

МОДЕЛЮВАННЯ ЛОКАЛЬНИХ ГІДРОДИНАМІЧНИХ ПОТОКІВ В ОЗЕРНИХ ЕКОСИСТЕМАХ

© Юзевич В., Сопрунюк П., Луців Н., 2010

Запропоновано рекомендації щодо моделювання гідродинамічних потоків в озерних екосистемах з урахуванням відновлювальних процесів.

Ключові слова: моделювання, екологія, гідродинамічні процеси, водне середовище, лімнологія.

The recommendation for the modelling of hydrodynamic streams in lacustrine ecological systems taking into account restoration processes are offered.

Keywords: modelling, ecology, hydrodynamic processes, water environment, limnology.

Вступ

Якість води і стан прісноводних екосистем різних водних об'єктів (річок, водосховищ, озер тощо) визначаються різними гідрохімічними, гідробіологічними та гідрофізичними показниками. На динаміку цих показників впливають численні абіотичні і біотичні процеси, що відбуваються внаслідок взаємодії різних компонентів екосистеми із зовнішніми природними факторами і факторами антропогенного походження [1]. Крім цього, на динаміку водного і гідрохімічного режимів впливають внутрішньоводоймні процеси. Зокрема, перевага у водних екосистемах тих чи інших видів гідробіонтів (а також інших водних організмів) визначає напрямок розвитку гідробіологічних процесів, які істотно впливають на формування якості води водних об'єктів. Тому математичні та імітаційні моделі формування якості води водойм за умов антропогенного впливу повинні будуватися (розроблятися) з урахуванням взаємодії всіх основних факторів і процесів, що впливають на динаміку показників якості води, зокрема показників гідрохімічного та гідродинамічного режимів.

Зв'язок проблеми з науковими та практичними завданнями

Практичне завдання: Для вивчення гідродинамічних та гідрохімічних режимів водних об'єктів необхідно врахувати основні фізичні, хімічні й біологічні закони, які зумовлюють поширення 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.

Наукове завдання. Необхідно за допомогою методів математичного моделювання розкрити механізми взаємодії гідродинамічних потоків водного середовища та запропонувати шляхи удосконалення відновлювальних процесів з подальшим покращанням якості води.

Елементи моделювання гідродинамічних потоків та гідробіологічних параметрів у водних екосистемах розглядались у працях [1–3].

Метою досліджень є моделювання гідродинамічних процесів, за допомогою яких можна визначати й прогнозувати динаміку кількісних показників (концентрацій) різних речовин (домішок, інгредієнтів), що впливають на водний і гідрохімічний режими водоймищ, а також на забруднення води токсичними і радіоактивними речовинами.

Об'єкт досліджень – взаємозв'язані гідродинамічні та гідрохімічні процеси у водних екосистемах поверхневих вод та їх зміни в процесах антропогенного навантаження.

Предмет досліджень – математичні моделі, методологія та методики оцінок гідродинамічних і гідрохімічних характеристик водного середовища, а також відповідні методики екологічного моніторингу.

Основна частина

Під час аналізу умов формування гідродинамічних потоків і водних та гідрохімічних режимів водоймищ (озер) в лімнології (озерознавстві) визначають основні фактори, що істотно впливають на зміну концентрації того чи іншого інгредієнта. До таких факторів належать:

- оцінка річкових стоків чи пропусків води для озер;
- вплив підземних стоків;
- 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 (інгредієнтів) внаслідок фізико-хімічних, радіоактивних і біологічних перетворень;
- випаровування води з поверхні водоймищ.

Розглянемо найпростішу модель евтрофікації на фоні гідродинамічних процесів. Стан екосистеми прісноводного водоймища (озера) достатньо повно описується такими фазовими змінними [4]: $a(t)$ – біомаса фітопланктону (продуцентів); $z(t)$ – біомаса зоопланктону (консументів); $c(t)$ – концентрація забруднюючих (неконсервативних) речовин; $\xi(t)$ – концентрація біогенних (поживних) речовин; $s(t)$ – маса детриту (мертвої органіки); $b(t)$ – біомаса бактерій; $\zeta(t)$ – концентрація кисню, розчиненого у воді.

