

В.Б. Мокін, Б.І. Мокін

**МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ТА ПРОГРАМИ ДЛЯ
ОЦІНЮВАННЯ ЯКОСТІ РІЧКОВИХ ВОД**

УНІВЕРСУМ-Вінниця

В.Б. МОКІН, Б.І. МОКІН

**МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ТА ПРОГРАМИ ДЛЯ
ОЦІНЮВАННЯ ЯКОСТІ РІЧКОВИХ ВОД**

УНІВЕРСУМ-Вінниця

2000

УДК 681.51+519.6+556.013

М74

Рецензенти:

д.фіз.-мат.н., професор В.С. Мельник (Інститут аналізу системних досліджень, м. Київ),

д.т.н., професор Р.Н. Кветний (Вінницький державний технічний університет, м. Вінниця)

Рекомендовано до видання Вченою Радою Вінницького державного технічного університету Міністерства освіти України (протокол № 8 від 23.03.2000 р.)

Мокін В.Б., Мокін Б.І.

М74 Математичні моделі та програми для оцінювання якості річкових вод. — Вінниця: Універсум-Вінниця, 2000. — 152 с.

ISBN 966-7199-81-9

В книзі представлено як відомі, так і розроблені авторами математичні моделі динаміки річкових процесів та динаміки якості річкових вод. Приведено алгоритми ідентифікації запропонованих авторами моделей та методологію виявлення офіційно незареєстрованих скидів стічних вод. Описано пакет прикладних програм для оцінювання якості річкових вод, розроблений на основі запропонованих в роботі математичних моделей та алгоритмів.

Розрахована на аспірантів та науковців, які займаються математичним моделюванням і обчислювальними методами. Буде корисною також студентам та аспірантам вищих навчальних закладів екологічної підготовки.

ISBN 966-7199-81-9

УДК 681.51+519.6+556.013

© В.Б. Мокін, Б.І. Мокін, 2000

ЗМІСТ

ВСТУП.....	7
1 АНАЛІЗ ПРОЦЕСІВ В РІЧКАХ ТА ЇХ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ.....	11
1.1 Основні показники якості води, які вимірюються екологічними установами України.....	11
1.2 Аналіз основних процесів, які впливають на зміну значень хімічних показників якості води річки.....	12
1.3 Аналіз найбільш поширених математичних моделей динаміки якості води в річках.....	14
1.4 Постановка нових задач в області моделювання річкових процесів.....	24
1.5 Висновки.....	25
2 РОЗРОБКА НОВИХ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ПРОЦЕСІВ ЗАБРУДНЕННЯ ТА ОЧИЩЕННЯ РІЧКОВИХ ВОД..	28
2.1 Новий підхід до побудови математичних моделей динаміки якості річкових вод.....	28
2.2 Особливості побудови математичної моделі динаміки якості річкових вод.....	33
2.3 Розробка математичної моделі зміни якості річкової води в фіксованій координаті простору.....	36
2.3.1 Вихідні передумови.....	36
2.3.2 Побудова моделі.....	38
2.4 Розробка математичної моделі для елементарної ділянки річки з урахуванням просторової розподіленості її параметрів.....	41

2.5	Синтез математичної моделі динаміки річкових вод в просторі стану показників їх якості.....	43
2.6	Узагальнена математична модель динаміки якості річкової води	46
2.7	Висновки.....	50
3	АНАЛІЗ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ПРОЦЕСІВ ЗАБРУДНЕННЯ І ОЧИЩЕННЯ РІЧКОВИХ ВОД ТА СИНТЕЗ ОБЧИСЛЮВАЛЬНИХ АЛГОРИТМІВ.....	53
3.1	Аналіз рівнянь моделі першого порядку.....	53
3.1.1	Розв'язання рівнянь.....	53
3.1.2	Приклади розв'язків рівнянь.....	53
3.1.3	Аналіз рівнянь за допомогою числових рядів....	57
3.2	Аналіз рівнянь моделі другого порядку.....	63
3.2.1	Аналіз труднощів розв'язання задачі.....	63
3.2.2	Побудова чисельного алгоритму розв'язання задачі.....	66
3.2.3	Доведення збіжності обчислювального алгоритму для ступінчастого впливу.....	68
3.3	Спрощення алгоритму розв'язання рівнянь	78
3.4	Висновки.....	79
4	ІДЕНТИФІКАЦІЯ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ.....	81
4.1	Ідентифікація математичної моделі першого порядку.....	81
4.1.1	Основні етапи алгоритму ідентифікації математичної моделі першого порядку.....	81
4.1.2	Визначення початкової умови та проведення масштабування математичної моделі першого порядку.....	82

4.1.3	Визначення параметрів моделі першого порядку.....	85
4.1.4	Визначення структури моделі першого порядку	92
4.2	Ідентифікація математичної моделі другого порядку.....	93
4.2.1	Основні етапи алгоритму ідентифікації математичної моделі другого порядку.....	93
4.2.2	Визначення початкових умов та проведення масштабування математичної моделі другого порядку.....	94
4.2.3	Ідентифікація моделі другого порядку.....	98
4.3	Алгоритм ідентифікації незареєстрованих входів річкового об'єкта.....	99
4.4	Деякі прийоми спрощення процедури ідентифікації параметрів моделей.....	100
4.5	Нормування вхідних даних для моделювання будь-яких показників якості води.....	102
4.6	Висновки.....	106
5	ПАКЕТ ПРИКЛАДНИХ ПРОГРАМ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ РІЧКОВИХ ПРОЦЕСІВ.....	108
5.1	Загальна інформація про пакет прикладних програм.....	108
5.2	Складові пакету прикладних програм.....	112
5.3	Висновки.....	114
	ВИСНОВКИ.....	115
	СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	118
	ДОДАТКИ.....	135
	Додаток А. Аналіз існуючих класифікацій показників якості річкових вод та перелік основних показників якості води.....	136

Додаток Б. Природні шляхи зміни значень показників якості води.....	144
Додаток В. Програма прикладу розв’язання рівнянь моделі першого порядку для $l = 2, 3$ за допомогою числових рядів...	148

ВСТУП

Дослідження річкових процесів завжди проводились в першу чергу з метою вивчення їх впливу на якість річкової води. Якість води є головною характеристикою річок в аналізі їх екологічного стану та з точки зору водокористування. Водокористування ж є невід'ємною частиною людського життя. Це і водовідбір питної води і води, необхідної для господарських цілей, це і використання води для рекреаційних цілей та для розведення риби, це і використання річок як приймачів стічних вод тощо. Одним з основних способів, які допомагають вирішувати проблеми, пов'язані з якістю річкових вод, є математичне моделювання. Побудувавши математичну модель динаміки якості річкової води, можна визначити ступінь та глибину її очищення, відповідність нормам питного та господарського використання. Можна визначити, також, якість води в будь-якій точці річки в будь-який момент часу та розробити комплекс заходів, потрібних для доведення цієї якості до відповідності рекреаційним чи рибогосподарським вимогам. За допомогою моделі можна спрогнозувати наслідки впливу неочищених чи недоочищених стічних вод, які скидаються до річки, на якість води в ній тощо.

Збільшення антропогенного навантаження на навколишнє середовище одночасно з підвищенням вимог до якості річкових вод обумовлюють актуальність проблеми, котра розглядається.

В Україні та за кордоном вже розроблено багато математичних моделей, які описують річкові процеси та зміни якості річкових вод. Основними недоліками складних моделей є, по-перше, те, що їх застосування на практиці вимагає великої кількості різноманітних

даних, для збору яких потрібна глобальна мережа автоматичних станцій екологічного моніторингу, що в Україні відсутня, а, по-друге, вони не пристосовані для розв'язання задач синтезу систем керування описуваними процесами. Недоліком порівняно простих моделей в багатьох випадках є незабезпечення адекватного відображення реальних річкових процесів. Отже, доцільним є розробка таких математичних моделей, які не лише адекватно віддзеркалювали б річкові процеси, але і могли б бути використаними у подальшому для синтезу законів керування якістю води.

Розробка та впровадження таких математичних моделей в Україні дозволить покращити якість моніторингу води в річках та полегшити її подальший контроль під час практичного водокористування.

Метою дослідження, результати якого лягли в основу цієї монографії, є розробка математичного, методичного, алгоритмічного та програмного забезпечення для моделювання процесів забруднення та очищення річкових вод, а також розв'язання конкретних практичних задач на його основі.

Для досягнення поставленої мети розв'язано такі задачі:

- проведено аналіз відомих моделей та методик моделювання річкових процесів, що впливають на якість річкових вод;
- розроблено нові підходи до побудови математичних моделей динаміки якості річкових вод та синтезовано нові моделі;
- розроблено алгоритми розв'язання рівнянь запропонованих моделей та доведено збіжність цих алгоритмів;
- розроблено алгоритми ідентифікації параметрів та структури запропонованих моделей;
- розроблено пакет прикладних програм для реалізації

запропонованого математичного, методичного та алгоритмічного забезпечення процесів моделювання річкових вод;

— застосовано розроблені моделі та алгоритми для моделювання динаміки показників якості води на конкретній ділянці реальної річки в межах великого промислового міста.

Отримані математичні моделі та програми можна використовувати на практиці для розв’язання різних задач моделювання динаміки багатьох показників якості води середніх і малих рівнинних річок з довільною кількістю просторово-зосереджених джерел природних стоків та антропогенних стічних вод.

Розроблений за результатами досліджень пакет програм МОДИРПРО зареєстровано у Державному агентстві України з авторських і суміжних прав, свідоцтво ПА № 2094. Він є впровадженням та використовується для моделювання якості води річки Південний Буг в межах міста Вінниці в Держуправлінні екобезпеки у Вінницькій області. Цей пакет програм може бути застосований і для моделювання процесів в інших річках, подібних до річки Південний Буг. Слід зазначити, що він легко модифікується для аналізу процесів і в річках, відмінних за характеристиками від річки Південний Буг.

Книга містить п’ять розділів.

В першому розділі проведено огляд та аналіз річкових процесів та показників якості річкових вод, а також аналіз найбільш поширених математичних моделей їх динаміки. Сформульовано основні задачі моделювання.

В другому розділі запропоновано новий підхід до побудови математичної моделі динаміки показників якості річкових вод, та за цим підходом побудовано відповідні математичні моделі.

В третьому розділі проаналізовано рівняння математичних моделей та розроблено алгоритми їх розв'язання.

В четвертому розділі представлено алгоритми та методики ідентифікації параметрів і структури моделей.

В п'ятому розділі описано розроблене програмне забезпечення для оцінювання якості річкових вод.

Весь цикл досліджень, представлених в монографії, здійснено В.Б. Мокіним — ним же написано і всі основні розділи монографії та авторський пакет прикладних програм МОДИРПРО. Б.І. Мокіну належить постановка задачі для дослідження та загальне наукове керівництво цими дослідженнями, а також редагування монографії з метою приведення її у відповідність з вимогами, які висуваються до цього виду наукової продукції.

Відзиви та побажання прохання надсилати на адресу 21021, м. Вінниця, Хмельницьке шосе, 95, Видавництво ВДТУ "Універсум-Вінниця".

РОЗДІЛ 1

АНАЛІЗ ПРОЦЕСІВ В РІЧКАХ ТА ЇХ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ

1.1 Основні показники якості води, які вимірюються екологічними установами України

Якість води — це сукупність хімічних та біологічних складових, а також фізичних властивостей води, яка дозволяє визначати ступінь її забрудненості (чи чистоти) та придатності до конкретних видів водокористування та водоспоживання [34, 54].

Критерієм якості води є знаходження значень відповідних показників її якості в заданих державними чи науковими стандартами інтервалах.

Є декілька різних класифікацій показників якості води. В Додатку А приведено основні з них, зокрема — класифікація за критерієм впливу на екологічний стан річок (з точки зору гідрохімії, гідрології, гідробіології тощо) та дві класифікації з точки зору впливу води на людину. Дві останні класифікації запозичені із державних стандартів, які використовуються українськими державними санітарно-епідеміологічними установами, Держуправлінням екобезпеки України та різними організаціями, які займаються охороною та контролем якості навколишнього середовища.

Як видно з наведених в Додатку А класифікацій, державними стандартами найбільша увага приділяється вимірюванню фізико-хімічних та бактеріологічних показників якості води, тобто достатню інформацію про якість річкової води можна отримати, встановлюючи

лише ці фізико-хімічні та бактеріологічні показники якості. Органолептичні та біологічні показники, якоюсь мірою, є похідними від них [17, 34, 54, 116]. Отже, математичне моделювання є сенс здійснювати лише для основних фізико-хімічних та бактеріологічних показників якості води.

Розглянемо основні річкові процеси, під час дії яких може змінюватись ступінь забруднення води — зменшуватись чи збільшуватись значення відповідних фізико-хімічних та бактеріологічних показників її якості. Зокрема, розглянемо процеси, що впливають на зміну таких хімічних показників якості води, зменшення значень яких означає зменшення ступеня забруднення річкової води.

1.2 Аналіз основних процесів, які впливають на зміну значень хімічних показників якості води річки

Зменшення значень хімічних показників може здійснюватись багатьма способами. Зменшення може відбуватись під час дії якогось одного процесу, а може відбуватись і більш складно — внаслідок взаємодії багатьох процесів. Прикладом складного способу може бути зменшення концентрації хімічної речовини, якому передувало багатоступеневе біохімічне перетворення цієї речовини, тобто процес зменшення відбувався поетапно. Перелік та аналіз основних простих та складних природних шляхів (способів) зменшення показників, в т. ч. хімічних, якості води приведено в Додатку Б. Зокрема, серед простих шляхів (способів) виділено такі:

- розбавлення та перемішування з більш чистими водами;
- осаджування та седиментація;

- поглинання речовин гідробіонтами;
- перехід газів з води річки в атмосферу;
- адсорбція хімічних речовин завислими речовинами.

До складних способів віднесено ті, які містять, окрім наведених вище процесів, ще й такі:

- розпад речовин на більш прості з подальшим вилученням їх із водойми;
- хімічна трансформація речовин з подальшим їх вилученням;
- біохімічна трансформація, розклад речовин мікроорганізмами з подальшим вилученням.

Зазначимо, що можуть мати місце й інші процеси (адсорбції ґрунтом та завислими речовинами, випаровування і виносу вітром), але вони порівняно малоінтенсивні та незначні і їх врахування, в першому наближенні, не є обов'язковим.

Крім цього, в Додатку Б перелічено й процеси, які можуть спричиняти збільшення значень хімічних показників:

- абсорбція газів з атмосфери;
- розклад придонних мулових відкладень;
- фотосинтез;
- хімічне вивітрювання, вилуження, вимивання, абразія та ерозія.

Аналіз публікацій, присвячених дослідженню цих процесів, показав, по-перше, що вагому роль у відновленні балансу концентрації розчиненого у воді річки кисню відіграють процеси абсорбції кисню (аерація та реаерація), а також процес фотосинтезу. По-друге, що підвищення концентрації багатьох речовин в результаті процесів розкладу придонних мулових відкладень слід враховувати лише за умови, якщо перед цим мало місце надходження до річки великого

обсягу токсичних та отруйних чи дуже поживних речовин. І, по-третє, що внесок таких процесів, як хімічне вивітрювання, вилуження, вимивання, абразія та ерозія при розгляді рівнинних малих та середніх річок, в першому наближенні можна взагалі не враховувати. Зазначимо також, що великий, а дуже часто найбільший, внесок забруднювальних речовин до річки забезпечують стічні води. На його фоні внесок природних процесів може бути незначним, хоча це не в останню чергу залежить від співвідношення витрат стічних та річкових вод.

На завершення цього короткого аналізу відзначимо, що під час побудови математичних моделей даного класу процесів ми будемо враховувати характерні особливості динаміки їх протікання, зокрема те, що всі ці процеси протікають одночасно як у часі, так і у просторі.

1.3 Аналіз найбільш поширених математичних моделей динаміки якості води в річках

На даний час в Україні та за кордоном вже розроблено багато математичних моделей, які описують динаміку якості річкових вод [1–4, 8, 10–14, 19, 21, 24, 25, 31, 33, 48, 56, 61, 64, 66, 73, 79, 80, 96, 99, 101, 104, 105, 111, 122, 127, 133, 136, 137, 139, 149, 151].

Проаналізуємо найбільш поширені як в Україні, так і за її межами математичні моделі, що описують зміну значень хімічних та бактеріологічних показників якості річкових вод. Для простоти обмежимося моделюванням якості води в середніх та малих рівнинних річках, в яких розподіл значень показників якості води в глибину та в ширину є відносно однорідним і в першому наближенні може повністю характеризуватись значенням показників в одній усередненій точці

поперечного перерізу річки. Отже, в цьому випадку, процес моделювання можна виконувати не по трьох просторових координатах, а лише по одній — z , вісь якої спрямована вздовж напрямку течії усередненого річкового потоку.

Більшість відомих моделей за кількістю та характером процесів, які враховуються, можна розбити на три типи:

1) моделі, що враховують лише процеси розбавлення вод [1, 21, 53, 57, 99, 101, 105, 127, 133];

2) моделі, що враховують процеси самоочищення річки, але без урахування процесів розбавлення [9, 10, 12–14, 19, 21, 23, 34, 51–53, 56, 58, 64, 70, 79, 80, 99, 100, 101, 104, 105, 111, 116, 122, 131, 133, 138–141, 149, 151, 154–156];

3) моделі розбавлення з урахуванням процесів самоочищення [8, 18, 53, 99, 105, 116, 141, 143, 145, 146, 148, 149, 152, 157].

Серед моделей першого типу найбільш поширеною є модель В.А. Фролова — І.Д. Родзиллера для консервативних речовин, тобто речовин, які не вступають в хімічні реакції [1, 105, 127, 133]

$$\frac{dx(t)}{dt} = -F_1(t) \cdot [x(t) - x_{\text{ср}}(t)], \quad x(0) = x_0, \quad (1.1)$$

де $x(t)$ — значення концентрації речовини в річковій воді;

t — час;

$x_{\text{ср}}(t)$ — середнє значення $x(t)$ в так званому створі повного змішування;

$F_1(t)$ — деяка нелінійна функція, вираз якої виведений В.А. Фроловим на основі аналізу розмірностей — характеризує зменшення концентрації x за рахунок процесів розбавлення.

Ця модель описує зміни значення показника x в часі t , але на

практиці її використовують для опису його зміни в просторі — вздовж осі z . Така інваріантність пов’язана з тим, що модель (1.1) записується для окремого об’єму річкового потоку, який переміщується вздовж осі z зі швидкістю течії річки v [1, 21, 53, 57, 64, 101, 105, 122, 127, 133, 139] і для якого

$$z = v \cdot t, \quad (1.2)$$

а тому за час t цей об’єм річкової води переміститься на відстань $v \cdot t$ в напрямку течії річки і навпаки, щоб переміститись на відстань z , йому потрібний час z/v .

Інший підхід використовується в моделях, оснований на диференціальному рівнянні другого порядку в частинних похідних, в якому зміна значення x моделюється як в часі t , так і в просторі. Прикладами таких моделей є моделі В.М. Маккавєєва, А.В. Караушева, А.М. Айтсама, Х.А. Вельнера, Л.Л. Паалю, М.А. Бесценної, М.А. Руффель та інших. Наприклад, для однієї просторової координати z пропонується модель [53, 99, 105, 116]

$$-\frac{\partial x(t, z)}{\partial t} = -\delta \cdot \frac{\partial^2 x(t, z)}{\partial z^2} + v \cdot \frac{\partial x(t, z)}{\partial z} \quad (1.3)$$

з початковими та граничними умовами

$$x(0, z) = x_0(z), \quad x(t, 0) = a(t), \quad x(t, L) = b(t), \quad (1.4)$$

де δ — коефіцієнт турбулентної дифузії;

L — довжина ділянки річки, що моделюється;

$x_0(z)$ — залежність значень x від координати z в межах ділянки моделювання в початковий момент часу;

$a(t)$ і $b(t)$ — залежність значень x від часу t на вході ($z = 0$) і на виході ($z = L$) ділянки моделювання, відповідно.

Головним недоліком моделей першого типу є те, що вони можуть

застосовуватися для опису динаміки концентрацій лише консервативних хімічних речовин, враховуючи тільки один фізичний основний фактор — фактор розбавлення (розповсюдження та перемішування). Крім цього, основним недоліком моделі (1.1), (1.2) є невідповідність динаміки реальних процесів розбавлення експоненціальному закону, а моделі (1.3), (1.4) — необхідність збору додаткової інформації, зокрема значень функцій $a(t)$, $b(t)$ та $x_0(z)$.

Серед моделей другого типу — моделей самоочищення річки, в яких не враховуються процеси розбавлення, — найбільш поширеними є моделі у вигляді диференціального рівняння першого порядку. Загалом, можна виділити такі види моделей [9, 10, 12–14, 19, 21, 23, 34, 51–53, 56, 58, 64, 70, 79, 80, 99, 100, 101, 104, 105, 111, 116, 122, 131, 133, 138–141, 149, 151, 154–156]:

1. Прості лінійні моделі, основані на звичайному диференціальному рівнянні першого порядку [9, 10, 14, 21, 23, 34, 58, 64, 70, 99, 100, 101, 105, 111, 116, 122, 131, 133, 138, 139, 140]

$$\frac{dx(t)}{dt} = -Kx(t), \quad x(0) = x_0, \quad (1.5)$$

де K — коефіцієнт розпаду забруднювальної речовини за одиницю часу, так звана константа розпаду першого порядку (1/с); в роботах [105, 116] наведено чисельні значення таких констант для великої кількості найбільш поширених забруднювачів;

x_0 — значення x в початковий момент часу $t = 0$.

2. Нелінійні моделі Моно [9, 12, 13, 144, 151, 154, 155]

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\Psi_{\max} \cdot x}{v_1 + x}, \quad x(0) = x_0, \quad (1.6)$$

або

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\Psi_{\max} \cdot x \cdot x_K}{v_2 \cdot x + v_3 \cdot x_K + x \cdot x_K}, \quad x(0) = x_0, \quad (1.7)$$

де x — концентрація у воді деякої хімічної речовини чи вміст бактерій або мікроорганізмів;

x_K — концентрація розчиненого у воді річки кисню;

$\Psi_{\max}$ — максимальна швидкість розкладання забруднювальної речовини;

v_1, v_2 — так звані константи напівнасичення для забруднювальних речовин;

v_3 — константа напівнасичення для розчиненого у річці кисню.

Моделі (1.5), (1.6) враховують нелінійність динаміки річкових процесів за гранично низьких чи високих значень величин x . Модель (1.6) враховує ще й вплив концентрації розчиненого у воді кисню.

3. Балансові моделі [149, 156]. Прикладом балансових моделей є моделі зміни концентрації розчиненого у воді кисню, зокрема модель Стритера –Фелпса [156]

$$\frac{dx}{dt} = a_1(x_H - x) - a_2x_{БСК}, \quad (1.8)$$

де x — концентрації розчиненого у річковій воді кисню;

x_H — концентрація насичення для кисню у річковій воді;

$x_{БСК}$ — величина біохімічного споживання кисню (мається на увазі концентрація легкоокислювальних органічних речовин);

a_1 — стала швидкості реаерації для розчиненого у річковій воді кисню;

a_2 — константа розпаду першого порядку для легкоокислювальних органічних речовин.

Рівняння (1.8) є стаціонарним розв'язком диференціального

рівняння першого порядку в частинних похідних [156]

$$\frac{\partial x(t, z)}{\partial t} = \Omega_1 \left\{ \frac{\partial x(t, z)}{\partial z}, x(t, z) \right\}, \quad (1.9)$$

де $\Omega_1(\cdot)$ — деякий лінійний оператор.

Як видно з (1.8), в активі балансу моделі Стритера — Фелпса знаходяться процеси надходження кисню з атмосфери з реаерацією, а в пасиві — процеси використання розчиненого у воді кисню в біохімічних реакціях розкладу та розпаду легкоокислювальних органічних речовин.

