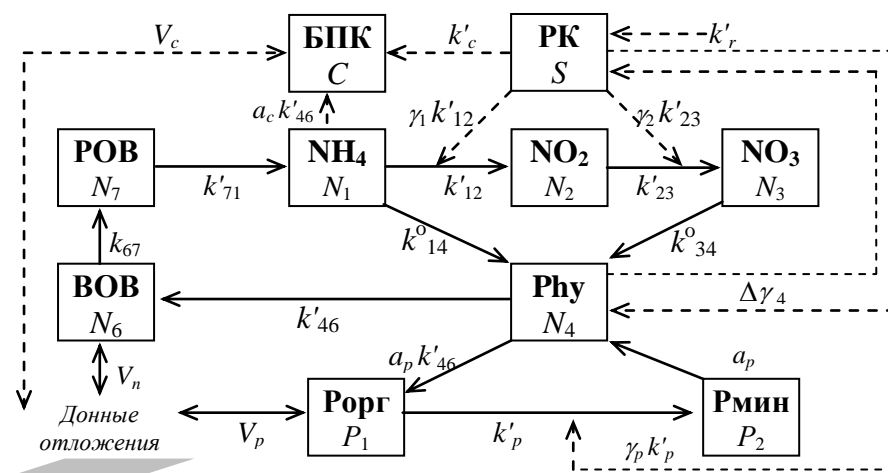


Рисунок 1 – Схема взаимосвязи компонент модели

По данной схеме растворенное органическое вещество (Роб), которое образуется в результате трансформации взвешенного органического вещества (Вов) и выделений фитопланктона (Phy), в результате нитрификации преобразуется последовательно в аммонийный (NH<sub>4</sub>), нитритный (NO<sub>2</sub>) и нитратный (NO<sub>3</sub>) азот. Фитопланктон потреб-

ляет  $\text{NH}_4$ ,  $\text{NO}_3$ , минеральный фосфор (Рмин), который может быть лимитирующим фактором для его роста, а в результате жизнедеятельности выделяет органический фосфор (Рорг). ВОВ и Рорг подвержены процессам осаждения или взмучивания. На протекание внутриводных процессов влияют внешние источники биогенных и взвешенных веществ, в частности, донные отложения. Формирование качества воды сопровождаются также изменением содержания растворенного кислорода в зависимости от соотношения процессов продуцирования (фотосинтеза) и потребления (дыхания организмов, деструкции органических веществ).

В модели приняты следующие допущения, которые не влияют на суть излагаемого подхода и могут быть сравнительно легко учтены при повышении уровня сложности модели:

⇐ не учитываются нитрифицирующие бактерии типа Heterotrophs, Nitrosomonas, Nitrobacter, которые не подлежат стандартным измерениям;

⇐ не учитывается зоопланктон, поскольку его продуктивность обычно не превышает 10 % от продуктивности фитопланктона [1], и он вносит наименьший вклад в массу и деструкцию органического вещества;

⇐ фитопланктон характеризуется как гомогенная масса с осредненными характеристиками.

Система дифференциальных уравнений согласно принятой схеме взаимосвязей компонент имеет вид (для удобства сопоставления результатов нумерация компонент сохранена, как в [2]):

$$\left\{ \begin{array}{l} LN_1 = k'_{71}N_7 - k'_{12}N_1 - k^\circ_{14}N_4 + f_1; \\ LN_2 = k'_{12}N_1 - k'_{23}N_2 + f_2; \\ LN_3 = k'_{23}N_2 - k^\circ_{34}N_4 + f_3; \\ LN_4 = (k^\circ_{14} + k^\circ_{34})N_4 - k'_{46}N_4 + f_4; \\ LN_6 = k'_{46}N_4 - k'_{67}N_6 - V_n + f_2; \\ LN_7 = k'_{67}N_6 - k'_{71}N_7 + f_7; \\ LP_1 = a_p k'_{46}N_4 - k'_p P_1 - V_p + f_{p1}; \\ LP_2 = k'_p P_1 - a_p (k^\circ_{14} + k^\circ_{34})N_4 + f_{p2}; \\ LC = a_c k'_4 N_4 - k'_c C - V_c + f_c; \\ LS = -k'_c C - \gamma_1 k'_{12}N_1 - \gamma_2 k'_{23}N_2 - \gamma_p k'_p P_1 + \frac{\Delta\gamma_4}{n} k'_{46}N_4 + k'_r (S_n - S) + f_s, \end{array} \right. \quad (1)$$