Кожну зі змінних, своєю чергою, можна поділити на окремі складові, але в загальному випадку на стан екосистеми і якість води впливає динаміка саме цих речовин. Взаємодія між зазначеними змінними описується діаграмою потоків, які проходять на фоні гідродинамічних потоків. Характер цих потоків визначає якісну картину процесів трансформації речовин у водоймищах, що евтрофікуються, тобто вони приводять до концептуальної моделі процесу евтрофікації.

Для моделювання гідродинамічних процесів у водному середовищі озера позначимо потоки в декартових координатах x , y , z . На першому етапі достатньо розглянути локальну (точкову) модель для усереднених концентрацій. Поздовжній потік речовини з концентрацією $c(x,y,z,t)$ визначають виразом

$V_x c - D_x \frac{dc}{dx}$, поперечний потік – $V_y c - D_y \frac{dc}{dy}$, а вертикальний потік – виразом $V_z c - D_z \frac{dc}{dz}$. Тут V_x ,

V_y , V_z – компоненти (складові) вектора V середньої швидкості течії. Коефіцієнти турбулентної дифузії у 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 аплікват Oz , позначимо відповідно через D_x , D_y і D_z .

Згідно із законом збереження маси речовини, рівняння поширення неконсервативних речовин і біогенних елементів у потоці рідини мають вигляд [1]:

$$\frac{dc}{dt} = \frac{d}{dx} \left(D_x \frac{dc}{dx} - V_x c \right) + \frac{d}{dy} \left(D_y \frac{dc}{dy} - V_y c \right) + \frac{d}{dz} \left(D_z \frac{dc}{dz} - V_z c \right) - \alpha^* c + f(x, y, z, t), \quad (1)$$

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{d}{dx} \left(D_x \frac{d\xi}{dx} - V_x \xi \right) + \frac{d}{dy} \left(D_y \frac{d\xi}{dy} - V_y \xi \right) + \frac{d}{dz} \left(D_z \frac{d\xi}{dz} - V_z \xi \right) - \alpha^* \xi + f(x, y, z, t), \quad (2)$$

де α^* – стала (коефіцієнт) швидкості седиментації, $f(x,y,z,t)$ – член, що описує внутрішні джерела і стоки (неконсервативність, самоочисну здатність, трансформацію, сорбцію, десорбцію та інші кінетичні процеси).

Оскільки в більшості реальних водоймищ світло не є лімітуючим фактором, то можна не враховувати залежність швидкості фотосинтезу від освітленості. Користуючись наведеними параметрами концептуальної моделі, складемо потокові (балансові) рівняння для параметрів $a(t)$, $z(t)$, $s(t)$, $b(t)$, $\zeta(t)$:

$$\begin{aligned} \frac{da}{dt} &= q_{ca} - q_{az} - q_{as}, & \frac{dz}{dt} &= q_{az} - q_{zs}, & \frac{ds}{dt} &= q_{as} - q_{zs} - q_{sb}, \\ \frac{db}{dt} &= q_{sb} - q_{bc}, & \frac{d\zeta}{dt} &= k(\zeta_c - \zeta) + q_{a\zeta} - q_{\zeta b}, \end{aligned} \quad (3)$$

де q_{ij} – потік речовини з i -го блоку в j -й; ζ_c – концентрація кисню при насиченні ним води; k – коефіцієнт реаерації.

Для знаходження розв'язку рівнянь (1)–(3) необхідно знати початкові й граничні умови, які можна записати для концентрації $c(x, y, z, t)$ в такому вигляді :

$$c(x, y, z, t_0) = c_0(x, y, z), \quad (4)$$

$$c(x, y, z, t)|_{x=x_1} = c_1(x, y, z), \quad \left. \frac{dc}{dx} \right|_{x=x_2} = 0, \quad \frac{dc}{dn} = 0, \quad (5)$$

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 (озера, ріки, лиману тощо).

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

$$\left[V_z c - D_z \frac{dc}{dz} \right]_{z=0} = c_{оп} q_{оп}, \quad (6)$$

де $q_{оп}$ – кількість атмосферних опадів, що випадає на одиницю площі дзеркала водної поверхні;

$c_{оп}$ – концентрація речовини, що міститься в атмосферних опадах.