Інші балансові моделі динаміки концентрації розчиненого у річковій воді кисню подібні до (1.8), але враховують більшу кількість процесів.

4. Стехіометричні рівняння. Стехіометричні математичні моделі будуються на конкретних хімічних реакціях за законом дії мас Гульдберга — Вааге. Згідно з цим законом, швидкість протікання елементарної реакції пропорційна добутку концентрацій речовин, які реагують, в степенях, що дорівнюють їх стехіометричним коефіцієнтам [22, 52, 53, 105].

Наприклад, хімічна реакція речовини А з концентрацією x_A і речовини В з концентрацією x_B , яка протікає в закритому посуді за умов відсутності інших речовин (одностадійна необернена хімічна реакція в гомогенному середовищі), описується рівнянням [52]



де a, b — стехіометричні коефіцієнти речовин А і В, відповідно;

AB — кінцева хімічна речовина.

Тоді швидкість протікання реакції v_4 — швидкість утворення речовини АВ, яка визначається за рівнянням

$$v_4 = x_A^a \cdot x_B^b. \quad (1.11)$$

5. Моделі, які описують поглинання та перетворення хімічних речовин різними мікроорганізмами з одночасною зміною біомаси останніх [4, 9, 10, 12, 13, 19, 51, 56, 64, 70, 79, 80, 104, 105, 122, 139, 149]. Такі моделі найбільше застосовуються до опису динаміки концентрацій біогенних та органічних речовин. Наприклад, в роботі [105] приведено моделі, які описують зміни значень концентрацій азотовмісних речовин разом із зміною вмісту амоніфікуючих бактерій (бактерій *Nitrobacter*, *Nitrosomonas*) та вмісту мікроорганізмів-денітрифікаторів.

Основним недоліком моделей другого типу є, зрозуміло, неврахування процесів розбавлення. Інші недоліки залежать від виду моделей.

1. Лінійні моделі, в основу яких покладене звичайне диференціальне рівняння першого порядку (1.5), не відображають належним чином всю різноманітність процесів у водоймах. Вони не є адекватними в разі невідповідності динаміки процесів самоочищення експоненціальному закону.

2. Нелінійні моделі типу Моно (1.6) чи (1.7) [9, 12, 13, 144, 151, 154, 155] добре зарекомендували себе для опису динаміки росту бактерій, мікроорганізмів та водоростей за рахунок споживання ними органічних та біогенних речовин. Недоліком цих моделей є складність використання їх для синтезу законів керування цими процесами.

3. Головним недоліком балансових математичних моделей динаміки значень показників якості річкових вод є врахування лише деяких річкових процесів — неврахування інших може в багатьох випадках призводити до суттєвих похибок [149, 156].

4. Стехіометричні рівняння не отримали широкого розповсюдження через два основні недоліки: по-перше, вся різноманітність процесів в водоймах ще недостатньо вивчена, отже для складних реакцій не відома структура хімічного рівняння та необхідні стехіометричні коефіцієнти, а по-друге, навіть для порівняно простих відомих реакцій, які протікають в 2–3 етапи, завершальний вираз представляє собою досить громіздке нелінійне рівняння [52].

5. Найбільш суттєвим недоліком моделей одночасної зміни концентрацій речовин і вмісту мікроорганізмів є те, що під час використання їх за реальних природних умов досить важко визначати концентрації окремих видів мікроорганізмів, які “відповідають” за розклад тих чи інших конкретних речовин.

Моделями третього типу, тобто тими, які враховують всі процеси самоочищення разом із розбавленням, є моделі першого типу, доповнені моделями другого типу:

1. Моделі, основані на узагальненому рівнянні нерозривності для елемента хімічного процесу [18, 53, 99, 105]

$$\operatorname{div} [x \cdot v] - \operatorname{div} [\delta \cdot \operatorname{grad} x] + v_5 \cdot v_6 \cdot x + \Phi(t, z) = -\frac{\partial x}{\partial t} \quad (1.12)$$

з початковими та граничними умовами

$$x(0, z) = x_0(z), \quad x(t, 0) = a(t), \quad x(t, L) = b(t), \quad (1.13)$$

де v_5 — коефіцієнт масопередачі;

v_6 — площа поверхні передачі компонента між фазами на одиницю об'єму — питома площа поверхні передачі;

$\Phi_1(t, z)$ — джерела або стоки компонента.

Недоліками моделі (1.12), (1.13) є, по-перше, її надмірна узагальненість, по-друге, складність визначення її параметрів на

практиці.

2. Балансові моделі [105, 116, 141, 143, 145, 146, 148, 149, 152, 157], подібні до моделі Стритера — Фелпса (1.8), але є стаціонарним розв'язком диференціального рівняння в частинних похідних не першого, а другого порядку [149]:

$$\frac{\partial x(t, z)}{\partial t} = \Omega_2 \left\{ \frac{\partial^2 x(t, z)}{\partial z^2}, \frac{\partial x(t, z)}{\partial z}, x(t, z) \right\}, \quad (1.14)$$

де $\Omega_2(\cdot)$ — деякий лінійний оператор.

Рівняння (1.14) називається рівнянням часткового перемішування (окремим випадком його є рівняння турбулентної дифузії (1.3)) [149].

Прикладами таких балансових моделей є модель Дриснека — Доббінса та модель Доббінса — Кемпа. Модель Дриснека — Доббінса має вигляд [146]:

$$\frac{dx}{dt} = a_1(x_H - x) - a_2 x_{\text{БСК}} + \chi_1, \quad (1.15)$$

де χ_1 — загальна швидкість збільшення концентрації розчиненого у річковій воді кисню за рахунок спільного впливу процесів розкладу придонних мулових відкладень (ПМВ) і фотосинтезу водних рослин з урахуванням швидкості зменшення концентрації x внаслідок дихання останніх.

Модель Доббінса — Кемпа має такий самий вигляд, як і модель (1.15), але під χ_1 мається на увазі швидкість надходження до річкової води кисню за рахунок фотосинтезу, який здійснюється водоростями [143, 145].

Більшість інших балансових моделей динаміки концентрації розчиненого у річковій воді кисню (модель Бека — Янга [141], модель Хансена — Франкела [148], модель О'Коннора — Ді Торо [152], модель

Томанна [157] тощо) є модифікаціями моделей, перелічених вище. Наприклад, модель О'Коннора — Ді Торо має вигляд [152]:

$$\frac{dx}{dt} = a_1(x_H - x) - a_{3C}x_{\text{БСК-С}} - a_{3N}x_{\text{БСК-N}} + \chi_1, \quad (1.16)$$

де $x_{\text{БСК-С}}$ — величина вуглеводного біохімічного споживання кисню (БСК), тобто величина БСК, яка має місце під час першої стадії розкладу легкоокислювальних органічних речовин;

a_{3C} — константа розпаду першого порядку для першої стадії розкладу легкоокислювальних органічних речовин;

$x_{\text{БСК-N}}$ — величина азотного БСК, тобто величина БСК, яка має місце під час другої стадії розкладу легкоокислювальних органічних речовин;

a_{3N} — константа розпаду першого порядку для другої стадії розкладу легкоокислювальних органічних речовин.

В моделі (1.16) враховуються особливості процесу розкладу легкоокислювальних органічних речовин — його вуглеводна (перша) та азотна (друга) стадії, які мають місце [17, 54, 152].

Недоліком усіх балансових моделей, також як і моделей типу Стритера — Фелпса (1.8), є неможливість урахування в балансі всіх процесів, які діють в річці. І причиною цього не в останню чергу є недостатня вивченість цих процесів. Все це обмежує можливості використання балансових моделей на практиці.

Інші математичні моделі третього типу, наведені в роботах [24–26, 105, 116, 149], як і модель (1.12), страждають надмірною узагальненістю та невизначеністю, однак до цього недоліку додається ще й громіздкість опису.

Крім описаних в цьому підрозділі моделей є ще так звані еколого-

економічні моделі [26, 59, 60, 66, 71, 73, 96, 126, 127]. Їм, на жаль, притаманні ті ж недоліки, які були виділені вище.

Не можна не відзначити побудову моделей за допомогою методу групового врахування аргументів [31, 33, 36–46, 78, 93, 94, 98, 114, 129, 132]. Головним недоліком, який обмежує застосування цього методу, є необхідність великого обсягу статистичної інформації для пошуку моделі з оптимальними структурою та параметрами. Отже, цей метод не підходить для моделювання річкових об'єктів, дослідження яких раніше не проводились, а кількість вимірювань, котрі можуть бути проведені в поточний час, суттєво обмежена.

На завершення аналізу найбільш поширених математичних моделей процесів забруднення та очищення річкових вод вкажемо на такий їх загальний недолік, як неможливість використання для синтезу законів керування (покращення) якості річкових вод із застосуванням відпрацьованої в теорії управління методології.

1.4 Постановка нових задач в області моделювання річкових процесів

В попередніх підрозділах розглянуто та проаналізовано різні аспекти, які стосуються динаміки забруднення та самоочищення річкових вод.

На основі цього аналізу поставимо нові задачі в області моделювання річкових процесів, без розв'язання яких неможливий прогрес на шляху створення теорії оптимального керування процесами очищення річкових вод.

1. Розробка нових підходів до побудови математичних моделей

динаміки якості річкових вод з представленням річки як кібернетичної системи та побудова моделей за цими підходами.

2. Розробка алгоритмів розв'язання рівнянь запропонованих моделей. Доведення збіжності алгоритмів.

3. Ідентифікація параметрів та структури запропонованих моделей.

4. Розробка пакета прикладних програм для реалізації запропонованого математичного, методичного та алгоритмічного забезпечення процесів моделювання річкових вод.

5. Розробка програмного забезпечення та застосування його:

- для поточного моделювання динаміки показників якості води на конкретній ділянці реальної річки в межах великого промислового міста;

- для виявлення та ідентифікації характеристик незареєстрованих вхідів;

- для прогнозування якості річкових вод.

1.5 Висновки

Проаналізовано основні класифікації показників якості води річок та водойм, які використовуються в Україні. Встановлено, що достатню інформацію про якість річкової води можна отримати, встановлюючи значення лише фізико-хімічних та бактеріологічних показників якості води.

Наведено найголовніші показники якості річкових вод, які вимірюються екологічними установами України.

Проведено аналіз основних способів зміни значень хімічних

показників в річкових водах.

Здійснено огляд основних математичних моделей динаміки значень хімічних та бактеріологічних показників якості води, які є поширеними як у нас в Україні, так і за кордоном. При цьому виявлено такі їх основні особливості:

- більшість відомих моделей враховують тільки 1–3 основні фактори, вважаючи інші фактори несуттєвими, отже не існує достатньо адекватних і, в той же час, достатньо наочних моделей, які враховують одночасно більшість основних факторів, що впливають на динаміку значень показників якості води;

- за ступенем складності математичного опису більшість моделей є або надто спрощеними, або настільки узагальненими, що не дозволяють отримати конкретні розв'язки;

- прості моделі не завжди є адекватними через невідповідність їх математичного опису характеру динаміки реальних процесів;

- однією з головних причин використання надто спрощених моделей опису зміни значень показників якості води є недостатня вивченість всіх процесів, які впливають на цю зміну;

- використання складних моделей на практиці зустрічається з труднощами, пов'язаними із необхідністю збору великої кількості інформації, необхідної для застосування цих моделей;

- ідентифікація деяких параметрів та змінних багатьох моделей за реальних природних умов іноді неможлива через відсутність методів та засобів вимірювань цих величин;

- під час використання відомих моделей, які є рівняннями із зосередженими параметрами, на досить довгій ділянці річки ці рівняння перетворюються в рівняння зі змінними параметрами, розв'язання яких

значно ускладнюється;

– форма запису моделей не дає можливості використати їх для синтезу законів керування (покращення) якості річкових вод.

На основі проведеного аналізу сформульовано основні задачі, розв'язанню яких і присвячені подальші розділи книги.

РОЗДІЛ 2

РОЗРОБКА НОВИХ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ПРОЦЕСІВ ЗАБРУДНЕННЯ ТА ОЧИЩЕННЯ РІЧКОВИХ ВОД

2.1 Новий підхід до побудови математичних моделей динаміки якості річкових вод

У відповідності з першою задачею, з числа поставлених в першому розділі, сформулюємо новий підхід до моделювання річкових процесів, який дозволяв би коректно враховувати всі стоки та витoki води в річковій системі [4, 91].

За цим підходом будь-яку ділянку річки пропонується розглядати як багатовимірну кібернетичну систему, на вхід якої надходять різні впливи в вигляді стічних вод підприємств, комунально-побутових стічних вод, природних стоків, атмосферних опадів тощо, які впливають на якість води у річці. Вихідною характеристикою системи є якість води в місцях водоспоживання та водокористування.

В якості вхідних, вихідних змінних та змінних стану фігурують показники якості води, наведені в попередньому розділі та Додатку А.

Логічно припустити, що характер процесів, які протікають в водах, що надходять на різні входи річкового об'єкта, залежить як від часу, так і від координат розміщення цих входів. Наприклад, процеси розкладу одних і тих же хімічних сполук, які надійшли до річки щойно і які надійшли набагато раніше, суттєво відрізняються. В першому випадку на ці сполуки діють лише процеси трансформації їх до інших сполук, а в другому випадку — додаються процеси поглинання гідробіонтами та осадження, котрі приводять до повного вилучення їх з

річкової води.

Крім того, через неоднорідність форм русел річок, характер річкових процесів залежить від координати z . Наприклад, динаміка процесів розповсюдження та турбулентного перемішування суттєво відрізняється для прямих ділянок русел порівняно з динамікою на вигинах річок.

З метою врахування цих особливостей пропонується ділянку річки, котра моделюється, розбивати на N_d більш дрібних елементарних ділянок за двома критеріями:

1) на кожній з елементарних ділянок повинно бути не більше одного джерела додаткових вод;

2) основні характеристики річки, від яких залежить динаміка річкових процесів, наприклад, гідравлічні характеристики річки¹⁾, на кожній елементарній ділянці повинні бути в першому наближенні незмінними.

Для полегшення врахування впливів природних та антропогенних стоків рекомендується розбивати річку таким чином, щоб кожна нова елементарна ділянка річки починалась в місці надходження цих стоків.

Узгодження елементарних ділянок слід робити за ланцюговим принципом: вихід кожної з них є входом для наступної.

Узагальнену математичну модель динаміки деякого показника якості річкової води всієї ділянки моделювання пропонується записувати в вигляді [4, 91]:

¹⁾ До основних гідравлічних характеристик річки відносяться: швидкість течії та коефіцієнт турбулентної дифузії річки, характеристики її русла (гідравлічний радіус, ступінь звивистості) тощо.

$$\begin{cases}
\dot{\mathbf{X}}_1(t_1) = \mathbf{W}_{\mathbf{X}_1}(t_1) \mathbf{X}_1(t_1) + \mathbf{B}_1, \\
\mathbf{Y}_1 = \mathbf{W}_{\mathbf{Y}_1}(t_1) \mathbf{X}_1(t_1), \quad t_1 = [0, T_1], \\
\mathbf{X}_1(0) = \mathbf{X}_0 + \mathbf{W}_{\mathbf{U}_{(1)}} \mathbf{U}_1 + \mathbf{W}_{\mathbf{R}_{\mathbf{I}(1)}} \mathbf{R}_{\mathbf{I}(1)} + \mathbf{W}_{\mathbf{R}_{\mathbf{II}(1)}} \mathbf{R}_{\mathbf{II}(1)} + \mathbf{W}_{\mathbf{R}_{\mathbf{III}(1)}} \mathbf{R}_{\mathbf{III}(1)}, \\
\dot{\mathbf{X}}_2(t_2) = \mathbf{W}_{\mathbf{X}_2}(t_2) \mathbf{X}_2(t_2) + \mathbf{B}_2, \\
\mathbf{Y}_2 = \mathbf{W}_{\mathbf{Y}_2}(t_2) \mathbf{X}_2(t_2), \quad t_2 = [0, T_2], \\
\mathbf{X}_2(0) = \mathbf{X}_1(T_1) + \mathbf{W}_{\mathbf{U}_{(2)}} \mathbf{U}_2 + \mathbf{W}_{\mathbf{R}_{\mathbf{I}(2)}} \mathbf{R}_{\mathbf{I}(2)} + \mathbf{W}_{\mathbf{R}_{\mathbf{II}(2)}} \mathbf{R}_{\mathbf{II}(2)} + \mathbf{W}_{\mathbf{R}_{\mathbf{III}(2)}} \mathbf{R}_{\mathbf{III}(2)}, \\
\ldots \\
\dot{\mathbf{X}}_i(t_i) = \mathbf{W}_{\mathbf{X}_i}(t_i) \mathbf{X}_i(t_i) + \mathbf{B}_i, \\
\mathbf{Y}_i = \mathbf{W}_{\mathbf{Y}_i}(t_i) \mathbf{X}_i(t_i), \quad t_i = [0, T_i], \\
\mathbf{X}_i(0) = \mathbf{X}_{i-1}(T_{i-1}) + \mathbf{W}_{\mathbf{U}_{(i)}} \mathbf{U}_i + \mathbf{W}_{\mathbf{R}_{\mathbf{I}(i)}} \mathbf{R}_{\mathbf{I}(i)} + \mathbf{W}_{\mathbf{R}_{\mathbf{II}(i)}} \mathbf{R}_{\mathbf{II}(i)} + \\
\quad + \mathbf{W}_{\mathbf{R}_{\mathbf{II}(N_{\mathcal{D}}-1)}} \mathbf{R}_{\mathbf{II}(N_{\mathcal{D}}-1)} + \mathbf{W}_{\mathbf{R}_{\mathbf{III}(i)}} \mathbf{R}_{\mathbf{III}(i)}, \\
\ldots \\
\dot{\mathbf{X}}_{N_{\mathcal{D}}-1}(t_{N_{\mathcal{D}}-1}) = \mathbf{W}_{\mathbf{X}_{N_{\mathcal{D}}-1}}(t_{N_{\mathcal{D}}-1}) \mathbf{X}_{N_{\mathcal{D}}-1}(t_{N_{\mathcal{D}}-1}) + \mathbf{B}_{N_{\mathcal{D}}-1}, \\
\mathbf{Y}_{N_{\mathcal{D}}-1} = \mathbf{W}_{\mathbf{Y}_{N_{\mathcal{D}}-1}}(t_{N_{\mathcal{D}}-1}) \mathbf{X}_{N_{\mathcal{D}}-1}(t_{N_{\mathcal{D}}-1}), \quad t_{N_{\mathcal{D}}-1} = [0, T_{N_{\mathcal{D}}-1}], \\
\mathbf{X}_{N_{\mathcal{D}}-1}(0) = \mathbf{X}_{N_{\mathcal{D}}-2}(T_{N_{\mathcal{D}}-2}) + \mathbf{W}_{\mathbf{U}_{(N_{\mathcal{D}}-1)}} \mathbf{U}_{N_{\mathcal{D}}-1} + \mathbf{W}_{\mathbf{R}_{\mathbf{I}(N_{\mathcal{D}}-1)}} \mathbf{R}_{\mathbf{I}(N_{\mathcal{D}}-1)} + \\
\quad + \mathbf{W}_{\mathbf{R}_{\mathbf{III}(N_{\mathcal{D}}-1)}} \mathbf{R}_{\mathbf{III}(N_{\mathcal{D}}-1)}, \\
\dot{\mathbf{X}}_{N_{\mathcal{D}}}(t_{N_{\mathcal{D}}}) = \mathbf{W}_{\mathbf{X}_{N_{\mathcal{D}}}}(t_{N_{\mathcal{D}}}) \mathbf{X}_{N_{\mathcal{D}}}(t_{N_{\mathcal{D}}}) + \mathbf{B}_{N_{\mathcal{D}}}, \\
\mathbf{Y}_{N_{\mathcal{D}}} = \mathbf{W}_{\mathbf{Y}_{N_{\mathcal{D}}}}(t_{N_{\mathcal{D}}}) \mathbf{X}_{N_{\mathcal{D}}}(t_{N_{\mathcal{D}}}), \quad t_{N_{\mathcal{D}}} = [0, T_{N_{\mathcal{D}}}], \\
\mathbf{X}_{N_{\mathcal{D}}}(0) = \mathbf{X}_{N_{\mathcal{D}}-1}(T_{N_{\mathcal{D}}-1}) + \mathbf{W}_{\mathbf{U}_{(N_{\mathcal{D}})}} \mathbf{U}_{N_{\mathcal{D}}} + \mathbf{W}_{\mathbf{R}_{\mathbf{I}(N_{\mathcal{D}})}} \mathbf{R}_{\mathbf{I}(N_{\mathcal{D}})} + \\
\quad + \mathbf{W}_{\mathbf{R}_{\mathbf{II}(N_{\mathcal{D}})}} \mathbf{R}_{\mathbf{II}(N_{\mathcal{D}})} + \mathbf{W}_{\mathbf{R}_{\mathbf{III}(N_{\mathcal{D}})}} \mathbf{R}_{\mathbf{III}(N_{\mathcal{D}})},
\end{cases} \tag{2.1}$$

де: а) для кожної i -ої ($i = 1, 2, \dots, N_{\mathcal{D}}$) елементарної ділянки річки

введено такі

— вектори змінних:

$X_i(t)$ — вектор змінних стану — характеризує якість води в основному водотоку;

$\dot{X}_i(t_i)$ — вектор похідних в часі від змінних стану;

Y_i — вектор вихідних змінних — характеризує якість води в місцях водокористування та водоспоживання;

U_i — вектор вхідних змінних, які піддаються керуванню — характеризує якість води, що надходить з антропогенними стічними водами на i -ту елементарну ділянку річки;

$R_{(i)}$ — вектори вхідних змінних, які не піддаються керуванню, зокрема:

R_I — вектор вхідних змінних, які характеризують якість води, що надходить до i -ої елементарної ділянки річки з її приток та підземних джерел;

R_{II} — вектор вхідних змінних, які характеризують якість води, що надходить безпосередньо на поверхню річки на i -ій елементарній ділянці з атмосферними опадами чи зі стоками від водного транспорту та маломірного флоту;

R_{III} — вектор вхідних змінних, які характеризують якість води, що надходить з природними поверхневими стоками з берегів i -ої елементарної ділянки річки після атмосферних опадів у басейн цієї річки;

— функції чи оператори:

W_{X_i} — деякі функції чи оператори, які пов'язують між собою відповідні змінні стану;

W_{Y_i} — деякі функції чи оператори, які пов'язують між собою відповідні змінні стану та вихідні змінні;

$W_{U_{(i)}}$, $W_{R_{I(i)}}$, $W_{R_{II(i)}}$, $W_{R_{III(i)}}$ — деякі функції, які пов'язують між собою відповідні змінні стану та вхідні змінні;

— вектори сталих:

B_i — вектор-стовпець сталих складових математичних моделей;

— величини інтервалу моделювання:

T_i — часовий інтервал моделювання, який дорівнює відношенню довжини L_i i -ої елементарної ділянки моделювання річки до середньої швидкості течії на ній v_i ;

б) для всієї ділянки моделювання річки:

X_0 — вектор початкових значень змінних стану — характеризує якість річкової води, яка надходить до ділянки моделювання з основним водотоком річки.