где  $L \equiv \frac{d}{dt}$  – дифференциальный оператор,  $k^\circ_{\xi 4} = \frac{k_f \mu_{\xi 4} \bar{N}_\xi}{(k_{s\xi 4} + \bar{N}_\xi)} m_p$ ,  $\xi = 1, 3$  ;

$V_n = k_{cd}(N_6 - k_{cn}V)$ ,  $V_p = a_p k_{cp}V_n$ ,  $V_c = k_{cd}(C - k_{cc}V)$ ;  $m_p = P_2 / (k_{sp} + P_2)$ ; азот:  $N_1$  – аммонийный ( $\text{NH}_4$ ),  $N_2$  – нитритный ( $\text{NO}_2$ ),  $N_3$  – нитратный ( $\text{NO}_3$ ),  $N_4$  – фитопланктона (Phy),  $N_6$  – взвешенного органического вещества (ВОВ),  $N_7$  – растворенного органического вещества (РОВ);  $P_1$  – фосфор органический (Рорг),  $P_2$  – фосфор минеральный (Рмин),  $C$  – полное биохимическое потребление кислорода (БПК),  $S$  – растворенный кислород (РК);  $\bar{N}_\xi$  – усредненные концентрации компонент на некотором квазистационарном промежутке времени;  $k'_{iu}$  – коэффициенты, характеризующие скорость транс-

формации  $i$ -той компоненты в  $u$ -тую или скорость отмирания фитопланктона;  $\mu_{\xi 4}$ ,  $k_{s, \xi 4}$  – максимальная скорость роста популяций фитопланктона и коэффициенты полунасыщения по кинетике Михаэлиса-Ментен, Моно ( $k_{sp}$  – по фосфору);  $\Delta\mu_4$  – разница между коэффициентом фотосинтетической активности  $\mu_4$  и интенсивности потребления кислорода фитопланктоном на дыхание  $\mu^0_4$ ,  $k_f$  – коэффициент освещенности;  $k_{cd}$  – коэффициент седиментации – процесса оседания мелких взвешенных частиц под действием гравитационного поля;  $V$  – равновесная концентрация взвесей,  $k_{cn}$ ,  $k_{cp}$ ,  $k_{cc}$  – коэффициенты связи органического азота, фосфора и БПК с этими фракциями;  $\gamma_1$   $\gamma_2$   $\gamma_p$  – стехиометрические коэффициенты (удельный расход РК на окисление соответствующего вещества);  $a_p = 0,011/n$ ,  $a_c = 1,5/n$  – коэффициенты пересчета концентрации планктона из единиц азота в единицы фосфора и сухое органическое вещество,  $n = 0,076$  – удельное содержание азота в сухом органическом веществе планктона;  $k'_r$  – коэффициент ре-аэрации,  $S_n$  – концентрация предельного насыщения РК (равновесная концентрация РК, соответствующая его максимальной растворимости при данной температуре и давлении);  $f_1, \dots, f_c, f_s$  – функции внешних источников.

Для представления аналитического решения в форме, удобной для практической реализации на ПЭВМ, целесообразно выполнить некоторые изменения обозначений и нумераций исследуемых компонент согласно табл. 1

Поменяв нумерацию компонент модели в соответствии с табл. 1, решение системы уравнений (1) можно представить в следующем виде [5]:

$$\left\{ \begin{array}{l} C_i = C_{0i}k_i + q_i f_i^* + P_i, \quad i = \overline{1, I_j}; \\ P_i = \sum_z \sum_{m=1}^{i_1} \sum_{u=m}^{i_3} \alpha_{im}^{(z)} (C_{0m} F_{i b_u} + q_m x G_{i b_u}) \prod_{s=m}^{i_3} k''_{b_s b_{s+1}} \rho_{b_s b_u}, \quad i \geq i_2; \\ f_i^* = \frac{k_i - 1}{\ln k_i}; \quad F_{i r} = K'_r \frac{(k_i - k_r)}{(K'_r - K'_i)}; \quad G_{i r} = K'_r \frac{f_i^* - f_r^*}{(K'_r - K'_i)}; \\ \rho_{su} = \frac{K'_s}{(K'_s - K'_u)} \quad \text{è è è } 1 \text{ ì ð è } s = u; \quad k_i = \exp(-K'_i t), \quad q_i = q'_i t, \end{array} \right. \quad (2)$$