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

$$c(x, y, h_B, t) = c_\phi, \quad \left[V_z c - D_z \frac{dc}{dz} \right]_{z=h_B} = c_\phi q_\phi, \quad (7)$$

де c_ϕ – концентрація солей у підземних водах, q_ϕ – вертикальна складова швидкості фільтрації підземних вод, h_B – глибина водоймища.

На поверхні водного середовища озера $z=z_p(x)$ кінематичні умови, напруження вітру і потік тепла записують так [4]:

$$\frac{\partial z_h}{\partial t} + V_x \frac{\partial z_h}{\partial x} = V_z, \quad K_z \frac{\partial V_x}{\partial z} = \frac{\tau_w}{\rho}, \quad c_p \rho D_z \frac{\partial T}{\partial z} = q_n, \quad (8)$$

де τ_w – напруження вітру; q_n – потік тепла; c_p – питома теплоємність води; z_h – відхилення рівня води від незбуреного значення z_p ; τ – густина води; K_z – коефіцієнт турбулентної в'язкості у вертикальному напрямку; T – абсолютна температура.

На дні озера при $z=z_d(x)$ у першому наближенні приймають умови непроникності, квадратичний закон опору тертя, нульовий потік тепла q_n [4]:

$$V_z = 0, \quad K_z \frac{\partial V_x}{\partial z} = k_b |V_x| V_x, \quad \frac{\partial T}{\partial z} = 0. \quad (9)$$

Тут $k_b(S_m, T)$ – об'ємний модуль пружності води (за даними ЮНЕСКО); S_m – мінералізація.

Аналогічні до (4)–(9) початкові й граничні умови записують для параметрів $a(t)$, $z(t)$, $s(t)$, $b(t)$, $\zeta(t)$.

Отже, за відомих величин V_x , V_y , V_z , D_x , D_y , D_z , α^* , $f(x, y, z, t)$ питання про розподіл у просторі й часі речовин, що мігрують у водному середовищі, зводиться до розв'язання рівнянь (1)–(3) з початковими і граничними умовами типу (4)–(9). Існує багато різних аналітичних, чисельно-аналітичних і чисельних методів розв'язування крайових задач типу (1)–(9), які можна застосувати для опису масоперенесення $c(t)$, $\zeta(t)$, $a(t)$, $z(t)$, $s(t)$, $b(t)$, $\zeta(t)$ на фоні гідродинамічних процесів. Зауважимо, що для екологічних досліджень моделювання поширення (міграції) речовин у відкритих потоках (поверхневих водах) за допомогою наведених диференціальних рівнянь не достатньо ефективно. Хоча за цією моделлю і можна розробити імітаційну модель формування гідрохімічного режиму в різних водоймах, але створення такої моделі пов'язано зі значними математичними (обчислювальними) труднощами. Необхідно також звернути увагу на той факт, що для інженерних екологічних розрахунків немає необхідності одержувати детальну інформацію про розподіл концентрацій забруднень у кожній точці водоймища. Крім цього, точність такої інформації була б невеликою, бо неможливо визначити з великою точністю локальні швидкості

течії, значення коефіцієнтів турбулентної дифузії та інші величини, що входять до рівняння і граничні умови (1)–(9).

При побудові імітаційної математичної моделі гідрохімічного і водного режимів, як правило, використовуються достатньо прості математичні методи. Зокрема, для спрощення рівнянь (1)–(3) вдаються до зменшення їх вимірності шляхом осереднення шуканих величин (концентрацій, швидкостей тощо) за однієї або двома просторовими координатами, а інколи і за всього досліджуваного простору (по всій ділянці) [1,5]. Вертикальне осереднення по координаті z зводить дані рівняння до двовимірної «планової» моделі, яка застосовується для дослідження широких, але неглибоких водоймищ. Осереднення в поперечному напрямку, тобто за координатою y , зводить рівняння до двовимірної профільної моделі, яка застосовується для вивчення вузьких і глибоких водоймищ (стратифіковані глибокі й неширокі озера та естуарії тощо). Осереднення величин у вертикальному і поперечному горизонтальному напрямках зводить просторову модель до одновимірної нестационарної математичної моделі, яка найчастіше застосовується 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. У випадку, коли осереднюються шукані характеристики в часі, одержуємо стаціонарні моделі, які можна застосовувати на невеликих проміжках часу (порівняно зі швидкістю проходження досліджуваних процесів). Нарешті, якщо осереднення відомих і невідомих величин (характеристик) відбувається по всьому просторі (по всій ділянці водного об'єкта), то в цьому випадку приходимо до побудови нульвимірної або камерної математичної (імітаційної) моделі [1].