До змінних стану належать значення показника якості річкових вод x та значення похідних в часі від нього: $\dot{x}$, $\ddot{x}$, $\ddot{\ddot{x}}$,

Аналогічно, до вхідних змінних належать:

— значення показника якості стічних вод u та значення похідних в часі від нього: $\dot{u}$, $\ddot{u}$, $\ddot{\ddot{u}}$, ...;

— значення показника Γ_I якості вод, що надходять з приток річки та підземних джерел, та значення похідних в часі від нього: $\dot{\Gamma}_I$, $\ddot{\Gamma}_I$, $\ddot{\ddot{\Gamma}}_I$, ...;

— значення показника якості вод, що надходять безпосередньо на поверхню річки з атмосферними опадами чи зі стоками від водного транспорту та маломірного флоту Γ_{II} та значення похідних в часі від нього: $\dot{\Gamma}_{II}$, $\ddot{\Gamma}_{II}$, $\ddot{\ddot{\Gamma}}_{II}$, ...;

— значення показника якості вод, що надходять з природними поверхневими стоками з берегів річки після атмосферних опадів у басейн цієї річки, r_{III} та значення похідних в часі від нього: $\dot{r}_{III}$, $\ddot{r}_{III}$, $\ddot{\ddot{r}}_{III}$,

До вихідних змінних належать значення показника якості водовідбірної води y та значення похідних в часі від нього: $\dot{y}$, $\ddot{y}$, $\ddot{\ddot{y}}$,

Слід зазначити, що саме поділ вхідних змінних на ті, які піддаються управлінню (U_i), і ті, які не піддаються ($R_{I(i)}$, $R_{II(i)}$, $R_{III(i)}$), і дає змогу будувати таку математичну модель, яка забезпечує можливість синтезу закону управління за заданими змінними.

Зосередимо увагу на побудові конкретних математичних моделей динаміки значень показників якості річкової води, тобто займемося деталізацією вигляду операторів W_i .

2.2 Особливості побудови математичної моделі динаміки якості річкових вод

В попередньому підрозділі був запропонований новий підхід до побудови моделі річки, який дозволяє, після розв'язання задачі ідентифікації цієї моделі, отримувати кількісну оцінку якості води з урахуванням її зміни через надходження антропогенних скидів або природних стоків. Але запропонована концепція породила низку нових задач, серед яких однією з головних є задача побудови таких математичних моделей, які адекватно описували б зміни в часі й у просторі показників якості води в річці з урахуванням основних річкових процесів, що обумовлюють ці зміни.

Аналіз найбільш поширених відомих моделей такого типу,

проведений в підрозділі 1.3, виявив основні недоліки, притаманні цим моделям. Запропонуємо підхід та побудуємо за ним моделі, які позбавлені виявлених недоліків.

Сформулюємо основні вимоги, яким повинні задовольняти значення показника якості води x на будь-якій елементарній ділянці:

- 1) значення x не повинні бути від'ємними;
- 2) більші значення x означають більше забруднення річки, менші значення — менше забруднення;
- 3) значення x не повинні збільшуватися зі збільшенням t чи z ;
- 4) усталене значення x повинно дорівнювати нулю, тобто для $t \rightarrow \infty$ чи $z \rightarrow \infty$: $x = 0$.

Доведемо, що ці вимоги виконуються або можуть бути виконані для переважної більшості хімічних та бактеріологічних показників якості води.

Перша вимога виконується для переважної більшості показників якості води. Якщо ж вона не виконується, тоді замість величини показника якості x слід моделювати величину різниці між ним та його мінімальним значенням $x_{\min}$: $(x - x_{\min})$. Ця різниця, зрозуміло, не буде від'ємною.

Друга вимога добре виконується для концентрацій різних забруднювальних хімічних речовин та вмісту хвороботворних бактерій. Але, наприклад, для розчиненого у воді кисню ця вимога не виконується. Збільшення його значень корелюється зі зменшенням загального забруднення річки хімічними речовинами. В такому разі замість величини x можна моделювати величину різниці між x та якимось максимально можливим значенням $x_{\max}$: $(x_{\max} - x)$. Для розчиненого кисню це є дефіцит кисню — величина $(x_H - x)$.

Третя вимога задовольняється, якщо всі річкові процеси спричиняють лише зменшення значення x або ж інтенсивність процесів зменшення не перевищує інтенсивності процесів збільшення. В разі, коли в якомусь місці елементарної ділянки інтенсивність процесів збільшення перевищує інтенсивність процесів зменшення, це місце слід розглядати як нове джерело забруднення (новий вхід) і розбивати в ньому елементарну ділянку на дві більш малі, кожна з яких вже задовольняє другу вимогу. Якщо ж збільшення значення x відбувається на всій ділянці моделювання, тоді слід будувати модель для зменшення різниці між значенням x і якимось максимально можливим значенням $x_{\max}$, як це було показано вище на прикладі розчиненого кисню.

Четверта вимога виконується для концентрацій хімічних речовин антропогенного походження, які не зустрічаються в природі. Але для інших показників, значення x чи $(x - x_{\max})$ котрих зменшується лише до якоїсь ненульової величини $x_{\text{уст}}$, цю вимогу можна задовольнити, якщо будувати модель не для значень x , а для значень різниці $(x - x_{\text{уст}})$.

Побудову моделі здійснимо в декілька етапів. Спочатку побудуємо модель, яка описує зміну значень показника якості води лише в часі t в якійсь точці простору без врахування процесів розбавлення та перемішування. На основі цієї моделі побудуємо просторово-розподілену модель, яка описує динаміку показника якості води вже на всій елементарній ділянці річки, враховуючи координати часу t й простору z . Далі спростимо цю модель, врахувавши особливості динаміки річкового потоку (див. формулу (1.2)). Отриману модель приведемо до вигляду, який дозволить її використовувати в якості елемента узагальненої моделі (2.1). Опишемо ці етапи більш детально.

2.3 Розробка математичної моделі зміни якості річкової води в фіксованій координаті простору

2.3.1 Вихідні передумови

Введемо ряд вихідних передумов.

В річці зменшення значень будь-яких хімічних показників якості води, наприклад, концентрації якоїсь хімічної речовини, спричиняють одночасно багато різних процесів. Основні з них розглянуті в Додатку Б. При цьому деякі з них починають діяти одразу після надходження цієї речовини до річки, тобто впливають безпосередньо на той стан та склад речовини, в якому вона надійшла. Деякі процеси можуть діяти лише на трансформований стан цієї речовини.

Наприклад, для концентрації сполук свинцю: більша частина цих сполук осаджується відразу; частина (солі свинцю), реагуючи з хлоридами, хімічно трансформується в хлорид свинцю, який лише потім осаджується; частина відразу поглинається гідробіонтами [4, 22, 52].

Як видно з Додатку А, більшість хімічних показників характеризує концентрацію не конкретних хімічних речовин як, наприклад, хлорид чи оксид свинцю, а концентрацію хімічних елементів, тобто концентрацію усіх речовин, які містять, в даному випадку, свинець. В такому разі, різні процеси розкладу складних сполук на більш прості, процеси хімічного перетворення одних солей в інші тощо, не зменшують величину хімічного показника, але займають якийсь час. Зменшення значення такого показника відбувається тільки через такі процеси, як осадження, випаровування, поглинання гідробіонтами, що приводять до повного вилучення речовин з річкової

води.

На кожну хімічну речовину діє свій набір процесів. Під “набором процесів” мається на увазі низка процесів, в якій кожен наступний перетворює продукти попереднього і лише останній призводить саме до зменшення концентрації хімічної речовини. Взагалі можливі, наприклад, такі набори процесів: “хімічна трансформація — перетворення гідробіонтами — осадження”, або “хімічна трансформація — поглинення гідробіонтами”, або “біохімічна трансформація — осадження” тощо. Ці процеси протікають з різними швидкостями і через це їх взаємодію треба розглядати як послідовно-одночасне протікання. Послідовно — тому, що наступний починається лише тоді, коли вже почався попередній і з’явилися якісь результати його дії, а одночасно — тому, що наступний починається тоді, коли попередній ще не закінчився.

Існування таких наборів послідовно-одночасних процесів для кожної хімічної речовини, яка надходить до водойми, і є першою вихідною передумовою методики побудови моделі річки.

Другою вихідною передумовою є упорядкування основних процесів самоочищення, без врахування процесу розбавлення, за їх причинно-наслідковим взаємовпливом і поділ їх на ряд груп. До першої групи відносимо ті процеси, які починають діяти на хімічні речовини відразу після їх надходження до річки, окрім процесів розбавлення. До другої — ті процеси, що діють на результати дії першої (“попередньої”) групи і так далі. Процеси кожної групи, крім останньої, або спричиняють перетворення хімічних речовин з одних форм в інші (хімічна трансформація), або розкладають складні речовини на більш прості (хімічний та біохімічний розклад), або інше. Процеси ж групи,

яка вважається останньою, приводять до повного вилучення з річкової води речовин, котрі моделюються, — це процеси осадження, поглинання гідробіонтами, випаровування тощо.

Аналіз всіх процесів, які протікають в річках, дозволив встановити, що в більшості випадків можна обмежитись трьома групами, а іноді й двома.

Третьою вихідною передумовою є перенесення встановлених для хімічних показників закономірностей на показники бактеріологічні. Підставою для такої аналогії є те, що характер процесів, які впливають на хімічні речовини, є подібним до характеру процесів, які впливають на вміст бактерій та мікроорганізмів (див. Додаток Б). Наприклад, процеси осадження речовин подібні до процесів відмирання мікроорганізмів, процеси хімічного перетворення, які не змінюють значення показників, подібні до процесів звичайної життєдіяльності мікроорганізмів. Процеси поглинання гідробіонтами взагалі діють однаково і на речовини, і на мікроорганізми.

Побудуємо математичну модель зміни значень хімічних та бактеріологічних показників якості річкової води, враховуючи ці три вихідні передумови.

2.3.2 Побудова моделі

Перший процес будемо описувати в часі, виходячи з постулату, як це загально прийнято, що швидкість зміни значення показника якості води в будь-який момент часу пропорційна самому значенню показника, тобто [89, 64, 105, 122, 127, 133, 139]

$$\frac{dx_1(t)}{dt} = -k_1 x_1(t), \quad x_1(0) = x(0), \quad (2.2)$$

де x_1 — величина показника якості води, яка мала б місце, якщо на речовину діяли процеси тільки першої групи;

k_1 — коефіцієнт пропорційності між швидкістю протікання процесів першої групи та значенням показника, на який вони діють.

Розв'язок рівняння (2.2) має вигляд:

$$x_1(t) = x(0) \cdot e^{-k_1 t}. \quad (2.3)$$

Модель для врахування двох чи трьох груп послідовно-одночасних процесів пропонуємо будувати у відповідності з другою передумовою, тобто з врахуванням їх причинно-наслідкового взаємовпливу. А саме, з урахуванням впливу швидкості протікання процесів першої групи на процеси другої і процесів першої та другої груп на процеси третьої.

Математичний опис кожного набору груп послідовно-одночасних процесів, згідно з трьома вихідними передумовами, пропонуємо здійснювати в вигляді [4, 89]:

$$\frac{dx(t)}{dt} = G_l(t) x(t), \quad l = 1 \vee 2 \vee 3, \quad (2.4)$$

$$x(0) = x_0, \quad (2.5)$$

$$G_1(t) = -k_1, \quad (2.6)$$

$$G_2(t) = -k_2 \left(1 - e^{-k_1 t} \right), \quad (2.7)$$

$$G_3(t) = -k_3 \left[1 - e^{-k_2 \left(1 - e^{-k_1 t} \right) \cdot t} \right], \quad (2.8)$$

де x — це значення показника якості води (наприклад, концентрації будь-якої хімічної речовини), що моделюється;

$G_l(t)$ — функція, яка враховує вплив l -ї ($l = 1, 2$ чи 3) кількості груп послідовно-одночасних процесів на зміну значення показника x ;

x_0 — значення концентрації $x(t)$ в початковий момент часу $t = 0$;

T — інтервал часу, для якого виконується моделювання;

k_2 — коефіцієнт пропорційності між швидкістю протікання процесів другої групи, за умови їх ізольованого протікання, та значенням показника, на який вони діють; множенням k_2 на коефіцієнт $(1 - e^{-k_1 t})$ враховується вплив процесів першої групи на процеси другої;

k_3 — коефіцієнт пропорційності між швидкістю протікання процесів третьої групи, за умови їх ізольованого протікання, та значенням показника, на який вони діють; множенням k_3 на додатковий коефіцієнт враховуються впливи процесів першої та другої груп на процеси третьої.

Математична модель (2.4), (2.5), (2.7) для процесів двох груп враховує такі головні фізичні положення [4, 89]:

1) в початковий момент часу $t = 0$, коли процеси першої групи лише починаються, процеси другої групи ще зовсім не почалися, оскільки вони діють на результати дії процесів першої групи, яких немає; коефіцієнт $(1 - e^{-k_1 t})$ в функції (2.7) з $t = 0$ якраз дорівнює нулю, тому $dx_2(t)/dt = 0$, отже $x_2(t)$ дорівнює константі, яка за наших умов є нулем;

2) коли час прямує в нескінченність $t \rightarrow \infty$, процеси першої групи вже практично скінчилися і процеси другої групи, теж наближаючись до завершення, діють на ту концентрацію речовини чи вміст мікроорганізмів, які залишились після дії процесів першої групи; коефіцієнт пропорційності між величиною x_2 та її похідною $dx_2(t)/dt$, відома річ, вже не залежить від коефіцієнта k_1 , а дорівнює лише

коефіцієнту k_2 . Коефіцієнт $(1 - e^{-k_1 t})$ в функції (2.7) з $t \rightarrow \infty$ дорівнює одиниці, отже $dx_2(t)/dt = -k_2 x_2$. Тобто значення коефіцієнта $k_2 \cdot (1 - e^{-k_1 t})$ в разі зміни часу t від 0 до ∞ змінюється від 0 до k_2 , правильно відображаючи динаміку процесів.

З рівняння (2.8) видно, що для трьох груп процесів, аналогічно, значення швидкості протікання процесів в разі зміни часу t від 0 до ∞ змінюється від 0 до k_3 , вірно відображаючи динаміку процесів всіх трьох груп [89].

Розв'язки моделі (2.4) з функціями (2.6) для двох груп процесів і (2.8) для трьох процесів мають вигляд, відповідно [4, 89]:

$$x_2(t) = x_0 \cdot e^{-\frac{k_2}{k_1} [e^{-k_1 t} + k_1 t - 1]}, \quad (2.9)$$

$$x_3(t) = x_0 \cdot e^{-k_3 \cdot \left\{ t - \int_0^t e^{-k_2 (1 - e^{-k_1 q})} \cdot q \, dq \right\}}, \quad (2.10)$$

де q — проміжна змінна інтегрування.

Опишемо динаміку значень показника якості води вже на всій елементарній ділянці річки, враховуючи координати і часу t , і простору z . Тобто на основі моделі (2.4)—(2.8) отримаємо просторово-розподілену математичну модель, врахувавши процес розбавлення.

2.4 Розробка математичної моделі для елементарної ділянки річки з урахуванням просторової розподіленості її параметрів

Для побудови просторово-розподіленої математичної моделі, яка описує зміну, наприклад, концентрації деякої хімічної речовини як в часі, так і в просторі використано методи математичної фізики [18, 61,

90]. Нагадаємо, що, як і раніше, всі математичні співвідношення та фізичні обґрунтування можна застосовувати не тільки для значень концентрацій хімічних речовин, а і для значень будь-яких показників якості річкових вод, для яких виконуються вимоги, наведені в підрозділі 2.2.

Сутність виведення, здійсненого в авторській роботі [82], полягає в тому, що будується баланс зміни концентрації деякої хімічної речовини для елементарного об'єму річкового водотоку, розташованого між двох достатньо близьких (по осі координат z) перетинів.

В роботах [82, 86, 90] показано, що гідродинамічне рівняння матеріального балансу для річкового водотоку набуває вигляду:

$$\frac{\partial x(t, z)}{\partial t} - G_l(t) \cdot x(t, z) = v^* \frac{\partial x(t, z)}{\partial z} - \delta^* \frac{\partial^2 x(t, z)}{\partial z^2}, \quad (2.11)$$

$$l = 1 \vee 2 \vee 3,$$

$$x(0, z) = x_0(z), \quad x(t, 0) = a(t), \quad x(t, L) = b(t), \quad (2.12)$$

$$G_1(t) = -k_1, \quad (2.13)$$

$$G_2(t) = -k_2 \left(1 - e^{-k_1 t} \right), \quad (2.14)$$

$$G_3(t) = -k_3 \left[1 - e^{-k_2 \left(1 - e^{-k_1 t} \right) t} \right], \quad (2.15)$$

де v^* — аналог швидкісного коефіцієнта (м/с); δ^* — аналог турбулентно-дифузного коефіцієнта (м²/с).

Зауважимо, що коефіцієнти v^* та δ^* можуть як збігатися за значенням зі швидкістю течії річки v та коефіцієнтом турбулентної дифузії δ , так і бути відмінними від них, що розширює діапазон застосування виведеного рівняння в якості математичної моделі

динаміки якості води в річці.

2.5 Синтез математичної моделі динаміки річкових вод в просторі стану показників їх якості

Як було зазначено вище, математичну модель треба будувати в якомусь стандартизованому вигляді, який дозволив би за цією моделлю виконувати і поточне моделювання, і прогнозування, і синтез закону керування для заданих змінних. І однією з найкращих серед таких стандартизованих є модель, записана в просторі змінних стану об'єкта, в нашому випадку — в просторі стану показників якості річкової води [15, 30, 117, 118, 147].

В попередньому підрозділі побудована модель, яка описує зміну значень деякого показника якості річкової води як в просторі, так і в часі. Ця модель позбавлена більшості недоліків відомих моделей, розглянутих в підрозд. 1.3, але, по-перше, її дуже важко записати в просторі змінних стану, оскільки в ній присутня не тільки змінна часу, а й змінна простору. А по-друге, як і для інших складних моделей розбавлення, для її ідентифікації необхідно мати великий масив експериментальних даних.

Для того, щоб позбавитись вказаних недоліків, модель (2.22) — (2.26) треба записати, як і модель (1.1), для окремого об'єму річкової води, для якого змінна часу t і просторова координата z пов'язані між собою співвідношенням (1.2). Завдяки цьому, в рівнянні (2.22) можна зменшити кількість незалежних змінних. А оскільки кінцева математична модель повинна бути записана в класичному просторі змінних стану, то найбільш доцільним буде позбавитись змінної

простору z і перейти лише до змінної часу t . Отже, з (1.2) виражаємо змінну z через змінну t і підставляємо її в (2.22), (2.23). Після перетворень отримаємо [4, 88]

$$\frac{dx(t)}{dt} - G_l(t) \cdot x(t) = v^* \frac{dx(t)}{v dt} - \delta^* \frac{d^2 x(t)}{v^2 dt^2}, \quad (2.27)$$

$$x(0) = x_0, \quad \left[\frac{dx}{dt} \right]_{t=0} = x_{00}, \quad (2.28)$$

або, після перетворень [4, 88]:

$$\frac{\delta^*}{v^2} \frac{d^2 x(t)}{dt^2} + \left(1 - \frac{v^*}{v} \right) \frac{dx(t)}{dt} - G_l(t) \cdot x(t) = 0, \quad (2.29)$$

$$x(0) = x_0, \quad \dot{x}(0) = x_{00}, \quad (2.30)$$

де x_{00} — значення першої похідної від змінної x в початковий момент часу $t = 0$.

Введемо позначення:

$$D = \frac{\delta^*}{v^2}, \quad (2.31)$$

$$V = 1 - \frac{v^*}{v}. \quad (2.32)$$

З врахуванням позначень (2.31) та (2.32) рівняння (2.29) можна переписати в більш компактному вигляді [4, 88]:

$$\ddot{x}(t) + V^* \dot{x}(t) - G_l^*(t) x(t) = 0, \quad (2.33)$$

$$x(0) = x_0, \quad \dot{x}(0) = x_{00},$$

де

$$\ddot{x}(t) = \frac{d^2 x(t)}{dt^2}, \quad \dot{x}(t) = \frac{dx(t)}{dt}, \quad (2.34)$$

$$V^* = \frac{V}{D}, \quad (2.35)$$

$$G_l^*(t) = \frac{G_l(t)}{D}, \quad l = 1 \vee 2 \vee 3, \quad (2.36)$$

$$G_1(t) = -k_1, \quad (2.37)$$

$$G_2(t) = -k_2 \left(1 - e^{-k_1 t} \right), \quad (2.38)$$

$$G_3(t) = -k_3 \left[1 - e^{-k_2 \left(1 - e^{-k_1 t} \right) \cdot t} \right]. \quad (2.39)$$

Рівняння (2.33) є класичним лінійним однорідним диференціальним рівнянням другого порядку зі змінними коефіцієнтами.

Запишемо модель (2.33)—(2.39) в класичному просторі змінних стану — в просторі стану показників якості річкової води [30, 81, 88, 117, 118]. Для цього введемо такі змінні стану [4, 88]:

$$\begin{aligned} x_1(t) &= x(t), \\ x_2(t) &= \dot{x}(t). \end{aligned} \quad (2.40)$$

Тоді модель (2.33)—(2.39) запишеться у вигляді [4, 88]:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1(t) &= x_2(t), \\ \dot{x}_2(t) &= G_l^*(t) x_1(t) - V^* x_2(t), \end{aligned} \quad (2.41)$$

$$x_1(0) = x(0), \quad x_2(0) = \dot{x}(0). \quad (2.42)$$

В класичній же векторно-матричній формі модель (2.40)—(2.42) набуває вигляду [4, 88]:

$$\dot{\mathbf{X}}(t) = \mathbf{A}_l(t) \mathbf{X}(t), \quad \mathbf{X}(0) = \mathbf{X}_0, \quad (2.43)$$

де

$$\begin{aligned} \mathbf{X}(t) &= \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix}, \quad \dot{\mathbf{X}}(t) = \begin{bmatrix} \dot{x}_1(t) \\ \dot{x}_2(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{X}(0) = \begin{bmatrix} x_1(0) \\ x_2(0) \end{bmatrix}, \\ \mathbf{X}_0 &= \begin{bmatrix} x_0 \\ x_{00} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_l(t) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ G_l^*(t) & -V^* \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Математична модель (2.43) має дуже компактний вигляд і може використовуватись для розв'язання різних задач, пов'язаних з моделюванням якості води в річці.

Якщо порівняти модель (2.44), записану для деякої елементарної ділянки річки, з моделями, які є складовими частинами узагальненої математичної моделі (2.1), то легко помітити, що

$$\mathbf{A}_{l(i)}(t_i) = \mathbf{W}_{X_i}(t_i), \quad i = \overline{1, N_d}, \quad (2.45)$$

де $\mathbf{A}_{l(i)}(t_i)$ ($i = 1, 2, \dots, N_d$) — матриця функцій (2.45), записана для i -ої елементарної ділянки річки.