где  $I_j$  – количество компонент по одной из  $j$ -той последовательной цепочке их транс-

формации,  $K'_i = \sum_{u=i+1}^I k'_{iu} + v'_i$  – обобщенный коэффициент трансформации  $i$ -той компо-

ненты в остальные – по последовательной цепочке по мере возрастания индекса  $u$ :  $i+1 \leq u \leq I$ ;  $k'_{iu}$  – коэффициенты трансформации компонент (нумерация соответствует концентрациям  $C_i$ );  $v'_i$  – обобщенный коэффициент обмена  $i$ -той компоненты с другими подуровнями такой, что  $v'_i < 0$  – соответствует поступлению компоненты,  $v'_i > 0$  – ее уходу;  $C_{0i}$  – начальные концентрации,  $q'_i = const$  – функции внешних источников,  $k''_{iu} = k'_{iu} / K'_i$  – нормированный (безразмерный) коэффициент трансформации между парой  $i, u$ -тых компонент;  $\alpha_{im}^{(z)}$  – параметр долевого участия  $i$ -той компоненты на  $m$ -тую;  $i_1, i_2$  – номера узлов соответственно перед первой и после последней удаленной вершиной графа в  $z$ -м столбце матрицы взаимосвязей компонент  $b_{rz}$  [5];  $\tilde{x}$  – количество пропускаемых компонент при формировании параллельных цепочек,  $i_3 = i - 1 - \tilde{x}$ . Индекс  $z$  в  $b_{rz}$  для простоты записи в (2) опущен.

Таблица 1 – Сопоставление обозначений компонент и параметров модели

Изменение обозначений			$v'_i =$	$q'_i =$	$k'_{iu} =$										
					1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	
Phy	$N_4$	$C_1$	0	$f_4$	1	$k'_{46}$	0	0	$a_4$	0	$b_4$	0	$a_4+b_4$	0	0
ВОВ	$N_6$	$C_2$	$k_{cd}$	$f_6 + k_{cd}k_{cn}V$	2		$k'_{67}$	0	0	0	0	0	0	0	0
РОВ	$N_7$	$C_3$	0	$f_7$	3			$k'_{71}$	0	0	0	0	0	0	0
НН <sub>4</sub>	$N_1$	$C_4$	0	$f_1$	4				$k'_{12}$	0	0	0	0	0	0
NO <sub>2</sub>	$N_2$	$C_5$	0	$f_2$	5					$k'_{23}$	0	0	0	0	0
NO <sub>3</sub>	$N_3$	$C_6$	0	$f_3$	6						0	0	0	0	0
Рорг	$P_1$	$C_7$	$k_{cd}$	$f_{p1} + k_{cd}k_{cp}V$	7							$k'_p$	0	0	0
Рмин	$P_2$	$C_8$	0	$f_{p2}$	8								0	0	0
БПК	$C$	$C_9$	$k_{cd}$	$f_c + k_{cd}k_{cc}V$	9									$k'_c$	0
РК	$S$	$C_{10}$	0	$f_s + k_r S_n$	10										$k'_r$

Главное отличие представленного решения от [5, 6] заключается в присутствии в нем матрицы  $\alpha^{(z)}$ , элементы которой характеризуют вклад соответствующей компоненты при ее трансформации в другое вещество. В частности, для группы азотосодержащих соединений при их последовательном превращении – матрица  $\alpha^{(z)} \equiv 1$ . По другим компонентам отдельные элементы уже не равны нулю, что обусловлено присутствием в модели параметров типа  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_p, a_p, a_c$  и т.п.

Значения элементов матрицы  $\alpha^{(z)}$  полагаются равными 1, затем отдельные элементы меняются на соответствующие значения согласно таблице 2.