Імітаційну математичну модель розробляють, безпосередньо будуючи камерну (нульвимірну) модель на основі просторового осереднення процесів і складання балансових рівнянь у деякій виділеній області G [1,5]. Якщо область G доволі велика порівняно з масштабами тих процесів, що в ній відбуваються, і в області G спостерігається значна неоднорідність розподілу значень досліджуваних показників (наприклад, концентрація радіонуклідів), то в цьому випадку вся область (ділянка) G розбивається на підобласті G^i ($i=1,2,3,\dots,n$) і кожна підобласть G^i приймається за окрему «камеру» (реактор). Зв'язок між цими камерами, як правило, описується через водообмін і масообмін хімічних та біологічних компонент. Внаслідок побудови таких багатокамерних моделей з достатньою для практики точністю можна математично описувати процес поширення і трансформації речовин у просторі й часі, причому в просторі – дискретно, а в часі – неперервно.

У блоці «Консументи» поєднуються біомаси зоопланктону, бентосу, риб тощо, але при такій агрегації в реальних екосистемах біомаса консументів є малою величиною порівняно з біомасами продуцентів чи бактеріопланктону. Водночас у цьому блоці постійно відбувається переробка значних кількостей речовини: споживається фітопланктон, виділяється детрит. З іншого боку, звичайно, біомаса консументів – порівняно повільно змінна компонента екосистеми. Це пояснюється тим, що, по-перше, консументи пов'язані в ієрархічні трофічні ланцюги зі стійкою структурою, а по-друге – мають доволі складну трофічну поведінку, що дає їм змогу незначно залежати від коливань ресурсу фітопланктону.

Це дає підстави розглядати консументи як проточний блок, в якому відбувається швидка трансформація речовини. Тому можна вважати, що dz/dt має порядок ϵ , де $\epsilon \ll 1$ — малий параметр і до співвідношень (1)–(9) застосувати методику розв'язання задач, в основу якої покладено метод розкладу параметрів стану за малим параметром [6].

Тоді $z(t) \approx z^0 = \text{const}$, а

$$q_{az} = V_a(a, z)z \approx V_a(a, z^0)z^0, \quad (10)$$

де $V_a(a, z)$ – трофічна функція споживання фітопланктону консументами.

У природних системах трофічні ланцюги, як правило, є напруженими, і ефект насичення відсутній. Якщо ж припустити, що внутрішньовидовою конкуренцією серед консументів можна знехтувати, то вираз $V_a(a, z)z$ природно записати у вигляді: $V_a(a, z^0)z^0 \approx m_1 a z^0 = m_a^1 a$. При цьому константа $m_a^1 a$ описує певну додаткову «смертність» фітопланктону за рахунок консументів.

Збільшення складності трофічних ланцюгів в екосистемі (як і збільшення біомаси консументів) призводить до зростання $m_a^1 a$.

Оскільки характерні часи росту мікроорганізмів є меншими за характерні часи решти процесів, то можна вважати, що біомаса бактерій не лімітує швидкості біорозкладу органічної речовини: чисельність бактерій-деструкторів швидко підлаштовується до змін середовища, практично не затримуючи процес розкладання. Звичайно, це справджується тільки для доволі усереднених систем, в яких не враховуються різні ефекти температурного, світлового, токсичного та інших типів інгібування.

З урахуванням ієрархії відповідні рівняння для бактерій можна записати у вигляді:

$$\varepsilon \frac{db}{dt} = q_{sb} - q_{bc} \quad (11)$$

Величина $b(t)$ швидко прямує до свого стаціонарного значення, яке природно вважати функцією від біомаси детриту: чим більшою є кількість мертвої органіки, тим більшою є біомаса бактерій, які її розкладають. Отже, при $t \rightarrow \infty$: $b(t) \rightarrow b^*(s) \approx \lambda \cdot s(t)$.