2.6 Узагальнена математична модель динаміки якості річкової води

З урахуванням отриманих в попередніх підрозділах моделей, узагальнена математична модель динаміки якості річкової води на ділянці моделювання річки має вигляд [150]:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{X}}_i(t_i) = \mathbf{A}_{l(i)}(t_i) \mathbf{X}_i(t_i), \\ \mathbf{Y}_{i(j)} = \mathbf{C}_{i(j)} \mathbf{X}_i^T(\mu_{i(j)}), \quad j = \overline{1, n_{y(i)}}, \\ \mathbf{X}_i(0) = \mathbf{X}_{i-1}(T_{i-1}) + \lambda_i \mathbf{U}_i + \rho_{I(i)} \mathbf{R}_{I(i)} + \rho_{II(i)} \mathbf{R}_{II(i)} + \rho_{III(i)} \mathbf{R}_{III(i)}, \\ \mathbf{X}_0(T_0) = \mathbf{X}_0, \quad t_i = [0, T_i], \quad i = \overline{1, N_d}, \end{cases} \quad (2.46)$$

де

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_{i(j)} &= \begin{bmatrix} y_{i(j)1} \\ y_{i(j)2} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C}_i = \begin{bmatrix} c_{i1} \\ c_{i2} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{U}_i = \begin{bmatrix} u_{i1} \\ u_{i2} \end{bmatrix}, \\ \mathbf{R}_{I(i)} &= \begin{bmatrix} r_{I(i)1} \\ r_{I(i)2} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{R}_{II(i)} = \begin{bmatrix} r_{II(i)1} \\ r_{II(i)2} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{R}_{III(i)} = \begin{bmatrix} r_{III(i)1} \\ r_{III(i)2} \end{bmatrix}, \\ i &= \overline{1, N_d}, \quad j = \overline{1, n_{y(i)}}, \end{aligned} \quad (2.47)$$

де перша змінна векторів Y , U , R_I , R_{II} , R_{III} , як і в векторі X , відповідає значенню показника якості вод відповідного типу, а друга змінна — значенню першої похідної в часі цього показника;

n_y — кількість виходів на i -ій елементарній ділянці (в моделі (2.1) вважалось, що $n_y = 1$);

$\mu_{i(j)}$ ($j = \overline{1, n_{y(i)}}$) — час, за який водний об'єм річки, для якого проводиться моделювання, добігає від початкового створу i -ої елементарної ділянки до створу, в якому на цій ділянці розташований її j -й вихід; в разі, коли виходом є кінцевий створ елементарної ділянки ($n_{y(i)} = 1$): $\mu_i = T_i$;

$C_{i(j)}$ — вектор спостережень, елементи якого встановлюють відповідність між змінними стану, що характеризують якість води в точці з координатою $v \cdot t_{i(j)}$, та вихідними змінними в цій ж точці;

λ_i , ρ_{II} , ρ_{III} , ρ_{III} — числові коефіцієнти, що враховують співвідношення витрат річкових вод і витрат вод, що надходять зі входів, якість яких характеризується величинами u , r_I , r_{II} , r_{III} на i -ій елементарній ділянці, відповідно; також ці коефіцієнти враховують початкове розбавлення вказаних вод, яке відбувається під час їх надходження до середини фарватеру річки — більш детально методики визначення цих коефіцієнтів будуть розглянуті в розд. 4.

Математичну модель (2.46) можна переписати і в іншому вигляді, а саме:

$$\begin{aligned}
& T_{i-1}^* < t \leq T_i^*: \\
& \left\{ \begin{aligned} & \dot{\mathbf{X}}(t - \tau_i) = \mathbf{A}_{I(i)}(t - \tau_i) \mathbf{X}(t - \tau_i), \\ & \mathbf{X}(0) = \mathbf{X}(T_{i-1}^*) + \lambda_i \mathbf{U}_i + \rho_{I(i)} \mathbf{R}_{I(i)} + \rho_{II(i)} \mathbf{R}_{II(i)} + \rho_{III(i)} \mathbf{R}_{III(i)}, \\ & \mathbf{X}(T_0^*) = \mathbf{X}_0, \quad i = \overline{1, N_d}, \end{aligned} \right\} \quad (2.48) \\
& T_0^* = 0, \quad \tau_1 = 0, \quad t = [0, T], \\
& \mathbf{Y}_{i(j)} = \mathbf{C}_{i(j)} \mathbf{X}^T(t - \mu_{i(j)}), \quad i = \overline{1, N_d}, \quad j = \overline{1, n_{y(i)}},
\end{aligned}$$

де $\mathbf{X}(t)$ ($t = [0, T]$) — значення вектора змінних стану на всій ділянці моделювання;

τ_i ($i = 1, 2, \dots, N_d$) — час, за який водний об'єм річки, для якого проводиться моделювання, добігає від початкового створу загальної ділянки моделювання до створу розташування на i -ій елементарній ділянці входу стічних вод, якість яких характеризується вектором $\mathbf{U}_i$; оскільки розбиття на елементарні ділянки виконується таким чином, щоб їх початкові створи збігалися зі створами входів, то $\tau_1 = 0$;

T_i^* ($i = 1, 2, \dots, N_d$) — інтервал часу, за який водний об'єм річки, для якого проводиться моделювання, добігає від початкового створу загальної ділянки моделювання до кінцевого створу i -ої елементарної ділянки:

$$T_i^* = \sum_{j=1}^i \frac{L_j}{v_j}. \quad (2.49)$$

Головна відміна моделі (2.48) від моделі (2.46) полягає в тому, що в першій є лише один вектор змінних стану, який характеризує якість річкової води на всій загальній ділянці моделювання. В моделі ж (2.46) є N_d подібних векторів — по одному на кожен елементарну ділянку річки. Фактично, значеннями вектора змінних стану $\mathbf{X}(t)$ моделі (2.48) є всі значення всіх векторів змінних стану $\mathbf{X}_i(t)$ ($i = 1, 2, \dots, N_d$), зібрані разом.

Отже, якщо модель (2.46) є більш наочною, то модель (2.48) більш чітко відповідає поставленій задачі моделювання на всій ділянці річки, визначеній для моделювання.

На завершення цього розділу зробимо два зауваження, які будуть використані в наступних розділах.

Перше зауваження стосується того, що в деяких випадках можна використовувати модель у вигляді диференціального рівняння не лише другого (2.33)–(2.39), а і першого порядку (2.4)–(2.8). Згідно з порядком використаного диференціального рівняння моделі будемо називати, відповідно: “модель другого порядку” та “модель першого порядку”.

Підставами для використання моделі першого порядку нарівні з моделлю другого порядку є те, що:

1) згідно із співвідношенням (1.2), модель, яка описує зміну в часі значень x в фіксованій координаті простору z , описує її зміну i в просторі — вздовж осі z ;

2) процеси розбавлення та змішування можна віднести до послідовно-одночасних процесів першої групи, тобто до тих процесів, що відразу діють на хімічні речовини та мікроорганізми, котрі надходять до річки.

Важливо, що всі вирази (2.44)–(2.49), які записані для моделі другого порядку, є справедливими і для моделі першого порядку, за винятком того, що:

1) всі вектори-стовпці стають одновимірними і перетворюються на звичайні числа, оскільки єдиною вихідною, вхідною змінною і змінною стану стає само значення показника якості води;

2) матриця $A_i(t)$ (див. (2.44)) також стає одновимірною і перетворюється на звичайну функцію:

$$A_l(t) = G_l(t), \quad l = 1 \vee 2 \vee 3. \quad (2.50)$$

Звичайно, модель другого порядку з математичної та фізичної точки зору є більш коректною, але безумовні переваги моделі першого порядку в простоті запису, ідентифікації та використання, а також в більшій наочності обумовлюють необхідність в її більш детальному розгляді, нарівні з моделлю другого порядку.

Друге зауваження пов'язане із необхідністю підкреслити факт взаємозв'язку між G-функціями (2.6)—(2.8). Нескладно показати, що мають місце такі співвідношення:

$$G_1(t) = -k_1, \quad (2.51)$$

$$G_2(t) = -k_2 \cdot [1 - e^{-G_1(t) \cdot t}], \quad (2.52)$$

$$G_3(t) = -k_3 \cdot [1 - e^{-G_2(t) \cdot t}]. \quad (2.53)$$

2.7 Висновки

У відповідності з поставленими задачами запропоновано нову концепцію побудови математичних моделей динаміки хімічних та бактеріологічних показників якості води, які позбавлені недоліків, характерних існуючим моделям. За запропонованою концепцією розроблено узагальнену математичну модель, яка описує динаміку значень хімічних та бактеріологічних показників якості води на ділянці річки будь-якої довжини з будь-якою кількістю входів та виходів. Узагальнена модель складається з низки математичних моделей, записаних для окремих елементарних ділянок, на які розбивається загальна ділянка моделювання за ланцюговим принципом.

Побудовано математичні моделі динаміки хімічних та

бактеріологічних показників якості води, які можуть бути використані як моделі для окремих елементарних ділянок річки. Зокрема, розроблено модель зміни якості річкової води на основі упорядкування основних річкових процесів за їх причинно-наслідковим взаємовпливом. Спочатку без урахування процесу розбавлення, а потім — з урахуванням, яке призвело до отримання просторово-розподіленої моделі. Після врахування особливостей динаміки річкового потоку, зазначених в розд. 1, просторово-розподілену математичну модель перетворено на просторово-зосереджену.

Отриману модель динаміки хімічних та бактеріологічних показників якості води трансформовано в стандартизовану форму — в простір стану показників якості річкових вод, який дозволяє використовувати її для розв'язання задач аналізу управління та прогнозу.

Розроблені моделі використано в якості елементу узагальненої математичної моделі динаміки хімічних та бактеріологічних показників якості води. Запропоновано дві форми запису узагальненої моделі з конкретизованими функціями та змінними:

- з низкою векторів змінних стану показників якості річкової води, кожний з яких характеризує якість води на окремій елементарній ділянці,

- з одним вектором змінних стану показників якості річкової води, який характеризує якість води на всій ділянці моделювання.

Вказано переваги кожної з цих форм запису.

Введено поняття "моделі першого порядку" і "моделі другого порядку", які описують динаміку значень показників якості річкової води на базі диференціальних рівнянь першого і другого порядків,

відповідно. Визначено умови, за яких використання моделі першого порядку дає результати не гірші, ніж під час використання моделі другого порядку. Показано яким чином здійснюється коректний перехід від моделі другого порядку до моделі першого порядку.

РОЗДІЛ 3

АНАЛІЗ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ПРОЦЕСІВ ЗАБРУДНЕННЯ І ОЧИЩЕННЯ РІЧКОВИХ ВОД ТА СИНТЕЗ ОБЧИСЛЮВАЛЬНИХ АЛГОРИТМІВ

3.1 Аналіз моделі першого порядку

3.1.1 Розв'язання рівнянь

Розв'язки рівняння моделі першого порядку

$$\frac{dx(t)}{dt} = G_l(t) x(t), \quad x(0) = x_0, \quad l = 1 \vee 2 \vee 3 \quad (3.1)$$

були знайдені в попередньому розділі і для функції $G_l(t)$ з різними значеннями індексу l мають такий вигляд [89]:

— $l = 1$:

$$x(t) = x_0 \cdot e^{-k_1 t}, \quad (3.2)$$

— $l = 2$:

$$x(t) = x_0 \cdot e^{-\frac{k_2}{k_1} [e^{-k_1 t} + k_1 t - 1]}, \quad (3.3)$$

— $l = 3$:

$$x(t) = x_0 \cdot e^{-k_3 \cdot \left\{ t - \int_0^t e^{-k_2(1-e^{-k_1 q})} dq \right\}}. \quad (3.4)$$

3.1.2 Приклади розв'язків рівнянь

На рис. 3.1, 3.2, 3.3 наведемо приклади графіків зміни значень деякого показника якості води в часі $x(t)$, динаміка якого описується

моделями в вигляді (2.4)—(2.8). Обчислення значень графіків проводилось за формулами (2.3), (2.9), (2.10). Розглянуто зміну цього показника на протязі однієї доби ($T = 24$ години) з інтервалом в півгодини, тобто змінна часу t приймала значення: 0; 0,5; 1; ...; 24 (год.). Початкова умова x_0 дорівнює 100 умовним одиницям.

Приклад 1 (рис. 3.1). $k_1 = 0,4$; $k_2 = 0,2$; $k_3 = 0,04$:

$$x(t) = x_0 \cdot e^{-0,4 \cdot t},$$

$$x(t) = x_0 \cdot e^{-0,5 \cdot [e^{-0,4 \cdot t} + 0,4 \cdot t - 1]},$$

$$x(t) = x_0 \cdot e^{-0,04 \cdot \left\{ t - \int_0^t e^{-0,2 \cdot (1 - e^{-0,4 \cdot q})} dq \right\}}.$$

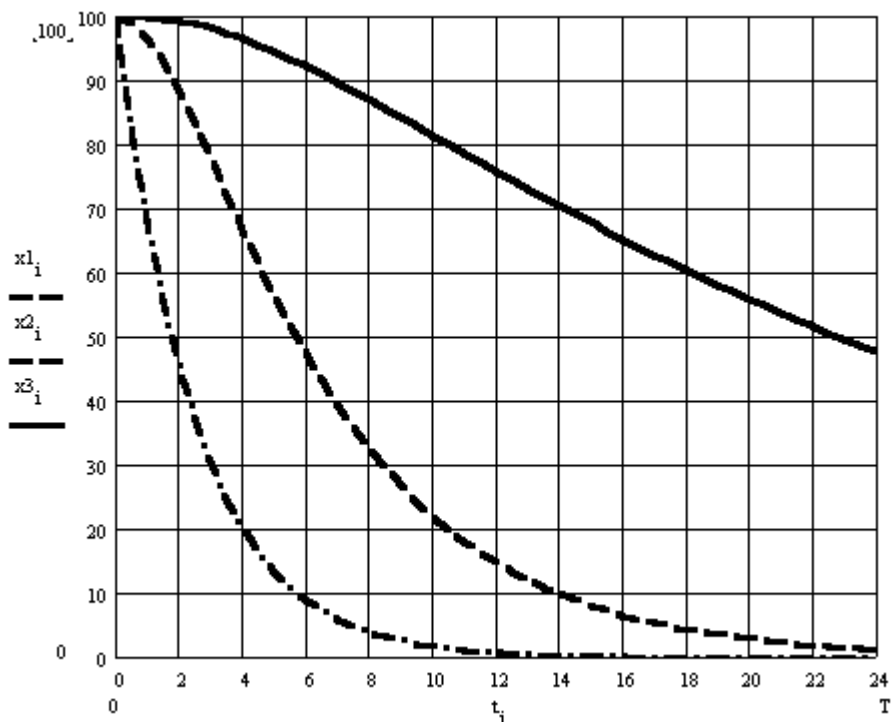


Рисунок 3.1 — Значення показника якості води за умов дії на нього послідовно-одночасних процесів однієї (x_1), двох (x_2) та трьох (x_3) груп з параметрами $k_1 = 0,4$; $k_2 = 0,2$; $k_3 = 0,04$

Приклад 2 (рис. 3.2). $k_1 = 0,25$; $k_2 = 0,25$; $k_3 = 0,25$:

$$x(t) = x_0 \cdot e^{-0,25 \cdot t},$$

$$x(t) = x_0 \cdot e^{-[e^{-0,25 \cdot t} + 0,25 \cdot t - 1]},$$

$$x(t) = x_0 \cdot e^{-0,25 \cdot \left\{ t - \int_0^t e^{-0,25 \cdot (1 - e^{-0,25 \cdot q})} dq \right\}}.$$

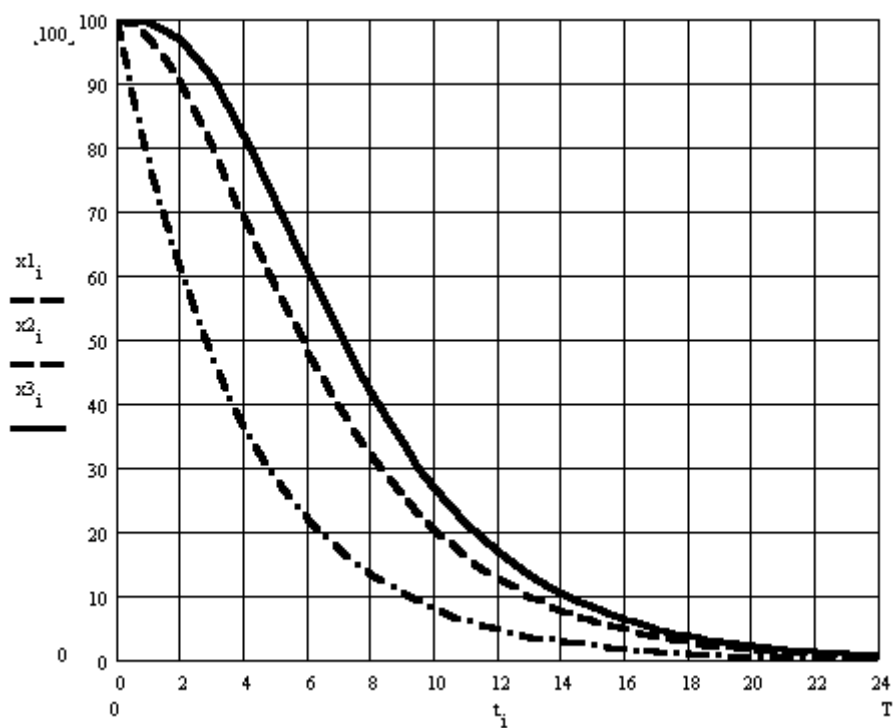


Рисунок 3.2 — Значення показника якості води за умов дії на нього послідовно-одночасних процесів однієї (x_1), двох (x_2) та трьох (x_3) груп з параметрами $k_1 = 0,25$; $k_2 = 0,25$; $k_3 = 0,25$

Приклад 3 (рис. 3.3). $k_1 = 0,2$; $k_2 = 0,1$; $k_3 = 0,05$:

$$x(t) = x_0 \cdot e^{-0,2 \cdot t},$$

$$x(t) = x_0 \cdot e^{-0,5 \cdot [e^{-0,2 \cdot t} + 0,2 \cdot t - 1]},$$

$$x(t) = x_0 \cdot e^{-0,05 \cdot \left\{ t - \int_0^t e^{-0,1 \cdot (1 - e^{-0,2 \cdot q})} dq \right\}}.$$

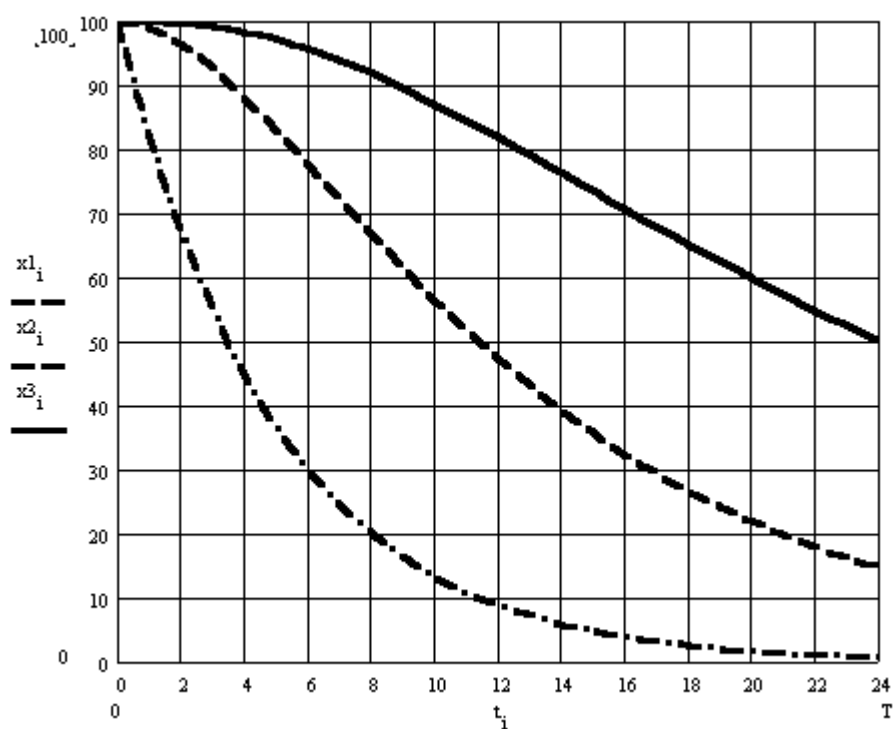


Рисунок 3.3 — Значення показника якості води за умов дії на нього послідовно-одночасних процесів однієї (x_1), двох (x_2) та трьох (x_3) груп з параметрами $k_1 = 0,2$; $k_2 = 0,1$; $k_3 = 0,05$

Обчислення та побудова графіків показника x виконувалась в пакеті прикладних програм Mathcad 7.0 Professional для різних значень

k-коефіцієнтів в разі, коли на цей показник впливають процеси однієї ($x_1(t)$), двох ($x_2(t)$) та трьох ($x_3(t)$) груп:

З наведених графіків видно як відрізняється форма кривої в залежності від кількості l груп процесів, що враховуються.

3.1.3 Аналіз рівнянь за допомогою числових рядів

Дослідимо деякі особливості запропонованих математичних моделей на прикладі моделі першого порядку через розкладання G-функцій (2.6)—(2.8) в числові ряди.

Використаємо відомий розклад в ряд Маклорена експоненціальної функції [28, 61]

$$e^{at} = 1 + at + \frac{a^2 t^2}{2!} + \frac{a^3 t^3}{3!} + \dots + \frac{a^m t^m}{m!} + \dots, \quad (3.5)$$

звідки для $a = -k$ можна записати

$$e^{-kt} = 1 - kt + \frac{k^2 t^2}{2!} - \frac{k^3 t^3}{3!} + \dots + (-1)^m \frac{k^m t^m}{m!} + \dots \quad (3.6)$$

або

$$1 - e^{-kt} = kt - \frac{k^2 t^2}{2!} + \frac{k^3 t^3}{3!} - \dots + (-1)^{m+1} \frac{k^m t^m}{m!} + \dots \quad (3.7)$$

Порівнюючи ліву частину (3.7) з виразами для G-функцій

$$G_1(t) = -k_1, \quad (3.8)$$

$$G_2(t) = -k_2 \left(1 - e^{-k_1 t} \right), \quad (3.9)$$

$$G_3(t) = -k_3 \left[1 - e^{-k_2 \left(1 - e^{-k_1 t} \right) \cdot t} \right], \quad (3.10)$$

легко помітити, що вона фігурує і в функції $G_2(t)$, і в функції $G_3(t)$.

Підставляючи (3.7) в (3.8), отримуємо

$$\begin{aligned}
G_2(t) &= -k_2 \left(k_1 t - \frac{k_1^2 t^2}{2!} + \frac{k_1^3 t^3}{3!} - \dots + (-1)^{m+1} \frac{k_1^m t^m}{m!} + \dots \right) = \\
&= -k_1 k_2 t + \frac{k_1^2 k_2 t^2}{2!} - \frac{k_1^3 k_2 t^3}{3!} + \dots + (-1)^m \frac{k_1^m k_2 t^m}{m!} + \dots .
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Аналогічно для (3.10):

$$\begin{aligned}
G_3(t) &= -k_3 \left[1 - e^{-k_2 \left(k_1 t - \frac{k_1^2 t^2}{2!} + \frac{k_1^3 t^3}{3!} - \dots + (-1)^{m+1} \frac{k_1^m t^m}{m!} + \dots \right)} \cdot t \right] = \\
&= -k_3 \left[1 - e^{\left(-k_1 k_2 t + \frac{k_1^2 k_2 t^2}{2!} - \frac{k_1^3 k_2 t^3}{3!} + \dots + (-1)^m \frac{k_1^m k_2 t^m}{m!} + \dots \right) \cdot t} \right] = \\
&= -k_3 \left[\left(-k_1 k_2 t + \frac{k_1^2 k_2 t^2}{2!} - \frac{k_1^3 k_2 t^3}{3!} + \dots + (-1)^m \frac{k_1^m k_2 t^m}{m!} + \dots \right) \cdot t - \right. \\
&\quad \left. - \frac{\left(-k_1 k_2 t + \frac{k_1^2 k_2 t^2}{2!} - \frac{k_1^3 k_2 t^3}{3!} + \dots + (-1)^m \frac{k_1^m k_2 t^m}{m!} + \dots \right)^2 \cdot t^2}{2!} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{\left(-k_1 k_2 t + \frac{k_1^2 k_2 t^2}{2!} - \frac{k_1^3 k_2 t^3}{3!} + \dots + (-1)^m \frac{k_1^m k_2 t^m}{m!} + \dots \right)^3 \cdot t^3}{3!} - \right. \\
&\quad \left. - \dots + (-1)^{m+1} \cdot \right. \\
&\quad \left. \cdot \frac{\left(-k_1 k_2 t + \frac{k_1^2 k_2 t^2}{2!} - \frac{k_1^3 k_2 t^3}{3!} + \dots + (-1)^m \frac{k_1^m k_2 t^m}{m!} + \dots \right)^m \cdot t^m}{m!} + \dots \right] = \\
&= - \left(-k_1 k_2 k_3 t + \frac{k_1^2 k_2 k_3 t^2}{2!} - \dots + (-1)^m \frac{k_1^m k_2 k_3 t^m}{m!} + \dots \right) \cdot t +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\left(-k_1 k_2 k_3 t + \frac{k_1^2 k_2 k_3 t^2}{2!} - \dots + (-1)^m \frac{k_1^m k_2 k_3 t^m}{m!} + \dots \right)^2}{2!} \cdot t^2 - \\
& - \frac{\left(-k_1 k_2 k_3 t + \frac{k_1^2 k_2 k_3 t^2}{2!} - \dots + (-1)^m \frac{k_1^m k_2 k_3 t^m}{m!} + \dots \right)^3}{3!} \cdot t^3 + \\
& + \dots + (-1)^m \cdot \\
& \cdot \frac{\left(-k_1 k_2 k_3 t + \frac{k_1^2 k_2 k_3 t^2}{2!} - \dots + (-1)^m \frac{k_1^m k_2 k_3 t^m}{m!} + \dots \right)^m}{m!} \cdot t^m. \quad (3.12)
\end{aligned}$$

На жаль, вираз для $G_3(t)$ (3.12) не можна записати в такому ж наочному вигляді, як для $G_2(t)$ (3.11). Головним чином через те, що в виразі (3.12) присутні степені від нескінченного ряду. Звичайно, записати чому дорівнює m -ий степінь від полінома нескінченного порядку теоретично можливо. Але підсумкова формула буде дуже громіздкою і позбавленою наочності, тому використовувати її для виразу (3.12) немає сенсу.