Таблица 2 – Значения элементов матрицы  $\alpha_{im}^{(z)}$  ( $m = \overline{1, I-1}$ ) и последовательности  $b$  трансформируемых компонент для фосфора, БПК и РК

	Фосфор	БПК	Растворенный кислород				
			по NH <sub>4</sub>	по NO <sub>2</sub>	по БПК	по Рорг	по Phy
$\alpha$	$\alpha_{im} = a_p$	$\alpha_{ml} = a_c$	$\alpha_{ml} = -\gamma_1$	$\alpha_{ml} = -\gamma_2$	$\alpha_{13} = -a_c$ $\alpha_{23} = -1$	$\alpha_{13} = -\gamma_p a_p$ $\alpha_{23} = -\gamma_p$	$\alpha_{12} = (\gamma_p - \gamma'_p)/n$
$I$	3	2	5	6	3	3	2
$b$	1	1	1	1	1	1	1
	7	9	2	2	9	7	10
	8		3	3	10	10	
			4	4			
			10	5			
$z$	1	1		10	5		

С целью проверки корректности полученных аналитических соотношений (2) проводилось сопоставление результатов расчета при решении системы дифференциальных уравнений (1) в математической системе MathCAD 8.0 Professional с помощью программы rkfixed – метод Рунге-Кутты (rk) 4-го порядка с фиксированным (fixed) шагом интегрирования. Различие не превышает  $10^{-8}$ , то есть находится в пределах точности решения самим методом Рунге-Кутты. Изменение расчетных значений концентраций компонент в зависимости от некоторых параметров модели представлены в табл. 3.

Таблица 3 – Тенденции изменения расчетных значений концентраций взаимосвязанных компонент в зависимости от параметров модели (↑ – увеличение, ↓ – уменьшение)

Параметры модели		Phy	ВОВ	РОВ	NH <sub>4</sub>	NO <sub>2</sub>	NO <sub>3</sub>	Рорг	Рмин	БПК	РК
Коэффициент освещенности	$k_f$ ↑	↑	↑	↑	↓	↓	↓	↑	↓	↑	↓
Коэффициент седиментации	$k'_{cd}$ ↑	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↑
Равновесная концентрация	$V$ ↑	–	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↓
Максимальные скорости роста популяций фитопланктона	$\mu'_{14}$ ↑	↑	↑	↑	↓	↓	↓	↑	↓	↑	↓
	$\mu'_{34}$ ↑	↑	↑	↑	↑	↑	↓	↑	↓	↑	↓

**Выводы.** Вследствие аналитического представления модель совместной трансформации биогенных элементов и растворенного кислорода приемлема для решения задач оптимизации и краткосрочного прогнозирования качества воды в области охраны вод. Модель достаточно полно описывает процессы изменения компонент, проста в эксплуатации, допускает простые процедуры идентификации ее параметров по данным натурных измерений и может быть легко модифицирована к статистическому виду [6].

#### Литература

1. Зенин А.А., Белоусов Н.В. Гидрохимический словарь. – Л.: Гидрометеиздат, 1988. – 240 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. Леонов А.В. Математическая модель совместной трансформации соединений азота, фосфора и кислорода в водной среде: ее применение для анализа динамики компонент в евтрофном озере// Водные ресурсы. – 1989, № 2. – С. 105-123.
4. Айзатуллин Т.А., Шамардина И.П. Математическое моделирование экосистем континентальных водотоков и водоемов// Итоги науки и техники. Сер. Общая биология, биоценология, гидробиология. Т. 5. М.: ВИНТИ, 1980. – С. 154-228.
5. Василенко С.Л. Моделирование процессов последовательно-параллельной трансформации веществ для решения задач оптимизации в области охраны вод// Інтегровані технології та енергозбереження. – 2004, № 1. – С. 104-110.
6. Василенко С.Л. Моделирование последовательной трансформации веществ в водотоках// Екологія і ресурси: Зб. наук. праць. – К.: УІНСіР РНБОУ, 2003. – Вип.7. – С. 56-64.

УДК 628.394.57:577.472

Василенко С.Л.

### МОДЕЛЮВАННЯ СПІЛЬНОЇ ТРАНСФОРМАЦІЇ БІОГЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ І РОЗЧИНЕНОГО КИСНЮ ДЛЯ ПРОГНОЗУВАННЯ ЯКОСТІ ВОДИ

У статті викладений підхід до розробки математичної моделі, що описує процеси сумісного трансформування шести компонентів, які містять азот: амонійний, нітритний, нітратний, фітопланктону, завислих і розчинених органічних речовин, а також фосфору, біохімічного споживання кісню та розчинного кісню. Отримана модель відсвічує основні причинно-наслідкові зв'язки реальних процесів трансформації компонентів і придатна для практичного використання при рішенні задач прогнозування якості води та оптимізації в області охорони вод.