Після цього можна вважати, що потік q_{sb} приблизно дорівнює потоку q_{bc} , оскільки біомаса детриту s у бактеріальному масштабі часу є повільною змінною величиною, і тому $db^*/dt \approx 0$.

Потік q_{sb} можна подати в такому вигляді:

$$q_{sb} = q_{sb}(s, b, \zeta) = \mu_0(\zeta)Q(s, b), \quad (12)$$

де $\mu_0(\zeta)$ – кисневий коефіцієнт, $Q(s, b)$ – швидкість мінералізації органіки.

При таких припущеннях $Q(s, b) \approx Q(s, b^*) \approx \lambda_0 \cdot s$. Отже, $q_{sb} = \lambda_0 \mu_0(\zeta) s = s \mu(\zeta)$. Тут $\mu(\zeta)$ – коефіцієнт бактеріального розпаду детриту, який залежить від концентрації кисню у воді.

Функція $\mu(x)$ відображає зміну швидкості біорозкладу при переході від аеробних до анаеробних умов: ζ_a^1 і ζ_a^2 – певні порогові значення концентрації кисню; $\zeta > \zeta_a^1$ відповідає аеробним умовам, $\zeta < \zeta_a^2$ – анаеробним, а при $\zeta_a^2 < \zeta < \zeta_a^1$ встановлюються певні проміжкові режими.

Нехай $q_{\xi a} = a V_{\xi}(\xi, a)$, де $V_{\xi}(\xi, a)$ – трофічна функція споживання біогенів фітопланктоном.

У найпростішій моделі вважається, що $V_{\xi} = V_{\xi}(\xi)$. Оскільки $V_{\xi}(0) = 0$ і $V_{\xi}(\infty) < \infty$, то для конкретного завдання $V_{\xi}(\xi)$ можна використовувати функцію Моно [4]:

$$V_{\xi}(\xi) = \frac{\alpha \xi}{\delta + \xi}, \quad (13)$$

де α – максимальна швидкість росту фітопланктону, δ – константа Міхаеліса.

Природна смертність фітопланктону задається у вигляді: $q_{as} = m_a a$; тоді сумарна втрата біомаси фітопланктону: $q_{as} + q_{as} = m_a a + m_a^1 = \rho \cdot a$.

Можна вважати, що потік кисню, утвореного при фотосинтезі, лінійно залежить від біомаси планктону $q_{a\xi} = q_{a\xi}(a) = \beta a$, де β – коефіцієнт швидкості виділення кисню.

Також можна прийняти $q_{\zeta b} = \gamma q_{sb}$, де γ – коефіцієнт споживання кисню при розкладі органічної речовини.

Найважливішим чинником, що істотно впливає на процеси формування якості води і на стан водних екосистем, є розчинений кисень (РК). Вміст у воді кисню входить до числа основних інтегральних показників, що визначають якість поверхневих вод як одного з цінних природних ресурсів.

Кисень грає важливу роль не тільки в підтримці існуючих форм життя в різних водних об'єктах, але і в процесах трансформації речовин, що потрапляють у водоймища і водотоки із стічними водами урбанізованих і промислових територій, а також із стоками з сільськогосподарських угідь і крупних тваринницьких комплексів. У зв'язку з антропогенною дією, що посилюється, кисневий режим багатьох річок, водосховищ і озер стає все більш напруженим, збільшується частота і тривалість деструктивних явищ. При цьому значна кількість РК витрачається на розкладання органічних речовин. Як відомо, мірою вмісту органічної речовини та інтенсивності її деструкції (розкладання) є біохімічне споживання кисню (БСК). Завдяки тісному

взаємозв'язку між зміною кількості розчиненого кисню і наявністю у воді органічної речовини великого значення при дослідженні гідробіологічних і гідрохімічних процесів набувають математичні моделі РК-БСК.