Запишемо формули (3.11), (3.12) в більш компактному вигляді, використавши представлення ряду (3.7)

$$1 - e^{-kt} = \sum_{i=1}^{\infty} (-1)^{i+1} \frac{k^i t^i}{i!}. \quad (3.13)$$

Тоді вирази (3.11) можна переписати в вигляді:

$$G_2(t) = k_2 \cdot \sum_{i=1}^{\infty} (-1)^i \frac{k_1^i t^i}{i!}, \quad (3.14)$$

$$G_3(t) = k_3 \cdot \sum_{i=1}^{\infty} (-1)^i \frac{k_2^i t^i \cdot \sum_{j=1}^i (-1)^j \frac{k_1^j t^j}{j!}}{i!}. \quad (3.15)$$

Обмежимо в (3.14), (3.15) лише першим членом ряду (3.13)

$$1 - e^{-kt} = kt. \quad (3.16)$$

Підставляємо (3.16) в (3.9), (3.10) або записуємо формули (3.11), (3.12) для випадку $m = 1$ чи (3.14), (3.15) без знаку суми ($i = 1$). Вирази для G-функцій набувають вигляду:

$$G_1(t) = -k_1, \quad (3.17)$$

$$G_2(t) = -k_1 k_2 t, \quad (3.18)$$

$$G_3(t) = -k_1 k_2 k_3 t^2. \quad (3.19)$$

З порівняння виразів (3.17)—(3.19) легко побачити, що в загальному випадку

$$G_l(t) = - \left(\prod_{j=1}^l k_j \right) \cdot t^{l-1}, \quad l = 1 \vee 2 \vee 3. \quad (3.20)$$

Для перших двох і більше членів ряду (3.6) формули, подібні до (3.16)—(3.19), записувати не будемо, оскільки виникають певні труднощі в записі формули типу (3.20). Це пов'язано з тим, що вже для перших двох членів ряду (3.6) вираз (3.12) для функції $G_3(t)$ набуває досить складного вигляду і втрачає наочність.

Перейдемо до використання формул (3.8), (3.11), (3.12) в розв'язанні рівнянь моделей першого та другого порядків. При цьому будемо використовувати таку методику:

1. Представляємо G-функції у вигляді ряду

$$G_l(t) = \chi + g_{l1}t + g_{l2}t^2 + g_{l3}t^3 + \dots + g_{lp}t^p + \dots, \quad (3.21)$$

де χ — постійна складова ряду;

g_p ($p = 1, 2, \dots$) — деякі функції, які залежать від значень k -коефіцієнтів та значень індексів l і p :

для $l = 1$

$$\chi = k_1, \quad g_{1p} = 0, \quad p = 1, 2, \dots; \quad (3.22)$$

для $l = 2$

$$\chi = 0, \quad g_{2p} = (-1)^p \cdot \frac{k_1^p k_2}{p!}, \quad p = 1, 2, \dots; \quad (3.23)$$

для $l = 3$ подібний вираз отримувати не будемо через описані вище труднощі представлення функції (3.15) в вигляді ряду (3.21); зазначимо лише, що

$$\chi = 0, \quad g_{31} = 0. \quad (3.24)$$

2. Розв'язуємо рівняння моделі першого порядку, підставляючи до них замість G-функцій вираз (3.21)

$$\frac{d\tilde{x}(t)}{dt} = \left[\chi + \sum_{p=1}^{\infty} g_{lp} t^p \right] \cdot \tilde{x}(t), \quad \tilde{x}(0) = x_0, \quad l = 1 \vee 2 \vee 3, \quad (3.25)$$

$$\tilde{x}_{lq}(t) = x_0 \cdot e^{\int \left[\chi + \sum_{p=1}^q g_{lp} t^p \right] dt} = x_0 \cdot e^{\left[\chi t + \sum_{p=1}^q \left(\frac{g_{lp}}{p+1} t^{p+1} \right) \right]}, \quad (3.26)$$

$$l = 1 \vee 2 \vee 3, \quad q = 1, 2, \dots,$$

де $\tilde{x}_{lq}(t)$, ($l = 1 \vee 2 \vee 3$) — значення $x(t)$, яке обчислюється за G-функцією із вказаним значенням індексу l (кількість груп процесів, що розглядається), котра представлена в вигляді числового ряду з $(q + 1)$ членами.

Підставляємо вирази (3.22)—(3.24) в (3.26) і отримуємо:

для $l = 1$

$$\tilde{x}_{1q}(t) = x_0 e^{-k_1 t}; \quad (3.27)$$

для $l = 2$

$$\tilde{x}_{2q}(t) = x_0 \cdot e^{-k_2 \cdot \sum_{p=1}^q \left((-1)^{p+1} \cdot \frac{k_1^p}{(p+1)!} t^{p+1} \right)}, \quad q = 1, 2, \dots; \quad (3.28)$$

для $l = 3$

$$\tilde{x}_{3q}(t) = x_0 \cdot e^{\sum_{p=2}^q \left(\frac{g_{3p}}{p+1} t^{p+1} \right)}, \quad q = 2, 3, \dots \quad (3.29)$$

3. Задаємось деякими значеннями k -коефіцієнтів k_1 , k_2 і k_3 , інтервалом $[0, T]$ та кількістю значень N_t моментів часу t на цьому інтервалі:

$$t_i = i \cdot \Delta t, \quad i = \overline{0, N_t}, \quad \Delta t = \frac{T}{N_t}. \quad (3.30)$$

4. За формулами (3.7), (3.8)²⁾ обчислюємо значення $x(t_i)$, позначаючи їх відповідно: $x_2(t_i)$ та $x_3(t_i)$, що в цьому підрозділі буде означати значення $x(t_i)$, які обчислені за G -функціями із вказаними значеннями індексу l (кількість груп процесів, що розглядається) — не плутати ці позначення із змінними простору стану, наприклад — $x_2(t)$ в (2.44).

5. За формулами (3.28), (3.29) обчислюємо значення $\tilde{x}_{2q}(t_i)$, $\tilde{x}_{3q}(t_i)$ для $q = 1, 2, 3, \dots$

6. Знаходимо відносні похибки відхилень значень, отриманих в четвертому та п'ятому пунктах алгоритму:

$$\delta_{lq} = \frac{\sum_{i=1}^{N_t} |x_l(t_i) - \tilde{x}_{lq}(t_i)|}{\sum_{i=1}^{N_t} |\tilde{x}_{lq}(t_i)|}, \quad l = 2 \vee 3. \quad (3.31)$$

7. Робимо висновки щодо того, яким чином значення $\tilde{x}_{lq}(t)$ наближаються до значень $x_l(t_i)$ ($l = 2 \vee 3$) в залежності від кількості членів ряду (3.21), котрі враховуються.

За наведеним алгоритмом в середовищі Mathcad 7.0 Professional

²⁾ Починаючи з цього пункту, модель першого порядку в випадку $l = 1$ не розглядається, оскільки вона не розкладається в ряд. Раніше вона розглядалась лише для загальності опису.

проведено відповідні розрахунки. Програма, яка виконує пункти 1—6 алгоритму, приведена в Додатку В. У відповідності з пунктом 7 алгоритму робимо висновки:

а) значення $\ddot{x}_{2q}(t_i)$ наближаються до значень $x_2(t_i)$ дуже швидко — вже з $q = 2$ вони майже не розрізняються;

б) наближення значень $\ddot{x}_{3q}(t_i)$ до значень $x_3(t_i)$ спочатку також відбувається досить швидко (вони майже не розрізняються вже при $q = 5$), але потім набуває чітко вираженого коливального характеру. Таку поведінку моделі для випадку $l = 3$ й слід було очікувати через її більшу складність, порівняно з моделлю для $l = 2$.

3.2 Аналіз моделі другого порядку

3.2.1 Аналіз труднощів розв'язання задачі

Модель другого порядку має вигляд:

$$\begin{aligned} \ddot{x}(t) + V^* \dot{x}(t) - G_l^*(t) x(t) &= 0, \\ x(0) = x_0, \quad \dot{x}(0) &= x_{00}, \end{aligned} \quad (3.32)$$

де

$$V^* = \frac{V}{D}, \quad (3.33)$$

$$G_1^*(t) = -K_1^*, \quad (3.34)$$

$$G_2^*(t) = -K_2^* (1 - e^{-k_1 t}), \quad (3.35)$$

$$G_3^*(t) = -K_3^* \left[1 - e^{-k_2 (1 - e^{-k_1 t}) \cdot t} \right], \quad (3.36)$$

$$K_l^* = \frac{k_l}{D}, \quad l = 1 \vee 2 \vee 3. \quad (3.37)$$

Формули (3.34)—(3.37) отримані поєднанням формули (2.36) з виразами (2.37)—(2.39).

Розв'язання рівнянь моделі (3.32)—(3.37) — досить складна задача. Сформулюємо деякі з основних труднощів, котрі обумовлюють цю складність.

Відомо, що в загальному випадку розв'язання диференціального рівняння другого порядку зі змінними коефіцієнтами в аналітичному вигляді неможливе [18, 50, 61, 63, 153]. А тому необхідно застосовувати чисельні методи. Однак рівняння (3.32) має одну особливість, котра унеможлиблює його розв'язання за допомогою звичайних чисельних методів, подібних, наприклад, до методів Ейлера чи методів Рунге—Кутта різних порядків. Цією особливістю є його жорсткість. Доведемо цей факт, використовуючи найбільш просту форму цього рівняння, яка має місце при $l = 1$ — модель (3.32) з (3.34)

$$\begin{aligned} \ddot{x}(t) + V^* \dot{x}(t) + K_1^* x(t) &= 0, \\ x(0) &= x_0, \quad \dot{x}(0) = x_{00}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Рівняння (3.38) — це диференціальне рівняння другого порядку з постійними коефіцієнтами, розв'язок якого можна отримати в аналітичному вигляді, наприклад, за допомогою перетворення Лапласа. Цей розв'язок має вигляд [87, 142]:

$$x(t) = \frac{(V^* + P^*) x_0 + 2x_{00}}{2P^*} e^{-\frac{V^* - P^*}{2}t} - \frac{(V^* - P^*) x_0 + 2x_{00}}{2P^*} e^{-\frac{V^* + P^*}{2}t}, \quad (3.39)$$

де

$$P^* = \sqrt{(V^*)^2 - 4K_1^*}. \quad (3.40)$$

Отже, власні значення s_k ($k = 1, 2$) перетвореного за Лапласом рівняння (3.40) такі [87]:

$$s_1 = -\frac{V^* - P^*}{2}, \quad s_2 = -\frac{V^* + P^*}{2}. \quad (3.41)$$

Зробимо оцінку відношення k_s найбільшого за модулем власного значення s_2 до найменшого s_1 (в роботі [102] це відношення називається коефіцієнтом обумовленості, а в роботі [72] — сталою Ліпшіца)

$$k_s = \frac{s_2}{s_1} = \frac{V^* + P^*}{V^* - P^*}. \quad (3.42)$$

Аналіз рівнянь та співвідношень (3.32)—(3.37), (3.40) та (3.42) з урахуванням фізичного та математичного сенсу сталих k_1 , K_1^* , v^* , V^* та P^* дозволяє встановити, що

$$(P + V) \gg (P - V), \quad (3.43)$$

а це означає, що [87]

$$k_s \gg 1. \quad (3.44)$$

Вираз же (3.44) є необхідною та достатньою умовою того, що диференціальне рівняння (3.38) є жорстким і не може бути розв'язане звичайними вищезгаданими чисельними методами [72, 102].

Зрозуміло, що аналіз інших форм запису рівняння (3.32), які забезпечуються іншими значеннями індексу l (2 або 3), не може бути виконаний таким же чином, як і для випадку $l = 1$, через те, що в разі застосування перетворення Лапласа до доданка моделі $G_2^*(t)x(t)$ отримаємо інтеграл згортки від зображень функцій $G_2^*(t)$ та $x(t)$. А це не дасть змоги отримати розв'язок у такому зручному вигляді, як (3.39). Для моделі ж (3.32), (3.36) перетворення за Лапласом від функції $G_3^*(t)$ взагалі не існує, оскільки інтеграл від останньої по t відноситься до

таких, що не беруться в аналітичному вигляді. Однак, враховуючи деяку аналогію, яка існує між виразами (3.34)—(3.36), а також однакові області визначення функцій $G_l^*(t)$, що диктується фізичним сенсом моделі (3.32)—(3.37), можна вважати, що диференціальне рівняння (3.32) є жорстким за всіх значень $l = 1, 2, 3$.

3.2.2 Побудова чисельного алгоритму розв'язання задачі

Побудуємо алгоритм, доведемо його збіжність та виведемо умови, виконання яких дозволило б отримати за ним коректний з математичної та фізичної точок зору розв'язок рівняння (3.32), (3.33) для різних виразів (3.34)—(3.36) на будь-якому інтервалі часу $[0, T]$ після надходження до річки скидів та стоків ступінчастого характеру.

Зазначимо, що ступінчастим впливом рівня A_x змінної $x(t)$, котра надходить на вхід деякої системи, прийнято називати такий вплив, який спричиняє миттєве збільшення змінної $x(t)$ на вході системи в момент t на A_x . Причому, реакція незбудженої до цього системи на цей вплив називається або перехідною характеристикою, або кривою розгону [30, 81, 95, 117, 118, 147].

Аналіз усіх алгоритмів, які пропонуються в роботах [72, 102] для розв'язання будь-яких жорстких диференціальних рівнянь, дав можливість встановити, що для розв'язання більшості з існуючих жорстких рівнянь можна використовувати стандартні існуючі методи, які застосовуються для розв'язання звичайних диференціальних рівнянь, але не менше, ніж з двома модифікаціями [87]:

- а) використанням змінного кроку інтегрування;
- б) застосуванням неявних різницьових схем.

Застосуємо такий підхід до розв’язання рівняння (3.32). За основу візьмемо звичайний ітераційний метод кінцевих різниць [28, 69, 81, 135].

Отже, для перетворення неперервного диференціального рівняння (3.32) для неперервної змінної $x(t)$ ($t = [0, T]$) в різницеve рівняння для решітчастої змінної $x[n]$ (n — порядковий номер: $n = 1, 2, \dots, N$; N — кількість значень змінної x , які розраховуються) використовуємо змінний крок інтегрування, тобто крок, значення якого залежить від номеру n . В якості такої залежності можна використати, наприклад, функцію квадратного кореня, значення якої зі збільшенням значень n спочатку швидко збільшуються, а потім це збільшення суттєво уповільнюється:

$$h_n = \sqrt{n \cdot \Delta h} > 0, \quad n = \overline{1, N}, \quad (3.45)$$

де h_n — значення n -го кроку інтегрування;

Δh — елементарний крок інтегрування.

Функція (3.45) відповідає нашим вимогам тоді, коли швидке збільшення значення h_n припадає на “знаходження” значень $x[n]$ в так званому прикордонному шарі [102], і похибка не накопичується, а коли значення $x[n]$ “виходять” з цієї області і вимоги до значення кроку h_n стають більш м’якими, то досить і порівняно невеликого збільшення значення кроку h_n .

Робимо друге ускладнення алгоритму — використовуємо ліві (неявні) різницеvі формули (зі змінним кроком інтегрування) [28, 69, 81, 135]

$$\frac{dx(t)}{dt} \cong \nabla x[n] = \frac{x[n] - x[n-1]}{h_n}, \quad n = \overline{1, N}, \quad (3.46)$$

$$\begin{aligned}\nabla^2 x[n] &= \frac{\frac{x[n] - x[n-1]}{h_n} - \frac{x[n-1] - x[n-2]}{h_{n-1}}}{\frac{h_{n-1} + h_n}{2}} = \\ &= \frac{2h_{n-1}x[n] - 2(h_{n-1} + h_n)x[n-1] + 2h_nx[n-2]}{h_{n-1} + h_n}.\end{aligned}\quad (3.47)$$

Підставляючи вирази (3.46) та (3.47) в (3.32) та замінюючи $x(t)$ на $x[n]$ (формально, треба було б замінювати $x(t)$ на $x[nh_n]$, але для скорочення запису символ “ h_n ” опускається), після перетворень отримуємо кінцевий вигляд співвідношень обчислювального алгоритму [87]:

$$x[n] = K_{1l}[n] x[n-1] - K_{2l}[n] x[n-2], \quad (3.48)$$

$$x[0] = x_0, \quad x[-1] = x_0 - h_1 x_{00}, \quad (3.49)$$

$$K_{1l}[n] = \frac{2h_{n-1} + h_{n-1}(h_{n-1} + h_n) V^* + 2h_n}{K_{VGl}[n]}, \quad (3.50)$$

$$K_{2l}[n] = \frac{2h_n}{K_{VGl}[n]}, \quad (3.51)$$

$$K_{VGl}[n] = 2h_{n-1} + h_{n-1}(h_{n-1} + h_n) V^* - h_{n-1}h_n(h_{n-1} + h_n) G_l^*[n], \quad (3.52)$$

$$h_n = \sqrt{n \cdot \Delta h} > 0, \quad n = \overline{1, N}. \quad (3.53)$$

3.2.3 Доведення збіжності обчислювального алгоритму для ступінчастого впливу

Доведемо, що алгоритм (3.48)—(3.53) є збіжним за початкових умов $x_0 = \text{const} > 0$, $x_{00} = 0$ або із (3.49)

$$x[0] = x[-1] = x_0 > 0, \quad (3.54)$$

які відповідають надходженню на водний об’єкт ступінчастого

впливу x_0 .

Теорема 1 [84].

Для того, щоб ряд значень $x[n]$ ($n = 1, 2, \dots, N$), який породжується алгоритмом (3.48)—(3.53) за початкових умов (3.54), був збіжним, необхідно і достатньо, щоб для нього виконувалася умова:

$$-1 < \Delta_{n-1} < \frac{2h_n + h_n(h_n + h_{n+1}) V^*}{2h_{n+1}}, \quad n = \overline{1, N}, \quad (3.55)$$

де

$$\Delta_n = \frac{x[n]}{x[n+1]} - 1, \quad n = \overline{0, N-1}, \quad (3.56)$$

або

$$\frac{x[n]}{x[n+1]} = 1 + \Delta_n, \quad n = \overline{0, N-1}. \quad (3.57)$$

Доведення. Доведемо необхідність виконання умови (3.55).

Спочатку виведемо вираз для відношення $x[n]/x[n+1]$ через значення $x[n-k]$ ($k = 1, 2, \dots, n$), використовуючи формулу (3.48), записану для значення $x[n+1]$, з якої знаходимо:

$$\frac{x[n+1]}{x[n]} = K_{1l}[n+1] - K_{2l}[n+1] \frac{x[n-1]}{x[n]}, \quad (3.58)$$

$$\frac{x[n]}{x[n+1]} = \frac{1}{K_{1l}[n+1] - K_{2l}[n+1] \frac{x[n-1]}{x[n]}}, \quad n = \overline{0, N-1}. \quad (3.59)$$

В формулах (3.34)—(3.36) введемо нові позначення:

$$F_1^*[n] = -G_1^*[n] = K_1^*, \quad (3.60)$$

$$F_2^*[n] = -G_2^*[n] = K_2^* \left(1 - e^{-k_1 n h_n} \right), \quad (3.61)$$

$$F_3^*[n] = -G_3^*[n] = K_3^* \left[1 - e^{-k_2 \left(1 - e^{-k_1 n h_n} \right) \cdot n h_n} \right], \quad n = \overline{1, N}, \quad (3.62)$$

де $F_l^*[n]$ — функція, яка чисельно дорівнює функції $G_l^*[n]$, взятій із оберненим знаком — для наочності ствердження того, що якщо функція $(-G_l^*[n])$ (тепер: $F_l^*[n]$) з $n = 1, 2, \dots, N$ є додатною, то й функція $K_{VGl}[n]$ (3.52) теж буде додатною. І це ствердження є справедливим, оскільки

$$F_l^*[n] > 0, \quad n = \overline{1, N} \quad (3.63)$$

через те, що $F_1^*[n] = K_1^* > 0$, а в формулах (3.61), (3.62) з $n = 1, 2, \dots, N$ вирази в дужках завжди більші за нуль, тому що $e^{-\alpha} < 1$ за будь-яких додатних значень α .

Підставляємо вирази (3.50) і (3.51) в рівняння (3.59)

$$\frac{x[n]}{x[n+1]} = \frac{K_{VGl}[n+1]}{2h_n + h_n(h_n + h_{n+1})V^* + 2h_{n+1} - 2h_{n+1} \frac{x[n-1]}{x[n]}}. \quad (3.64)$$

Підставляємо в рівняння (3.54) вираз (3.57), записаний для відношення $x[n-1]/x[n]$ ($n = 1, 2, \dots, N$) і після перетворень отримуємо

$$\frac{x[n]}{x[n+1]} = \frac{K_{VGl}[n+1]}{2h_n + h_n(h_n + h_{n+1})V^* - 2h_{n+1}\Delta_{n-1}}, \quad n = \overline{1, N}. \quad (3.65)$$

Використовуючи отримане співвідношення, доведемо необхідність виконання умови (3.56) через протилежне. Розглянемо чотири можливі варіанти:

$$\Delta_{n-1} = \frac{2h_n + h_n(h_n + h_{n+1})V^*}{2h_{n+1}}, \quad n = \overline{1, N}, \quad (3.66)$$

$$\Delta_{n-1} > \frac{2h_n + h_n(h_n + h_{n+1})V^*}{2h_{n+1}}, \quad n = \overline{1, N}, \quad (3.67)$$

$$\Delta_{n-1} = -1, \quad n = \overline{1, N}, \quad (3.68)$$

$$\Delta_{n-1} < -1, \quad n = \overline{1, N}. \quad (3.69)$$

Доведемо, що виконання умов (3.66)—(3.69) призведе до розбіжності алгоритму (3.48)—(3.53) та до значень $x[n]$ ($n = 1, 2, \dots, N$),

які не будуть мати фізичного сенсу.

Варіант 1. Виконується умова (3.66). Якщо підставити (3.66) в (3.65), то знаменник правої частини останнього перетвориться на нуль, а це еквівалентно тому, що значення $x[n]$ більше за $x[n+1]$ в нескінченну кількість разів (або ж $x[n+1]$ дорівнює нулю) за $n = 1, 2, \dots, N$. Отже зрозуміло, що у випадку моделювання зміни значень концентрації деякої хімічної речовини виконання умови (3.66) аналогічно миттєвому зменшенню початкової концентрації речовини до нуля, а це — ідеалізація, що не має нічого спільного з процесами, які відбуваються в річці і для опису яких будувалась математична модель (3.32)—(3.37).

Варіант 2. Виконується умова (3.67). Якщо вираз (3.67) підставити в (3.65), то зрозуміло, що в знаменнику виразу (3.65) буде від'ємне значення. А оскільки, як було доведено вище, значення $K_{VGI}[n]$ з $n = 1, 2, \dots, N$ — завжди додатне, то відношення $x[n]/x[n+1]$ буде від'ємним і ряд значень $x[n]$ буде знакозмінним, а не додатним (знакопостійним).

Варіант 3. Виконується умова (3.68). Підставляємо вираз (3.68) в (3.57)

$$\frac{x[n]}{x[n+1]} = 0, \quad (3.70)$$

а це у випадку моделювання зміни значень концентрації деякої хімічної речовини в разі $x[0] > 0$ еквівалентно миттєвому збільшенню концентрації речовини до нескінченності ($n = 1$). Звичайно, це є ідеалізація, яка, як і в першому варіанті, не має нічого спільного з процесами в річці.

Варіант 4. Виконується умова (3.69). Якщо значення Δ_{n-1} буде меншим за (-1) , то з формули (3.57) зрозуміло, що, як і в другому

варіанті, за $n = 1, 2, \dots, N$ відношення $x[n]/x[n+1]$ завжди буде від'ємним і ряд значень $x[n]$ буде знакозмінним, а не знакопостійним додатним.

Отже, виконання будь-якої з умов (3.66)—(3.69) приводить до отримання розв'язку рівнянь (3.32)—(3.37), некоректного з математичної або фізичної точки зору, що говорить про необхідність виконання умови (3.54) під час отримання цього розв'язку у вигляді значень $x[n]$ ($n = 1, 2, \dots, N$) за алгоритмом (3.48)—(3.53) за початкових умов (3.54).

Доведемо тепер достатність виконання умови (3.55). Для цього можна скористатись ознакою збіжності Даламбера, яка, однак, може застосовуватись лише до додатних рядів.

Для доведення додатності ряду $x[n]$ ($n = 1, 2, \dots, N$) скористаємося принципом математичної індукції. Отже, спочатку доведемо, що додатним буде значення $x[1]$. Із (3.57) маємо

$$x[n+1] = \frac{x[n]}{1 + \Delta_n}, \quad n = \overline{0, N-1}, \quad (3.71)$$

а для $n = 0$

$$x[1] = \frac{x[0]}{1 + \Delta_0}. \quad (3.72)$$

Тепер в нерівності (3.55) для випадку $n = 1$ до значення Δ_0 додамо одиницю, запишемо цю нерівність для зворотного значення $1/(1+\Delta_0)$ (враховуючи, що при цьому всі знаки “<” зміняться на протилежні “>”, а оберненим значенням для нуля є нескінченність ∞) і помножимо все це на значення $x[0]$, яке, як видно з (3.54), завжди є додатним. Після перетворень отримуємо

$$\infty > \frac{x[0]}{1 + \Delta_0} > \frac{2h_2 x[0]}{(2 + h_1 V^*) (h_1 + h_2)}. \quad (3.73)$$

З порівняння формул (3.72) та (3.73), а також з того, що вирази $(2+h_1V^*)$ та (h_1+h_2) також, як і значення $2h_2$, більші за нуль, впливає, що значення $x[1]$ завжди є додатним.

Аналогічно доводиться додатність значення $x[n+1]$ за умови, що $x[n] > 0$. Приводимо вираз (3.55), записаний для Δ_n , до вигляду (3.73)

$$\infty > \frac{x[n]}{1 + \Delta_n} > \frac{2h_{n+2}x[n]}{(2 + h_{n+1}V^*)(h_{n+1} + h_{n+2})}, \quad n = \overline{0, N-1}. \quad (3.74)$$

З порівняння формул (3.71) та (3.74), а також з того, що $(2+h_{n+2}V^*) > 0$ за будь-яких $n = 0, 1, \dots, N$ та при використанні для функції h_n виразу (3.53), стає зрозумілим, що в разі $x[n] > 0$ значення $x[n+1]$ теж завжди є додатним. А тому, за принципом математичної індукції, в разі виконання умови (3.55) справедливим є й додатність усіх значень ряду $x[n]$ ($n = 1, 2, \dots, N$). Отже, для доведення його збіжності можна використовувати ознаку Даламбера, згідно з якою деякий додатний ряд точно є збіжним, якщо виконується умова [63, 102]

$$\left(\exists K_{\lim} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x[n+1]}{x[n]} \right) < 1, \quad (3.75)$$

де позначка “ $\exists$ ” означає існування границі.

Для знаходження $K_{\lim}$ перепишемо вираз (3.75) у вигляді

$$\frac{x[n+1]}{x[n]} = \frac{2h_n + h_n(h_n + h_{n+1})V^* - 2h_{n+1}\Delta_{n-1}}{K_{VGl}[n+1]}. \quad (3.76)$$

Для виконання подальших розрахунків перетворимо умову-нерівність (3.55) в рівність

$$\Delta_{n-1} = \frac{2h_n + h_n(h_n + h_{n+1})V^*}{2h_{n+1}} - \gamma, \quad n = \overline{1, N}, \quad (3.77)$$

де γ — константа, яка набуває таких значень

$$0 < \gamma < \frac{2h_n + h_n(h_n + h_{n+1}) V^*}{2h_{n+1}} + 1 = \frac{(2 + h_n V^*)(h_n + h_{n+1})}{2h_{n+1}}, \quad (3.78)$$

$$n = \overline{1, N}.$$

Отже, підставляючи співвідношення (3.76) та (3.77) в (3.75) (з урахуванням (3.50) та заміни $(-G_l^*[n])$ на $F_l^*[n]$), отримуємо

$$\begin{aligned} K_{\lim} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x[n+1]}{x[n]} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2h_{n+1}\gamma}{K_{VG_l}[n+1]} = \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2h_{n+1}\gamma}{2h_n + h_n(h_n + h_{n+1}) V^* + h_n h_{n+1}(h_n + h_{n+1}) F_l^*[n+1]}. \end{aligned} \quad (3.79)$$

Підставимо у вираз (3.79) функцію (3.53), яка задає залежність кроку інтегрування h_n від n , і знайдемо значення границі $K_{\lim}$ в разі $n \rightarrow \infty$, враховуючи те, що

$$\lim_{n \rightarrow \infty} F_l^*[n] = \frac{k_l}{D} = K_l^*, \quad l = 1 \vee 2 \vee 3, \quad (3.80)$$

(це є зрозумілим з формул (3.60)—(3.)). Отже

$$\begin{aligned} K_{\lim} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2\sqrt{(n+1)\Delta h} \gamma}{2\sqrt{n\Delta h} + \sqrt{n\Delta h}\sqrt{\Delta h} (\sqrt{n} + \sqrt{n+1}) V^* + \Delta h\sqrt{n(n+1)\Delta h} (\sqrt{n} + \sqrt{n+1}) F_l^*[n+1]} = \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\frac{2\gamma}{\sqrt{n}(\sqrt{n} + \sqrt{n+1})}}{\frac{2}{\sqrt{n+1}(\sqrt{n} + \sqrt{n+1})} + \sqrt{\frac{\Delta h}{n+1}} V^* + \Delta h F_l^*[n+1]} = \frac{0}{0+0+\Delta h K_l^*} = 0 < 1. \end{aligned} \quad (3.81)$$

Той факт, що границя $K_{\lim}$ в разі $n \rightarrow \infty$ дорівнює нулю, який є меншим за одиницю, говорить про те, що алгоритм (3.48)—(3.53) в разі виконання умов теореми 1 є збіжним. Отже, теорема 1 доведена.

Однак нагадаємо, що ознака Даламбера застосовується для доведення збіжності рядів у нескінченності. Наша ж послідовність значень $x[n]$ ($n = 1, 2, \dots, N$) є кінцевою і нас, зокрема, не влаштовує

випадок, коли в разі $n \rightarrow \infty$ ряд збігається, а на інтервалі $n = 1, 2, \dots, N$ — розбігається, тобто значення $x[n]$ — збільшуються. Нагадаємо, що розроблена математична модель (3.32)—(3.37) коректно описує тільки постійне зменшення значень показників якості річкової води. І саме така ситуація має місце, коли значення Δ_{n-1} одночасно буде більше за (-1) , але менше за нуль, оскільки, як це випливає з формули (3.57), $x[n+1] > x[n]$, а отже й ряд значень $x[n]$ за $0 < n \leq N$ буде розбігатись. Щоб виключити такий варіант, треба в теоремі 1 замінити умову (3.55) більш строгою умовою.

Теорема 2 [84].

Якщо для відрізка ряду $x[n]$ ($n = 1, 2, \dots, N$), який породжується алгоритмом (3.48)—(3.53) за початкових умов (3.53), виконується умова

$$0 < \Delta_{n-1} < \frac{2h_n + h_n(h_n + h_{n+1}) V^*}{2h_{n+1}}, \quad n = \overline{1, N}, \quad (3.82)$$

тоді:

- 1) *цей ряд є збіжним і в разі $n \rightarrow \infty$ значення $x[n] \rightarrow 0$;*
- 2) *для всіх значень $x[n]$ виконується співвідношення*

$$x[n] > x[n+1], \quad n = \overline{0, N-1}. \quad (3.83)$$

Доведення. Через те, що умова (3.82) є більш строгою умовою (3.28), справедливості твердження про те, що ряд значень $x[n]$ ($n = 1, 2, \dots$) є збіжним і в разі $n \rightarrow \infty$ значення $x[n] \rightarrow 0$, випливає безпосередньо з теореми 1.

Доведемо лише справедливості другого твердження — справедливості співвідношення (3.83). Для цього спочатку перетворимо умову-нерівність (3.82) в рівність, аналогічну з рівності (3.78)

$$\Delta_{n-1} = \frac{2h_n + h_n(h_n + h_{n+1}) V^*}{2h_{n+1}} - \gamma_1, \quad n = \overline{1, N}, \quad (3.84)$$

де γ_1 — константа, яка приймає значення

$$0 < \gamma_1 < \frac{2h_n + h_n(h_n + h_{n+1}) V^*}{2h_{n+1}}, \quad n = \overline{1, N}. \quad (3.85)$$

Перепишемо умову (3.83) таким чином

$$\frac{x[n+1]}{x[n]} < 1, \quad n = \overline{0, N-1}. \quad (3.86)$$

Підставляємо в (3.86) вираз з (3.82), з урахуванням (3.84)

$$\frac{x[n+1]}{x[n]} = \frac{2h_{n+1}\gamma_1}{2h_n + h_n(h_n + h_{n+1}) V^* + h_n h_{n+1}(h_n + h_{n+1}) F_l^*[n+1]} < 1, \quad n = \overline{0, N-1}. \quad (3.87)$$

Перевіримо виконання умови (3.87), враховуючи умову (3.85):

- 1) якщо нижня границя $\gamma_1 = 0$, то умова виконується ($0 < 1$);
- 2) якщо верхня границя

$$\frac{2h_n + h_n(h_n + h_{n+1}) V^*}{2h_n + h_n(h_n + h_{n+1}) V^* + h_n h_{n+1}(h_n + h_{n+1}) F_l^*[n+1]} < 1, \quad n = \overline{0, N-1}, \quad (3.88)$$

то умова (3.88) виконується, якщо справедлива умова

$$h_n h_{n+1}(h_n + h_{n+1}) F_l^*[n+1] > 0, \quad n = \overline{0, N-1}. \quad (3.89)$$

Ця умова — справедлива, бо виконується умова (3.63), та через те, що крок інтегрування h_n за будь-яких значень n — додатний.

Підставляючи в (3.87) будь-які інші значення γ_1 , що знаходяться між граничними значеннями (3.85), легко пересвідчитись, що умова (3.87) завжди виконується, а тому справедливе й співвідношення (3.83).

Отже, теорема 2 доведена, тобто за виконання умови (3.82)

розв'язок рівнянь моделі (3.32)—(3.37), отриманий за алгоритмом (3.48)—(3.53), буде коректним як з математичної, так і з фізичної точок зору.

Тепер, коли виведено та доведено всі необхідні й достатні умови збіжності алгоритму (3.48)—(3.53), суть яких зосереджується в нерівності (3.82), з'являється питання, яким саме чином можна перевірити справедливість цих умов для рівнянь моделі (3.32)—(3.37) з конкретними числовими коефіцієнтами.

Це можна зробити двома способами [87]:

1. Безпосередньо підставляючи в (3.82) конкретні числові значення величин, можна перевірити виконання цієї нерівності для усіх значень $n = 1, 2, \dots, N$. Зрозуміло, що цей спосіб є найточнішим з тих, які можна запропонувати, але розрахунки за ним є найбільш трудомісткими.

2. Знайти такі значення n , для яких різниці між значеннями Δ_{n-1} та нижньою границею умови (3.82), а також значеннями верхньої границі та Δ_{n-1} будуть найменші, і перевірити чи будуть ці різниці більші за нуль. Зрозуміло, що для цього спочатку треба розробити спеціальний математичний апарат. В основі цього апарата повинні лежати розрахунки та порівняння похідних від складових умови (3.82), які, в свою чергу, залежать від похідних функцій Δ_n , h_n та $F_l^*[n]$ тощо.

Звичайно, другий спосіб порівняно з першим є набагато привабливішим теоретично, оскільки трудомісткість розрахунків за ним менша, хоча меншою є й їх точність через проведення додаткових обчислень. Перший же спосіб порівняно з другим є привабливішим практично, через більшу наочність та простоту. Причому, тривалість розрахунків не є критичною для моделювання зміни значень показників

якості річкових вод, оскільки їх динаміка є дуже уповільненою, а проміжок між збиранням та визначенням необхідних для розрахунків даних — досить великим (від декількох годин до декількох діб). Тим більше, що на даний час, завдяки використанню сучасної досить потужної обчислювальної техніки, трудомісткість розрахунків вже не є суттєвим обмеженням на використання того чи іншого методу.

Отже, перевіривши збіжність обчислювального алгоритму (3.48)—(3.53) першим способом, можна отримати за ним розв’язок рівнянь (3.32)—(3.37), який є коректним не тільки з математичної, а й з фізичної точок зору, і дійсно відтворює динаміку зміни значень показника якості річкової води $x(t)$, котрий моделюється.

3.3 Спрощення алгоритму розв’язання рівнянь

Побудова моделей на основі G-функцій (2.6)—(2.8), що являють собою вкладені експоненціальні функції, вносить додаткові труднощі в розв’язання рівнянь цих моделей, їх ідентифікацію та використання на практиці.

Зокрема, використання трансцендентних функцій (3.2)—(3.4) в подальших обчисленнях на етапі ідентифікації моделей вносить деякі незручності. Цих проблем можна було б або позбутися (для однопараметрової моделі), або хоча б їх зменшити. Для цього пропонуємо застосовувати розроблені моделі не для значень показників якості води $x(t)$, а для логарифмів їх відносних значень:

$$\bar{x}(t) = \frac{\ln(x(t))}{x_0}. \quad (3.90)$$

Застосування операції логарифмування є коректним, оскільки

значення $x(t)$ завжди є невід'ємними.

В цьому випадку вирази (3.2)–(3.4) набудуть простішого вигляду:

$$-l = 1$$

$$\bar{x}(t) = -k_1 t, \quad \bar{x}(t) = -k_1 t, \quad (3.91)$$

$$-l = 2$$

$$\bar{x}(t) = -\frac{k_2}{k_1} \left[e^{-k_1 t} + k_1 t - 1 \right], \quad (3.92)$$

$$-l = 3$$

$$\bar{x}(t) = -k_3 \cdot \left\{ t - \int_0^t e^{-k_2(1-e^{-k_1 q})} dq \right\}. \quad (3.93)$$

Слід зауважити, що змінна $\bar{x}(t)$ є суто проміжною. Після обчислень за моделями (3.91)–(3.93) треба робити обернене перетворення:

$$x(t) = x_0 \cdot e^{\bar{x}(t)}. \quad (3.94)$$

Зрозуміло, що змінна $\bar{x}(t)$ завжди буде від'ємною.

3.4 Висновки

Здійснено аналіз та розроблено алгоритми розв'язання рівнянь моделей першого та другого порядків.

Для моделі першого порядку:

- записано розв'язки рівнянь;
- приведено приклади розв'язків;
- проаналізовано особливості рівнянь за допомогою розкладання їх в ряд Маклорена;
- запропоновано спосіб спрощення рівнянь моделі з метою

полегшення подальших розрахунків за ними.

Для моделі другого порядку:

- встановлено основні труднощі, які виникають під час спроб розв'язати її рівняння відомими аналітичними та чисельними методами, зокрема, встановлено, що ці рівняння є жорсткими;

- запропоновано новий чисельний алгоритм розв'язання рівнянь, який дозволяє подолати встановлені труднощі;

- виведено та доведено умови збіжності запропонованого чисельного алгоритму та умови отримання розв'язків, коректних не тільки з математичної, а й з фізичної точки зору, в разі моделювання реакції річкової системи на надходження до неї природних стоків чи стічних вод ступінчастого характеру;

- викладено та обгрунтовано методику перевірки умов збіжності запропонованого чисельного алгоритму, яку рекомендується використовувати на практиці.

РОЗДІЛ 4

ІДЕНТИФІКАЦІЯ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ

4.1 Ідентифікація математичної моделі першого порядку

4.1.1 Основні етапи алгоритму ідентифікації математичної моделі першого порядку

Побудуємо алгоритм ідентифікації моделі першого порядку (2.4), (2.5) для різних виразів (2.6)—(2.8) на будь-якому інтервалі часу $[0, T]$ в разі надходження до річки скидів та стоків ступінчастого характеру.

Відразу зазначимо, що процедуру ідентифікації математичних моделей слід застосовувати до кожної елементарної ділянки річки окремо. Отже, розглянемо узагальнену методику ідентифікації для будь-якої i -ої ділянки річки ($i = 1, 2, \dots, N_d$).

Як видно з рівнянь (2.4)—(2.8), до параметрів моделі першого порядку належать лише k -коефіцієнти: k_1 , k_2 та k_3 . Зрозуміло, що структура та кількість параметрів моделі (2.4) визначається структурою та кількістю параметрів функції $G(t)$. Тому, кількість параметрів, які мають бути ідентифіковані, становить від одного (k_1 для моделі (2.4)—(2.6)) до трьох (k_1 , k_2 , k_3 для моделі (2.4), (2.5), (2.8)). Є ще параметр масштабування в часі m_t , але він обчислюється окремо від k -коефіцієнтів.

Алгоритм ідентифікації моделі складається з трьох етапів:

Етап 1. Визначення початкової умови $x(0)$ та коефіцієнта масштабування m_t . Перехід до умовних одиниць.

Етап 2. Визначення параметрів моделі (2.4) для усіх трьох видів

функцій $G_i(t)$ (2.6)—(2.8).

Етап 3. Визначення структури (одно-, дво- чи трипараметрова) кінцевої математичної моделі першого порядку.

Розглянемо більш детально кожен з цих етапів.

4.1.2 Визначення початкової умови та проведення масштабування математичної моделі першого порядку

На цьому етапі (етапі 1) виконується наступне:

1. Встановлення значення початкової умови (2.5). На кожній елементарній ділянці в якості початкової умови $x(0)$ вибирається значення показника якості води в нульовому створі цієї ділянки

$$x(0) = \hat{x}_0. \quad (4.1)$$

2. Визначення коефіцієнта масштабування в часі m_t .

Необхідність введення в математичні моделі першого порядку коефіцієнта масштабування в часі m_t можна пояснити таким чином: на практиці довжина елементарних ділянок може бути досить значною, а течія річки досить повільною, отже, загальний час T_i добігання води річки від нульового створу до кінцевого, особливо виражений в секундах, може набувати великих значень (тисяч і більше). Підстановка окремих часових значень Δ_j в вирази (2.5)—(2.7) через наявність в них експонент від цих значень $(-\Delta_j)$ призведе до появи дуже малих чисел, незручних для обчислень (наприклад, $e^{-30} = 9,4 \cdot 10^{-14}$).

Отже, нехай має місце співвідношення

$$\tilde{t} = m_t t, \quad (4.2)$$

де $\tilde{t}$ — реальний час протікання процесу³⁾;

t — умовний час моделювання.

Зрозуміло, що коефіцієнт масштабування повинен розраховуватись із співвідношення

$$m_t = \frac{\tilde{T}}{T}, \quad (4.3)$$

де $\tilde{T}$ — період часу, за який аналізуються процеси, що протікають в річці (в справжніх одиницях часу СІ);

T — період моделювання процесу (в умовних одиницях часу).

Запишемо модель (2.4)—(2.8) для часу $\tilde{t} = [0, \tilde{T}]$

$$\frac{dx(\tilde{t})}{d\tilde{t}} = \tilde{G}_l(\tilde{t}) x(\tilde{t}), \quad x(0) = x_0, \quad l = 1 \vee 2 \vee 3, \quad (4.4)$$

$$\tilde{G}_1(\tilde{t}) = -\tilde{k}_1, \quad (4.5)$$

$$\tilde{G}_2(\tilde{t}) = -\tilde{k}_2 \left(1 - e^{-\tilde{k}_1 \tilde{t}} \right), \quad (4.6)$$

$$\tilde{G}_3(\tilde{t}) = -\tilde{k}_3 \left[1 - e^{-\tilde{k}_2 \left(1 - e^{-\tilde{k}_1 \tilde{t}} \right) \cdot \tilde{t}} \right], \quad (4.7)$$

де фізичний та математичний сенс усіх змінних аналогічний змінним моделі (2.4)—(2.8), але позначка над ними “ $\sim$ ” підкреслює, що вони відносяться до моделі, записаної в одиницях часу $\tilde{t}$.

Виведемо співвідношення між k -коефіцієнтами моделі (2.4)—(2.8) та відповідними параметрами моделі (4.4)—(4.7).

Підставляємо вираз (4.2) в рівняння (4.4)

³⁾ Загально прийнято реальні величини позначати просто літерами, а їх умовні аналоги — літерами з якимись позначками. Однак через те, що метою, яка поставлена в книзі, є не стільки побудова моделі динаміки протікання реальних процесів, скільки її використання для математичного моделювання та прогнозування розвитку цієї динаміки, в формулі (4.2) і нижче простою літерою позначаються величини в умовних одиницях моделі, а величинами з хвилястою лінією ці ж величини в справжніх одиницях СІ.

$$\frac{dx(m_t t)}{m_t dt} = \tilde{G}_l(m_t t) x(m_t t), \quad x(0) = x_0, \quad l = 1 \vee 2 \vee 3, \quad (4.8)$$

або

$$\frac{dx(m_t t)}{dt} = m_t \cdot \tilde{G}_l(m_t t) x(m_t t), \quad x(0) = x_0, \quad l = 1 \vee 2 \vee 3, \quad (4.9)$$

де

$$\tilde{G}_1(m_t t) = -\tilde{k}_1, \quad (4.10)$$

$$\tilde{G}_2(m_t t) = -\tilde{k}_2 \left(1 - e^{-\tilde{k}_1 m_t t} \right), \quad (4.11)$$

$$\tilde{G}_3(m_t t) = -\tilde{k}_3 \left[1 - e^{-\tilde{k}_2 \left(1 - e^{-\tilde{k}_1 m_t t} \right) m_t t} \right]. \quad (4.12)$$

Порівнюючи рівняння моделі (2.4)—(2.8) та моделі (4.4)—(4.7) легко зрозуміти, що між їх відповідними k -коефіцієнтами є чіткий зв'язок, який визначається з рівнянь (4.8)—(4.12), (4.2). Оскільки, знаходження значень k -коефіцієнтів проводиться саме для умовних величин k , то є доцільним виразити справжні $\tilde{k}$ -коефіцієнти через умовні. Із (4.2), (4.8)—(4.12) видно, що між будь-якими $\tilde{k}$ -параметрами і відповідними k -параметрами існує такий зв'язок:

$$\tilde{k}_j = \frac{k_j}{m_t}, \quad j = \overline{1, l}, \quad l = 1 \vee 2 \vee 3. \quad (4.13)$$

3. Перехід до умовних одиниць.