Класичними результатами в області моделювання кисневого режиму і динаміки органічної речовини є дослідження Стрітера і Фелпса, які запропонували формули для розрахунку динаміки БПК і РК. Запропоновані ними співвідношення математичної моделі мають вигляд:

$$\frac{dc_{БСК}}{dt} = -k_1 c_{БСК}, \quad (14)$$

$$\frac{dc_{РК}}{dt} = k_2 (c_{РК}^* - c_{РК}) - k_1 c_{БПК}, \quad (15)$$

де $c_{РК}$ – концентрація розчиненого кисню; $c_{БСК}$ – концентрація легкобіоокислювальної органічної речовини, виміряної в одиницях споживання; $k_1 = k_1(c_{РК})$ – коефіцієнт швидкості біохімічного окиснення; $k_2 = k_2(T)$ – коефіцієнт аерації, залежний від температури води T ; $c_{РК}^*$ – концентрація насичення кисню у воді.

Зупинимось тепер детально на складанні диференціальних рівнянь з частковими похідними, що описують динаміку РК і БПК у водоймищах і водотоках. При цьому зазначимо, що зазвичай виділяють три найважливіші чинники, які впливають на зміну РК: збагачення водних мас киснем, що міститься в атмосфері (аерація води); виділення кисню водними рослинами при фотосинтезі; поглинання кисню при розкладанні органічних і неорганічних речовин. Виділимо в потоці рідини достатньо малий (елементарний) паралелепіпед об'ємом ΔW з ребрами Δx , Δy , Δz , паралельними осям прямокутної декартової системи координат. Зміна маси кисню $\Delta M_{РК}$ в елементарному об'ємі ΔW за час Δt дорівнює

$$\Delta M_{РК} = \Delta M_x + \Delta M_y + \Delta M_z - k_1 c_{БСК} \Delta W \Delta t + k_2 (c_{РК}^* - c_{РК}) \Delta S \Delta t - E \Delta W \Delta t + f_{РК} \Delta W \Delta t, \quad (16)$$

де M_x, M_y, M_z – зміни маси кисню за рахунок перенесення через грані паралелепіпеда; $k_1 c_{БСК} \Delta W \Delta t$ – член, що характеризує споживання кисню на біохімічне розкладання органічної речовини; $k_2 (c_{РК}^* - c_{РК}) \Delta S \Delta t$ – кількість кисню, що проходить за рахунок аерації; $c_{РК}^*$ – концентрація повного насичення кисню у воді за певної температури; $E \Delta W \Delta t$ – член, що описує виділення кисню з водної товщі у вигляді бульбашок, коли його концентрація перевищує деяке критичне значення; $f_{РК} \Delta W \Delta t$ – член, який враховує виникнення і зникнення кисню в елементарному об'ємі за рахунок всіх інших джерел і стоків (наприклад, фотосинтез або процеси дихання гідробіонтів). Запишемо вирази для ΔM_x , ΔM_y , ΔM_z :

$$\Delta M_x = M_x - M_{x+\Delta x} = (m_x - m_{x+\Delta x}) \Delta y \Delta z \Delta t, \quad (17)$$

$$\Delta M_y = M_y - M_{y+\Delta y} = (m_y - m_{y+\Delta y}) \Delta x \Delta z \Delta t, \quad (18)$$

$$\Delta M_z = M_z - M_{z+\Delta z} = (m_z - m_{z+\Delta z}) \Delta x \Delta y \Delta t. \quad (19)$$

Тут m_x, m_y, m_z – складові дифузійного потоку речовини, які визначаються відповідно до узагальненого закону Фіка наступною рівністю:

$$m_x = V_x c_{РК} - D_x \frac{\partial c_{РК}}{\partial x}, \quad m_y = V_y c_{РК} - D_y \frac{\partial c_{РК}}{\partial y}, \quad m_z = V_z c_{РК} - D_z \frac{\partial c_{РК}}{\partial z}, \quad (20)$$

На зміну концентрації в озері j -ї забруднюючої речовини значно впливають процеси трансформації цієї речовини в результаті її хімічного та біохімічного перетворення й інших видів розкладання. Описати всі види трансформації неорганічної і органічної речовини за допомогою диференціальних рівнянь поки що не можливо. Зупинимось на деяких найістотніших моментах трансформації j -ї речовини, які необхідно враховувати при визначенні і прогнозуванні концентрації речовини відповідно до моделі гідрохімічного та гідродинамічного режимів з урахуванням процесів самоочищення.