Всі величини, які використовуються під час моделювання і залежать від часу, слід переводити до умовних одиниць. До таких величин належать, наприклад: швидкість течії річки v (м/с), витрати річкової води Q та витрати стоків q (м³/с) тощо. Переведення цих величин в умовні одиниці часу здійснюється шляхом ділення реальних значень на величину m_t так, як це зроблено в (4.13).

4.1.3 Визначення параметрів моделі першого порядку

Як було зазначено вище, на етапі 2 здійснюється визначення параметрів моделі першого порядку (2.4), (2.5) для усіх трьох видів функцій $G(t)$ (2.6)—(2.8). Найпоширенішим методом визначення параметрів є метод найменших квадратів (МНК) [20, 28, 69, 81, 95, 135], який ми і використаємо.

МНК дозволяє апроксимувати будь-який набір експериментальних даних функцією заданого виду, тобто визначити її параметри. Особливість цього методу полягає в тому, що до кривої, яка апроксимується, не ставляться вимоги щодо точності проходження через всі задані точки. Цю криву намагаються апроксимувати так, щоб її відхилення від заданих даних в якомусь сенсі були мінімальними. В методі найменших квадратів критерієм цього є мінімум суми квадратів різниць між значеннями функції, які визначаються вибраною кривою, та відповідними експериментальними значеннями [28, 69, 81, 95, 135].

Зрозуміло, що в якості функцій, параметри яких повинні визначатись, виступають функції розв'язків (3.2)—(3.4) моделі першого порядку (2.4)—(2.8).

У відповідності з МНК, визначення параметрів моделей (3.2)—(3.4) виконується за такою методикою (індекси i та k , які вказують на належність рівнянь до i -ї ділянки річки та запис їх для k -го показника якості річкової води, відповідно, поки що опускаємо) [28, 69, 81, 95, 135]:

Визначається похибка ϵ_{jl} між експериментальними даними $\hat{x}_j$ та значеннями $x(\Delta_j)$, розрахованими за моделлю в кожному j -ому створі вимірювань

$$\varepsilon_{jl} = \hat{x}(\Delta_j) - F_l(K, \Delta_j), \quad j = \overline{0, N-1}, \quad (4.14)$$

де, щоб підкреслити від яких саме величин залежать значення функції x , замість $x(\Delta_j)$ використана функція $F_l(K, \Delta_j)$, в якій K — це вектор k -параметрів моделі, значення яких знаходяться; кількість елементів вектора K може дорівнювати 1—3, наприклад, для 3-х параметрів ($l = 3$) $K = [k_1 \ k_2 \ k_3]$).

Як видно з (4.14), визначення параметрів моделі проводиться по вимірах $\hat{x}(\Delta_0), \hat{x}(\Delta_1), \dots, \hat{x}(\Delta_{N-1})$. Вимір же $\hat{x}(\Delta_N)$ не використовується — він буде використаний пізніше, під час визначення структури моделі.

Критерій ідентифікації — сума квадратів похибок $E_l(K)$ — визначається виразом:

$$E_l(K) = \sum_{j=0}^{N-1} [\hat{x}(\Delta_j) - F_l(K, \Delta_j)]^2. \quad (4.15)$$

Оскільки умова мінімуму $E_l(K)$ визначається рівняннями (для $l = 3$)

$$\frac{\partial E_l(K)}{\partial k_1} = 0, \quad \frac{\partial E_l(K)}{\partial k_2} = 0, \quad \frac{\partial E_l(K)}{\partial k_3} = 0, \quad (4.16)$$

то, підставляючи вирази (4.15) в (4.16), після відповідних спрощень отримаємо таку систему рівнянь:

$$\begin{cases} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\partial F_l(K, \Delta_j)}{\partial k_1} [\hat{x}(\Delta_j) - F_l(K, \Delta_j)] = 0, \\ \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\partial F_l(K, \Delta_j)}{\partial k_2} [\hat{x}(\Delta_j) - F_l(K, \Delta_j)] = 0, \\ \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\partial F_l(K, \Delta_j)}{\partial k_3} [\hat{x}(\Delta_j) - F_l(K, \Delta_j)] = 0, \end{cases} \quad (4.17)$$

яка однозначно розв'язується відносно змінних k_1 , k_2 та k_3 , котрі в даному випадку будуть оптимальними за критерієм мінімуму суми квадратів похибок (4.15).

Зрозуміло, що в разі визначення параметрів рівняння (2.4) з $l = 1$ та 2 з системи рівнянь (4.17) вилучаються друге — третє рівняння та лише третє, відповідно.

Розглянемо деякі аспекти ідентифікації моделі першого порядку з конкретними значеннями індексу l .

1. Визначення параметрів моделі першого порядку з $l = 1$ (рівняння (2.4)—(2.6)).

У відповідності з виразами (4.15)—(4.17) записуємо (індекс l в функціях E та F опускаємо, вважаючи, що $l = 1$):

критерій ідентифікації

$$E(k_1) = \sum_{j=0}^{N-1} [\hat{x}(\Delta_j) - F(k_1, \Delta_j)]^2, \quad (4.18)$$

умова мінімуму критерію

$$\frac{\partial E(k_1)}{\partial k_1} = 0, \quad (4.19)$$

частинна похідна (в неперервному часі t) від виразу (3.2)

$$\frac{\partial F(k_1, t)}{\partial k_1} = -x_0 \cdot t e^{-k_1 t}, \quad (4.20)$$

рівняння, яке повинне бути розв'язане,

$$\sum_{j=0}^{N-1} \frac{\partial F(k_1, \Delta_j)}{\partial k_1} [\hat{x}(\Delta_j) - F(k_1, \Delta_j)] = 0 \quad (4.21)$$

або, після підстановки (2.20) в (2.21) та скорочення на $(-x_0)$,

$$\sum_{j=0}^{N-1} \Delta_j \cdot e^{-k_1 \Delta_j} \cdot [\hat{x}(\Delta_j) - x_0 \cdot e^{-k_1 \Delta_j}] = 0. \quad (4.22)$$

Формально розв'язком рівняння (4.22) є значення k_1 , яке забезпечує мінімум критерію ідентифікації (4.18) (легко пересвідчитись, що необхідна умова цього мінімуму — додатність другої похідної від функції $F(k_1, t)$ — завжди виконується для $t > 0$ та $k_1 \in [0, \infty)$). Однак спроби розв'язання рівняння (4.22) за реальних даних показали, що воно не має коректного розв'язку, за винятком граничних випадків:

— значення $\hat{x}_j$ не залежать від часу Δ_j і дорівнюють або деякій ненульовій константі (цьому відповідає тривіальний розв'язок $k_1 = 0$), або нулю (цьому відповідає $k_1 \rightarrow \infty$);

— послідовність значень $\hat{x}_j$ є класичною експонентою, тобто коли існує таке k_1 , що $E(k_1) = 0$.

Підкреслимо, саме “коректного”, оскільки якщо прямувати значення k_1 в нескінченність, то, незалежно від значення функції $E(k_1)$, яке для $k_1 > 0$ завжди є скінченним, ліва частина рівняння (4.22) буде прямувати до нуля разом з функцією $e^{-k_1 \Delta_j}$ в похідній від функції $F(k_1, \Delta_j)$.

Зрозуміло, що неможливість отримання коректного розв'язку рівняння (4.22) обумовлена, головним чином, його трансцендентністю. Виходом з такого становища є використання в рівнянні (4.22) “технічного нуля” $\zeta > 0$

$$\left| \sum_{j=0}^{N-1} \Delta_j \cdot e^{-k_1 \Delta_j} \cdot [\hat{x}(\Delta_j) - x_0 \cdot e^{-k_1 \Delta_j}] \right| = \zeta, \quad (4.23)$$

тобто числа достатнього для того, щоб рівняння (4.23) в загальному випадку мало коректний розв'язок, але в той же час і достатньо малого, щоб похибка, обумовлена відмінністю ζ від нуля, і спричинена цим відмінністю значення функції $E(k_1)$ від мінімального для обчисленого k_1 ,

була достатньо малою. Комп'ютерний аналіз показав, що значення ζ повинне знаходитись в інтервалі

$$10^{-4} \leq \zeta \leq 10^{-1}. \quad (4.24)$$

Отже, визначення параметрів моделі першого порядку для $l = 1$ полягає в розв'язанні рівняння (4.24) і знаходженні значення параметра k_1 , яке забезпечує псевдомінімальне значення функції похибки (4.18). До речі, в рівнянні (4.23) в якості нижньої границі індексу j можна брати одиницю, а не нуль, оскільки в разі $j = 0$, за визначенням,

$$F(k_1, 0) = x(0) = x_0 = \hat{x}(0), \quad (4.25)$$

що автоматично забезпечує рівність $E(k_1) = 0$ за будь-яких значень k_1 . Тож, для скорочення обчислень під час розв'язання задачі ідентифікації замість рівняння (4.23) слід використовувати рівняння

$$\left| \sum_{j=1}^{N-1} \Delta_j \cdot e^{-k_1 \Delta_j} \cdot [\hat{x}(\Delta_j) - x_0 \cdot e^{-k_1 \Delta_j}] \right| = \zeta. \quad (4.26)$$

2. Визначення параметрів моделі першого порядку з $l = 2$ (рівняння (2.4), (2.5), (2.7)).

За аналогією з виразами (4.18)—(4.22) для моделі першого порядку з $l = 1$ у відповідності з виразами (4.15)—(4.17) записуємо (індекси l в функціях E та F опускаємо, вважаючи, що $l = 2$):

критерій ідентифікації

$$E(k_1, k_2) = \sum_{j=0}^{N-1} [\hat{x}(\Delta_j) - F(k_1, k_2, \Delta_j)]^2, \quad (4.27)$$

умова мінімуму критерію

$$\frac{\partial E(k_1, k_2)}{\partial k_1} = 0, \quad \frac{\partial E(k_1, k_2)}{\partial k_2} = 0, \quad (4.28)$$

частинні похідні (в неперервному часі t)

$$\frac{\partial F(k_1, k_2, t)}{\partial k_1} = -x_0 \frac{k_2(1+k_1 t) \cdot e^{-k_1 t} - 1}{k_1^2} \cdot e^{-\frac{k_2}{k_1} [e^{-k_1 t} + k_1 t - 1]}, \quad (4.29)$$

$$\frac{\partial F(k_1, k_2, t)}{\partial k_2} = -x_0 \frac{e^{-k_1 t} + k_1 t - 1}{k_1} \cdot e^{-\frac{k_2}{k_1} [e^{-k_1 t} + k_1 t - 1]}, \quad (4.30)$$

система рівнянь, яка повинна бути розв'язана, по аналогії з (4.26),

$$\begin{cases} \left| \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\partial F(k_1, k_2, \Delta_j)}{\partial k_1} [\hat{x}(\Delta_j) - F(k_1, k_2, \Delta_j)] \right| = \zeta, \\ \left| \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\partial F(k_1, k_2, \Delta_j)}{\partial k_2} [\hat{x}(\Delta_j) - F(k_1, k_2, \Delta_j)] \right| = \zeta \end{cases} \quad (4.31)$$

або

$$\begin{cases} \left| \sum_{j=1}^{N-1} \left[\frac{k_2(1+k_1 \Delta_j) \cdot e^{-k_1 \Delta_j} - 1}{k_1^2} \cdot e^{-\frac{k_2}{k_1} [e^{-k_1 \Delta_j} + k_1 \Delta_j - 1]} \cdot \left(\hat{x}(\Delta_j) - x_0 \cdot e^{-\frac{k_2}{k_1} [e^{-k_1 \Delta_j} + k_1 \Delta_j - 1]} \right) \right] \right| = \zeta, \\ \left| \sum_{j=1}^{N-1} \left[\frac{e^{-k_1 \Delta_j} + k_1 \Delta_j - 1}{k_1} \cdot e^{-\frac{k_2}{k_1} [e^{-k_1 \Delta_j} + k_1 \Delta_j - 1]} \cdot \left(\hat{x}(\Delta_j) - x_0 \cdot e^{-\frac{k_2}{k_1} [e^{-k_1 \Delta_j} + k_1 \Delta_j - 1]} \right) \right] \right| = \zeta, \end{cases} \quad (4.32)$$

де ζ — деяка константа, аналогічна ζ в формулі (4.26).

3. Визначення параметрів моделі першого порядку з $l = 3$ (рівняння (2.4), (2.5), (2.8)).

Зрозуміло, що для цієї моделі безпосередньо підходять усі вирази (4.14)—(4.17). А система рівнянь, яка повинна бути розв'язана, за аналогією з (4.31), набуває вигляду:

$$\begin{cases}
\left| \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\partial F(k_1, k_2, k_3, \Delta_j)}{\partial k_1} [\hat{x}(\Delta_j) - F(k_1, k_2, k_3, \Delta_j)] \right| = \zeta, \\
\left| \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\partial F(k_1, k_2, k_3, \Delta_j)}{\partial k_2} [\hat{x}(\Delta_j) - F(k_1, k_2, k_3, \Delta_j)] \right| = \zeta, \\
\left| \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\partial F(k_1, k_2, k_3, \Delta_j)}{\partial k_3} [\hat{x}(\Delta_j) - F(k_1, k_2, k_3, \Delta_j)] \right| = \zeta
\end{cases} \quad (4.33)$$

або

$$\begin{cases}
\left| \sum_{j=1}^{N-1} \left[k_3 \left(\frac{\partial}{\partial k_1} \int_0^{\Delta_j} e^{-k_2(1-e^{-k_1 q})} dq \right) \cdot e^{-k_3 \left\{ \Delta_j - \int_0^{\Delta_j} e^{k_2(1-e^{-k_1 q})} dq \right\}} \right. \right. \\
\quad \cdot \left. \left. \left(\hat{x}(\Delta_j) - x_0 \cdot e^{-k_3 \left\{ \Delta_j - \int_0^{\Delta_j} e^{-k_2(1-e^{-k_1 q})} dq \right\}} \right) \right] \right| = \zeta, \\
\left| \sum_{j=1}^{N-1} \left[k_3 \left(\frac{\partial}{\partial k_2} \int_0^{\Delta_j} e^{-k_2(1-e^{-k_1 q})} dq \right) \cdot e^{-k_3 \left\{ \Delta_j - \int_0^{\Delta_j} e^{k_2(1-e^{-k_1 q})} dq \right\}} \right. \right. \\
\quad \cdot \left. \left. \left(\hat{x}(\Delta_j) - x_0 \cdot e^{-k_3 \left\{ \Delta_j - \int_0^{\Delta_j} e^{-k_2(1-e^{-k_1 q})} dq \right\}} \right) \right] \right| = \zeta, \\
\left| \sum_{j=1}^{N-1} \left[\left(\Delta_j - \int_0^{\Delta_j} e^{k_2(1-e^{-k_1 q})} dq \right) \cdot e^{-k_3 \left\{ \Delta_j - \int_0^{\Delta_j} e^{k_2(1-e^{-k_1 q})} dq \right\}} \right. \right. \\
\quad \cdot \left. \left. \left(\hat{x}(\Delta_j) - x_0 \cdot e^{-k_3 \left\{ \Delta_j - \int_0^{\Delta_j} e^{-k_2(1-e^{-k_1 q})} dq \right\}} \right) \right] \right| = \zeta,
\end{cases} \quad (4.34)$$

де ζ — деяка константа, аналогічна ζ в формулі (4.26).

4.1.4 Визначення структури моделі першого порядку

Як було зазначено вище, на етапі 3 здійснюється визначення структури моделі (2.4), тобто з'ясовується якого саме типу в них використовується функція $G_l(t)$ — з $l = 1, 2$ чи 3. Алгоритм цієї операції досить простий:

1) експериментальні значення $\hat{x}(\Delta_j)$ ($j = 0, 1, \dots, N$) порівнюються зі значеннями, розрахованими за ідентифікованою за параметрами моделлю $x(\Delta_j)$ для різних значень індексу l (1, 2 та 3);

2) за формулою (4.15), в якій замість $N-1$ береться N , підраховується загальна квадратична похибка $E_l(K)$ для різних значень індексу l (1, 2 та 3) (з урахуванням і значення $\hat{x}(\Delta_N)$ — "свіжа" точка);

3) оптимальною за структурою (та параметрами) визнається та математична модель, яка забезпечує найменшу загальну квадратичну похибку $E_{\min}$

$$E_{\min} = \min_l E_l(K). \quad (4.35)$$

Фактично цей метод визначення структури моделі, як і метод визначення її параметрів, теж використовує принцип найменших квадратів. Тільки в цьому випадку оптимальна модель визначається відразу, з простого порівняння.

Таким чином, за наведеними формулами та співвідношеннями можна побудувати математичну модель першого порядку динаміки якості річкової води, яка буде мати структуру та параметри, оптимальні за критерієм мінімуму суми квадратів похибок.

4.2 Ідентифікація математичної моделі другого порядку

4.2.1 Основні етапи алгоритму ідентифікації математичної моделі другого порядку

Побудуємо алгоритм ідентифікації моделі другого порядку (3.5), (3.6) із заданими початковими умовами x_0 та x_{00} для різних виразів (3.7)—(3.9) на будь-якому інтервалі часу $[0, T]$ під час надходження до річки скидів та стоків ступінчастого характеру.

Так, як і для моделі першого порядку, розглянемо узагальнену методику ідентифікації для будь-якої i -ої ділянки річки ($i = 1, 2, \dots, N_d$).

Як видно з рівнянь (3.5)—(3.9), до параметрів моделі належать параметр V^* та k -коефіцієнти, якими в найзагальнішому випадку ($l = 3$) є k_1 , k_2 та K_3^* . З метою зменшення числа параметрів коефіцієнт K_3^* з формули (3.10) замінює коефіцієнти k_3 і D . Зрозуміло, що структура та кількість параметрів моделі (3.5), (3.6) визначається структурою та кількістю параметрів функції $G_l(t)$. Тому, кількість параметрів, які мають бути ідентифіковані, становить від двох (V^* і K_1^* для моделі (3.5)—(3.7)) до чотирьох (V^* , k_1 , k_2 , K_3^* для моделі (3.5), (3.6), (3.9)).

Так, як і для моделі першого порядку, процедура ідентифікації моделі другого порядку містить три етапи:

Етап 1. Визначення початкових умов x_0 та x_{00} та коефіцієнта масштабування m_t та перехід до умовних одиниць часу.

Етап 2. Визначення параметрів моделі (3.5)—(3.9).

Етап 3. Визначення структури (два-, три- чи чотирипараметрова) кінцевої математичної моделі.

Розглянемо більш детально кожен з цих етапів, відзначаючи лише ті особливості, які є відмінними від алгоритму та методики ідентифікації математичної моделі першого порядку.

4.2.2 Визначення початкових умов та проведення масштабування математичної моделі другого порядку

На цьому етапі (етапі 1) виконується:

1. Встановлення значень початкових умов моделі (3.5), (3.6).

Як і для моделі першого порядку, на кожній елементарній ділянці в якості початкової умови $x(0)$ вибирається значення показника якості води в нульовому створі цієї ділянки:

$$x(0) = x_0 = \hat{x}_0. \quad (4.36)$$

Однак, на відміну від моделі першого порядку, для моделі другого порядку слід ще визначити початкову умову $\dot{x}(0) = x_{00}$. Для цього можна використати кінцево-різницеві співвідношення, подібні до (3.19). При цьому можна застосувати одну з таких методик:

1) використання правих різниць $\Delta \hat{x}$ (в даному випадку " Δ " — це оператор зсуву на одну позицію "вперед" [28, 69, 81, 135]):

$$\left[\frac{dx(t)}{dt} \right]_{t=0} = \Delta \hat{x}(0) = \frac{\hat{x}(\Delta_1) - \hat{x}(0)}{\Delta_1} = x_{00}, \quad (4.37)$$

однак такий спосіб знаходження початкової умови не відповідає алгоритму розв'язання рівнянь моделі другого порядку (3.21)—(3.26), отже, правильніше використовувати іншу методику;

2) використання лівих різниць $\nabla \hat{x}$, як в (3.19). При цьому, на першій елементарній ділянці ($i = 1$) перший створ вимірювань слід вважати (-1)-м, а не нульовим, а нульовим — другий створ вимірювань,

тобто замість нумерації $j = 0, 1, 2, \dots, N_1$ слід використовувати: $j = -1, 0, 1, \dots, N_1-1$. Для інших елементарних ділянок ($i = 2, 3, \dots, N_d$) такий зсув робити не треба, в них (-1) -м створом вимірювань будемо вважати передостанній створ попередньої елементарної ділянки, тобто $\hat{x}_i(\Delta_{-1}) = \hat{x}_{i-1}(\Delta_{N_{i-1}-1})$, в той час як $\hat{x}_i(\Delta_0) = \hat{x}_i(0) = \hat{x}_{i(0)} = \hat{x}_{i-1}(\Delta_{N_{i-1}}), \dots$. За зміненою таким чином нумерацією елементарних ділянок співвідношення (4.36) лишається справедливим. З урахуванням всього цього, замість співвідношення (4.37) слід застосовувати таке:

$$\left[\frac{dx(t)}{dt} \right]_{t=0} = \nabla \hat{x}(0) = \frac{\hat{x}(0) - \hat{x}(\Delta_{-1})}{\Delta_{-1}} = x_{00}. \quad (4.38)$$

2. Визначення коефіцієнта масштабування в часі m_t .

Окрім викладеного в пункті 4.1.2 обґрунтування щодо необхідності введення в математичні моделі коефіцієнта масштабування в часі m_t , можна додати ще декілька зауважень: відомо, що метод кінцевих різниць, на якому побудований обчислювальний алгоритм (3.21)—(3.26), має похибку порядку квадрата максимального кроку інтегрування h_N . Отже, алгоритм забезпечує розв'язання моделі (3.5)—(3.9) з потрібною точністю лише коли значення h_N є досить малим і не перевищує 1. Через це, для виконання розрахунків на досить тривалому періоді моделювання, треба задаватись великим значенням N , що призведе до занадто тривалих обчислень та до надмірних значень похибок, які накопичуються під час розрахунків (похибка округлення та ін.). Щоб запобігти цього, можна зменшити сам період моделювання, але тоді треба в заданій моделі ввести відповідні коефіцієнти масштабування і виконувати всі розрахунки в деякому умовному часі, як це було запропоновано в пункті 4.1.2 [87].

Для виведення співвідношень масштабування параметрів

математичної моделі будемо використовувати співвідношення (4.2) та (4.3) з тими ж позначеннями.

Запишемо моделі (3.5), (3.6) для часу $\tilde{t}$ (формули (3.7)—(3.9) за таких умов повністю ідентичні формулам (4.6)—(4.7)):

$$\frac{d^2 x(\tilde{t})}{d\tilde{t}^2} + \tilde{V}^* \frac{dx(\tilde{t})}{d\tilde{t}} - \tilde{G}_1^*(\tilde{t}) x(\tilde{t}) = 0, \quad (4.39)$$

$$x(0) = x_0, \quad \dot{x}(0) = \tilde{x}_{00},$$

$$\tilde{V}^* = \frac{\tilde{V}}{\tilde{D}}, \quad \tilde{G}_l^*(\tilde{t}) = \frac{\tilde{G}_l(\tilde{t})}{\tilde{D}}, \quad l = 1 \vee 2 \vee 3, \quad (4.40)$$

$$\tilde{V} = 1 - \frac{\tilde{v}^*}{\tilde{v}}, \quad \tilde{D} = \frac{\tilde{\delta}^*}{\tilde{v}^2}, \quad (4.41)$$

де фізичний та математичний сенс усіх змінних аналогічний змінним моделі (3.5)—(3.9), але позначка над ними “ $\sim$ ” підкреслює, що вони відносяться до моделі, записаної в одиницях часу $\tilde{t}$.