Самоочищення водних систем (озер, річок) обумовлене багатьма природними, а часто і техногенними, чинниками. До цих чинників належать різні гідродинамічні, гідрологічні, гідрохімічні та гідробіологічні процеси. Основні з них: розчинення, седиментація, сорбція, розкладання складних органічних речовин і трансформація неорганічних (зокрема біогенних) речовин. Зазвичай самоочищувальну здатність водної системи (об'єкта, зокрема, озера) визначають за зміною хімічного складу води на двох і більше створах, один з яких розташований вище за джерело забруднення (фоновий створ), а інші – на ділянці вивчення процесів самоочищення. В цьому випадку самоочищувальна здатність (СЗ) води відносно j -ї хімічної речовини на i -й ділянці водного об'єкта обчислюється за допомогою виразу:

$$(CЗ)^{ij} = \frac{c_0^{i-1,j} - c_\tau^{ij}}{c_0^{i-1,j}}, \quad (CЗ)_\Sigma^{ij} = \sum_{j=1}^N \frac{a_j (c_0^{i-1,j} - c_\tau^{ij})}{c_0^{i-1,j}}, \quad (21)$$

де $c_0^{i-1,j}$ – концентрація j -го інгредієнта в початковому (вхідному) створі i -ї ділянки; c_τ^{ij} – концентрація j -го інгредієнта в кінцевому (вихідному) створі цієї ділянки через час τ , причому $c_0^{i-1,j} > c_\tau^{ij}$; $(CЗ)_\Sigma^{ij}$ – загальна самоочищувальна здатність відносно декількох інгредієнтів ($j=1,2,3,\dots,N$); постійні a_j ($j=1,2,3,\dots,N$) приписують кожному доданку певну вагу (показник шкідливості) j -го інгредієнта. В простому випадку за однакової шкідливості кожної з речовин необхідно вважати $a_j=1$.

Висновки

Сформовано основні параметри і балансові співвідношення для моделювання гідрохімічних, гідробіологічних і гідротермічних процесів в озері. Перенесення неконсервативних домішок і біологічних речовин реалізується на фоні гідродинамічних процесів.

У перспективі з використанням запропонованої математичної моделі і накопичених на її основі результатів експериментальних досліджень можна буде розробити систему управління якістю водного середовища для екологічної лабораторії, яка функціонує згідно з вимогами стандартів ISO/IEC 17025 та ISO 14000.

1. Лаврик В.И. Математическое моделирование в гидроэкологических исследованиях / В.И. Лаврик, Н.А. Никифорович. – К.: Фитосоциоцентр, 1998. – 288 с. 2. Пененко В.В. Некоторые аспекты решения взаимосвязанных задач экологии и климата / В.В. Пененко, Е.А. Цветова // ПМТФ. – 2000. – Т. 41, № 5. – С. 161–170. 3. Луців Н., Юзевич В. Елементи математичного моделювання гідробіологічних характеристик водних екосистем / Н. Луців, В. Юзевич // Комп'ютерні науки та інформаційні технології // Вісник Національного університету "Львівська політехніка". – Львів, 2009. – № 650. – С. 134–140. 4. Горстко А. Б. Математическое моделирование в гидроэкологических исследованиях / А.Б. Горстко, Г.А. Угольницкий. – Ростов-на-Дону: Изд-во Ростовского университета, 1990. – 112 с. 5. Сопрунюк П.М., Юзевич В.М., Луців Н.В. Математична модель забруднень озера неконсервативними речовинами // Відбір і обробка інформації. – 2008. – Вип. № 29 (105). – С. 67–72. 6. Юзевич В., Гук О., Сопрунюк П. Моделювання адгезійних зв'язків у твердих тілах з використанням методу розкладу за малим параметром // Комп'ютерна інженерія та інформаційні технології // Вісник Нац. ун-ту "Львівська політехніка". – Львів, 2003. – № 481. – С. 58–66.