Підставляємо вираз (4.2) в рівняння (4.39)

$$\frac{d^2 x(m_t t)}{m_t^2 dt^2} + \tilde{V}^* \frac{dx(m_t t)}{m_t dt} - \tilde{G}_1^*(m_t t) x(m_t t) = 0, \quad (4.42)$$

$$x(0) = x_0, \quad \dot{x}(0) = \tilde{x}_{00}$$

або

$$\frac{d^2 x(m_t t)}{dt^2} + m_t \tilde{V}^* \frac{dx(m_t t)}{dt} - m_t^2 \tilde{G}_1^*(m_t t) x(m_t t) = 0, \quad (4.43)$$

$$x(0) = x_0, \quad \dot{x}(0) = \tilde{x}_{00},$$

де

$$\tilde{V}^* = \frac{\tilde{V}}{\tilde{D}}, \quad (4.44)$$

$$\tilde{G}_1^*(m_t t) = -\tilde{K}_1^*, \quad (4.45)$$

$$\tilde{G}_2^*(m_t t) = -\tilde{K}_2^* \left(1 - e^{-\tilde{k}_1 m_t t} \right), \quad (4.46)$$

$$\tilde{G}_3^*(m_t t) = -\tilde{K}_3^* \left[1 - e^{-\tilde{k}_2 \left(1 - e^{-\tilde{k}_1 m_t t} \right) \cdot m_t t} \right], \quad (4.47)$$

$$\tilde{K}_l^* = \frac{\tilde{k}_l}{D}. \quad (4.48)$$

Порівнюючи рівняння моделі (3.5)—(3.9) та висхідної (4.39)—(4.41) і (4.5)—(4.7), легко зрозуміти, що між їх відповідними коефіцієнтами є чіткий зв'язок, який визначається рівняннями (4.42)—(4.47), (4.2), з урахуванням співвідношення (4.48) за будь-яких l . Як і для моделі першого порядку, з (4.2), (4.42)—(4.48) виражаємо параметри моделі в справжніх одиницях часу через параметри моделі в умовних [87]

$$\tilde{V}^* = \frac{V^*}{m_t}, \quad (4.49)$$

для моделі (3.7)

$$\tilde{K}_1^* = \frac{K_1^*}{m_t^2}, \quad (4.50)$$

для моделі (3.8)

$$\tilde{k}_1 = \frac{k_1}{m_t}, \quad \tilde{K}_2^* = \frac{K_2^*}{m_t^2}, \quad (4.51)$$

для моделі (3.9)

$$\tilde{k}_1 = \frac{k_1}{m_t}, \quad \tilde{k}_2 = \frac{k_2}{m_t}, \quad \tilde{K}_3^* = \frac{K_3^*}{m_t^2}. \quad (4.52)$$

4.2.3 Ідентифікація моделі другого порядку

Для визначення параметрів моделі другого порядку, як і для моделі першого порядку, можна використати метод найменших

квадратів [28, 69, 81, 95, 135], тобто використати рівняння та співвідношення (4.14)—(4.17). Але, по-перше, до вектора параметрів K слід додати ще параметр V^* , а параметр k_l в ньому слід замінити на K_l^* (наприклад, для випадку $l = 3$: $K = [V^* \ k_1 \ k_2 \ K_3^*]$), а, по-друге, до рівнянь (4.16) та (4.17) слід додати рівняння з частинною похідною за V^* .

Ще слід відзначити особливість, пов'язану з неможливістю запису розв'язку моделі (3.5)—(3.9) в явному аналітичному вигляді (окрім випадку $l = 1$). Як було показано в підрозд. 3.2, функція $F(K, \Delta_j)$ ($j = \overline{0, N-1}$) в загальному випадку є послідовністю чисел, а не аналітичним виразом. А за цією послідовністю, як відомо, визначити частинні похідні неможливо. Слід застосовувати спеціальний алгоритм.

Пропонуємо використовувати формулу, подібну до формул (4.37) чи (3.19), (4.38), наприклад (для скорочення запису серед параметрів функції F вказується лише той, за яким шукається похідна, та параметр часу):

$$\frac{\partial F(\alpha, \Delta_j)}{\partial \alpha} \cong \frac{F(\alpha + \Delta_\alpha, \Delta_j) - F(\alpha, \Delta_j)}{\Delta_\alpha}, \quad (4.53)$$

$$j = \overline{0, N-1},$$

де α — параметр, за яким визначається частинна похідна (тобто, наприклад, для випадку $l = 3$: α — це або V^* , або k_1 , або k_2 , або K_3^*);

Δ_α — крок, на який змінюється значення α під час розрахунку частинної похідної (для забезпечення більшої точності результатів обчислень за формулою (4.53) цей крок треба вибирати найменшим).

Визначення ж функції $F(\alpha + \Delta_\alpha, \Delta_j)$ ($j = \overline{0, N-1}$) здійснюється так: у вихідному рівнянні (3.5), яке розв'язувалось для отримання функції $F(\alpha, \Delta_j)$, до значення параметра α додається значення Δ_α і після цього все

рівняння розв'язується знову. Отриманий таким чином новий розв'язок і буде функцією $F(\alpha + \Delta_\alpha, \Delta_j)$. Зрозуміло, що визначення параметрів моделі за таким алгоритмом буде займати багато часу, але через деякі особливості задачі, яка розв'язується (характер динаміки річкових процесів змінюється дуже повільно, багато часу займає збирання нових значень $\hat{X}$), це не є суттєвим недоліком.

Алгоритм визначення структури математичної моделі другого порядку, оптимальної за критерієм мінімуму суми квадратів похибок, повністю ідентичний алгоритму визначення структури математичної моделі першого порядку, який розглянуто в пункті 4.1.4, отже окремо на ньому зупинятись не будемо.

З урахуванням викладеного вище кожний дослідник сам зможе записати рівняння, формули та співвідношення для побудови математичної моделі другого порядку, яка буде мати структуру та параметри, оптимальні за критерієм мінімуму суми квадратів похибок.

4.3 Алгоритм ідентифікації незареєстрованих входів річкового об'єкта

Проведені дослідження показують, що якщо провести ідентифікацію математичної моделі для заданої річкової ділянки і порівняти значення, отримані за нею, з експериментальними даними, то на окремих елементарних ділянках може спостерігатись суттєва відміна модельованих та експериментальних даних (значень $\hat{X}$ в створах вимірювань). Це, звичайно, може бути обумовлено і некоректним чи недбалим проведенням вимірювань, а може й означати наявність на ділянці моделювання додаткових незареєстрованих входів.

Запропонуємо алгоритм ідентифікації цих додаткових входів, виходячи з припущень, по-перше, про повну коректність всіх проведених вимірювань, та, по-друге, про повну адекватність ідентифікованої моделі річкових процесам, які моделюються.

За таких вихідних передумов пропонуємо такий алгоритм ідентифікації (виявлення) додаткових входів, в залежності від наявної про них інформації: знаючи з попереднього аналізу можливе місцезнаходження η додаткового входу та вважаючи, що масопотік речовини Ω з цього входу відповідальний за всю відміну виміряного значення $\hat{X}$ від значення X' , обчисленого в цьому місці за моделлю, обчислюється значення Ω за формулою (для деякої елементарної ділянки в j -ому створі вимірювань):

$$\Omega_j = \frac{\hat{X}_j - X'_j}{M(K, t_j - \eta_j)}. \quad (4.54)$$

Як видно з цієї формули, алгоритм дозволяє знайти лише масопотік Ω , тому визначення справжнього значення показника якості води, що надійшла з додаткового входу, можливе лише за умови, що є дані витрати вод цього входу.

4.4 Деякі прийоми спрощення процедури ідентифікації параметрів моделей

Для полегшення ідентифікації параметрів моделей, зокрема моделі першого порядку, можна використовувати прийом, застосований в підрозд. 3.3.

Перейдемо до логарифмів $\bar{x}(t)$ відносних значень показників

якості води в критерії (4.18), з урахуванням моделі (3.91):

$$E(k_1) = \sum_{j=1}^{N-1} [\hat{x}(\Delta_j) + k_1 \cdot \Delta_j]^2, \quad (4.55)$$

умова мінімуму критерію

$$\frac{dE(k_1)}{dk_1} = 0, \quad (4.56)$$

похідна (в неперервному часі t) від виразу (3.91)

$$\frac{dF(k_1, t)}{dk_1} = -t, \quad (4.57)$$

рівняння, яке повинне бути розв'язане,

$$\sum_{j=1}^{N-1} \frac{dF(k_1, \Delta_j)}{dk_1} [\hat{x}(\Delta_j) - F(k_1, \Delta_j)] = 0 \quad (4.58)$$

або, після підстановки (4.57) в (4.58) та скорочення на $(-\Delta_j)$, яке для $j = 1, 2, \dots, N-1$ не дорівнює нулю,

$$\sum_{j=1}^{N-1} [\hat{x}(\Delta_j) + k_1 \cdot \Delta_j] = 0. \quad (4.59)$$

Звідси:

$$k_1 = -\sum_{i=1}^{N-1} \frac{\bar{x}(t_i)}{t_i} = -\sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{t_i} \ln \frac{x(t)}{x_0}. \quad (4.60)$$

або

$$k_1 = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{t_i} \ln \frac{x_0}{x(t)}. \quad (4.61)$$

Отже, запропонований прийом дозволив вивести просте співвідношення для обчислення параметра однопараметрової моделі першого порядку.

Для інших моделей першого порядку (дво- чи трипараметрової) цей прийом не дає якихось суттєвих переваг, оскільки всі рівняння

залишаються трансцендентними.

Слід зауважити, що запропонований в підрозд. 3.3 прийом можна коректно застосувати лише в моделі, для якої справедлива система рівнянь (4.52) або (4.53), тобто коли всі елементарні ділянки повністю вимірюється. Якщо ж має місце неповнота вхідних даних, тобто справедлива система рівнянь (4.53), тоді описаний прийом використовувати не можна, оскільки логарифм суми не дорівнює сумі логарифмів.

4.5 Нормування вхідних даних для моделювання будь-яких показників якості води

В підрозд. 2.2. сформульовано чотири основні вимоги, яким повинні задовольняти показники якості води, котрі можна моделювати за допомогою розробленого в розд. 2–4 математичного та програмного забезпечення. Серед них: значення показників якості води не повинні бути від’ємними, їх зменшення повинно трактуватись як зменшення забруднення і, навпаки, вони не повинні збільшуватися зі збільшенням параметра t чи z та усталене значення показника якості повинно дорівнювати нулю. В тому ж підрозд. 2.2 показано яким чином можна задовольнити ту чи іншу вимогу в разі її незадоволення для деякого показника якості води.

Процес перетворення реального діапазону значень показників якості води до їх допустимого діапазону значень в розроблених моделях та алгоритмах назовемо процесом нормування.

Розробимо чіткий алгоритм нормування набору значень x_i (чи g_i , u_i , w_i) ($i = 1, 2, \dots, N$) деякого показника якості води.

Головною вимогою, тобто тією, яка перевіряється першою, є третя з підрозд. 2.2 — зменшення значень x з часом. Нагадаємо, що величина насичення $x_{\text{нас}}$ дорівнює значенню показника якості, яке максимально може бути досягнуто. В разі, якщо третя вимога не задовольняється, тоді, як було зазначено в підрозд. 2.2, замість вимірних значень x_i слід моделювати різницю $(x_{\text{нас}} - x_i)$.

Другою перевіряється четверта вимога щодо нульового усталеного значення $x_{\text{уст}}$. Причому перевіряється вона лише в разі, якщо задовольняється попередня вимога, оскільки алгоритм інвертування напрямку зміни x автоматично робить $x_{\text{уст}} = x_{\text{нас}} - x_{\text{нас}} = 0$.

Наприклад, якщо моделюється концентрація хлоридів, то, як відомо, ця величина в природних водах завжди більша за нуль і визначається особливостями порід, в яких знаходиться русло річки, та характером стічних вод до неї. Приблизне значення цієї величини, як правило, відоме в відповідних екологічних установах, а якщо ні, то за це значення можна умовно прийняти концентрацію хлоридів в фоновому створі — вище за течією від першого місця надходження хлоровмісних стоків. Можна навести й інші приклади.

Для нормування показника якості води за усталеним значенням слід, як було зазначено в підрозд. 2.2, замість вимірних значень x_i моделювати різницю $(x_i - x_{\text{уст}})$.

Значення $x_{\text{нас}}$ так, як і $x_{\text{уст}}$, повинен вводити сам користувач програми. Якщо користувач цього не зробить, тоді ці ділянки графіка x_i , на яких значення x збільшуватимуться, будуть інтерпретуватись як ділянки $x_i = x_0$ (з хибним вимірюванням), оскільки всі запропоновані в книзі моделі будуються тільки для випадків, коли всі значення $x_i \leq x_0$.

Після нормування значень показника якості води за усталеним

значенням та величиною насичення здійснюється перевірка виконання першої вимоги — невід’ємності значень x_i . Для цього спочатку визначається мінімальне значення $x_{\min}$ і перевіряється умова $x_{\min} \geq 0$, а потім, як було зазначено в підрозд. 2.2, замість поточних значень x_i моделюється різниця $(x_i - x_{\min})$. Виконання цієї нормувальної процедури здійснюється програмним шляхом без втручання користувача, оскільки якщо її не виконати, тоді ідентифікація моделей стане просто неможливою.

Друга вимога ("Зменшення значень показника якості води означає зменшення забруднення і навпаки") необхідна не для коректного обчислення показника якості води, а для правильного трактування результатів моделювання і побічно задовольняється під час задоволення третьої вимоги.

Блок-схема алгоритму нормування приведена на рис. 4.1.

Зворотне нормування ("ренормування") (рис. 4.2) треба, зрозуміло, проводити в зворотному напрямку.

Під час проведення ренормування слід пам’ятати, що за самими нормованими значеннями не можна визначити реальні. Для цього слід використовувати спеціальний вектор булевих величин — вектор $Norm$, елементи $norm_i$ ($i = 1, 2, 3$) якого приймають значення "1" в разі, якщо була задіяна відповідна нормувальна процедура (перша, друга чи третя у відповідності з алгоритмом на рис. 4.1), або — "0", якщо відповідна процедура не була задіяна. У відповідності із значеннями елементів вектора $Norm$ до нормованих значень показника якості води застосовуються ті чи інші ренормувальні процедури так, як це показано на рис. 4.2.

Реалізувавши описані алгоритми (алгоритм нормування між

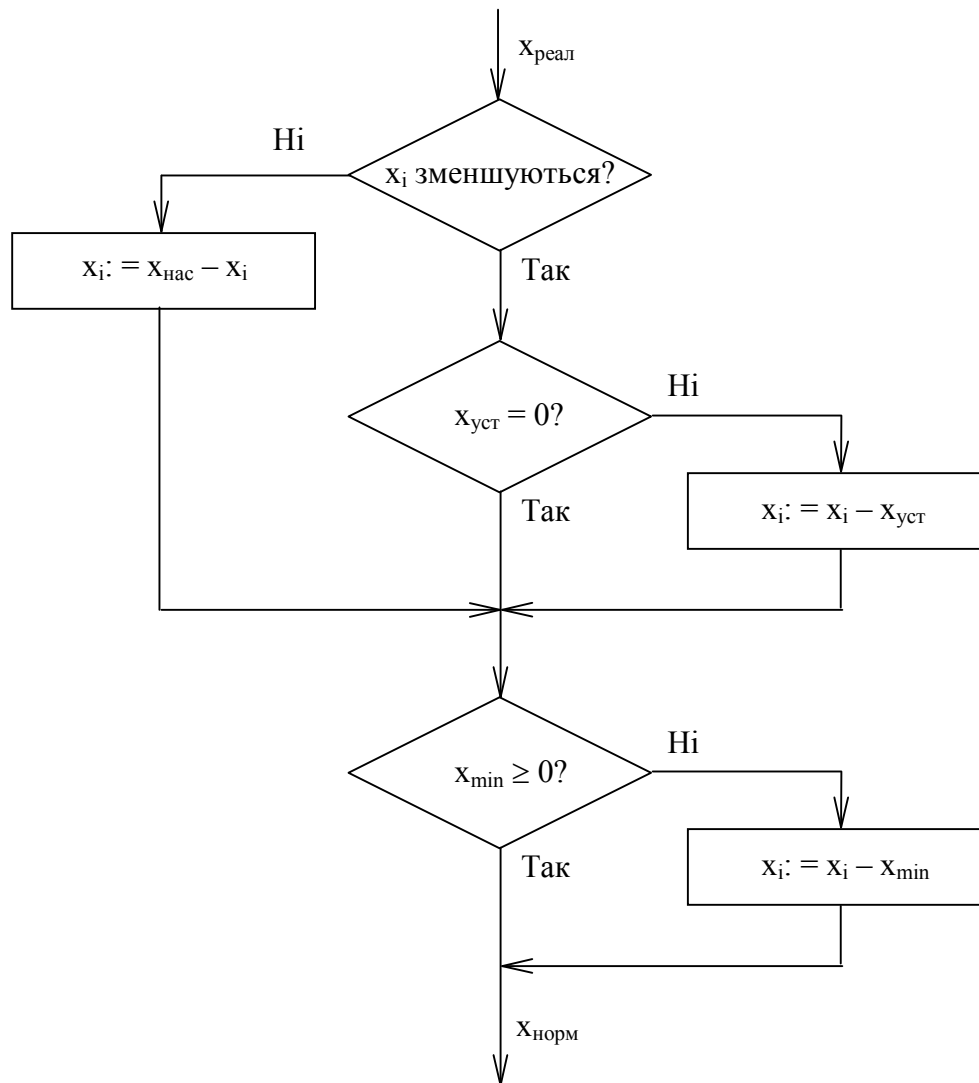


Рисунок 4.1 — Блок-схема алгоритму нормування значень показника якості води — переходу від реальних величин $X_{\text{реал}}$ до нормованих $X_{\text{норм}}$

етапом збирання вхідних даних та етапом ідентифікації моделі, а алгоритм ренормування перед виведенням результатів на екран в програмному забезпеченні моделювання динаміки річкових процесів та динаміки якості річкових вод), можна здійснювати моделювання та прогнозування якщо не будь-яких, то більшості відомих показників якості води.

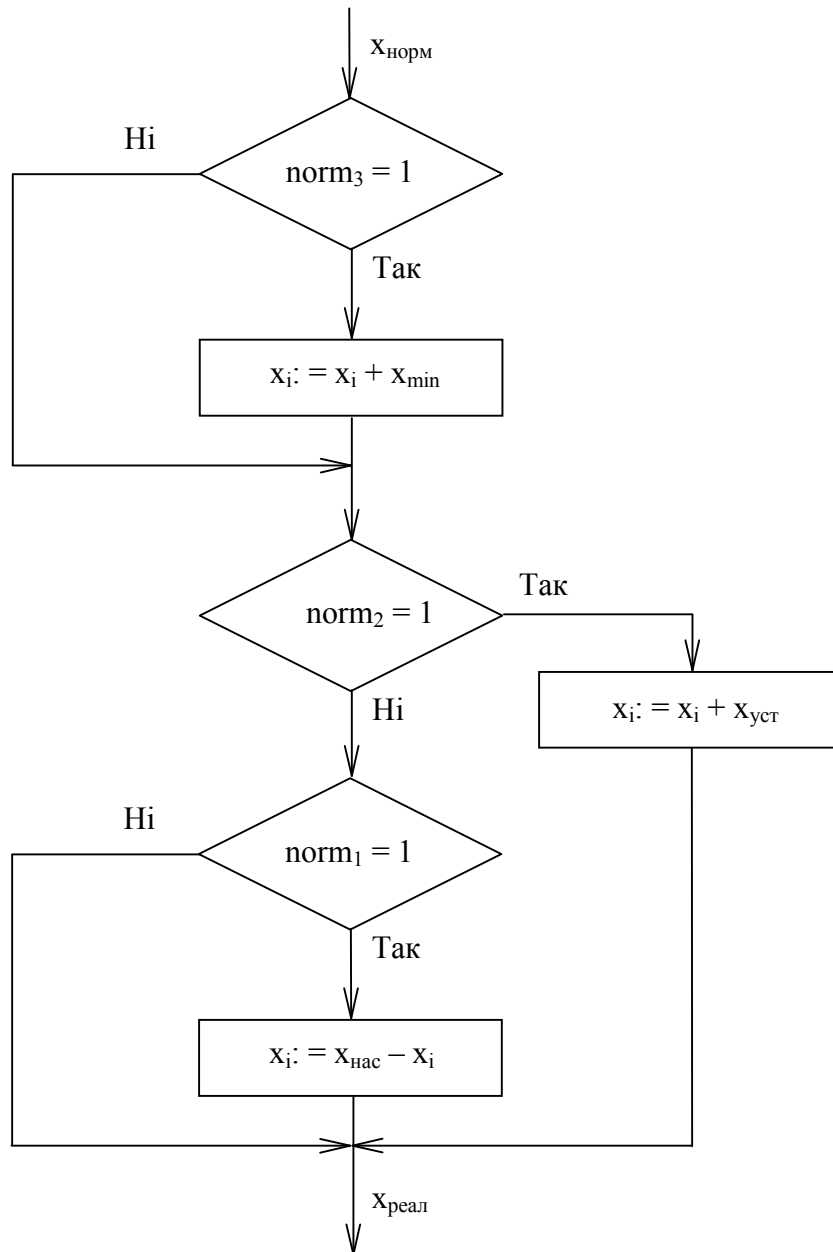


Рисунок 4.2 — Блок-схема алгоритму ренормування значень показника якості води — переходу від нормованих $x_{\text{норм}}$ величин до реальних $x_{\text{реал}}$

4.6 Висновки

Розроблено алгоритми та методики ідентифікації параметрів та

структури математичних моделей першого та другого порядків. Зокрема, для визначення оптимальних структури та параметрів моделей застосовано критерій мінімуму суми квадратів похибок між експериментальними даними та значеннями, які обчислюються за моделями. Виведено співвідношення для проведення масштабування моделей — для переходу від реальних одиниць часу до умовних.

Розроблено алгоритм ідентифікації незареєстрованих забруднювальних входів.

Запропоновано спосіб полегшення ідентифікації параметрів моделей. За допомогою цього прийому виведено простий вираз для ідентифікації параметра однопараметрової моделі першого порядку.

Описано алгоритми нормування — переходу від реальних значень показників якості води до нормованих, які задовольняють усі чотири вимоги підрозд. 2.2. Також описано зворотний алгоритм — алгоритм ренормування.

РОЗДІЛ 5

ПАКЕТ ПРИКЛАДНИХ ПРОГРАМ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ РІЧКОВИХ ПРОЦЕСІВ

Для проведення моделювання динаміки значень показників якості води річки Південний Буг в межах міста Вінниці розроблено комп'ютерний пакет прикладних програм (ППП) на основі пакета прикладних програм MathCAD 7 Professional (MathCAD 7 Pro) та за допомогою мови програмування PASCAL 7.0. Пакет програм отримав назву "МОДИРПРО" ("МОделювання ДИнаміки Річкових ПРОцесів"). В перекладі на російську та англійську мови назва пакета програм звучить так само: "МОДИРПРО" ("МОделирование ДИнамики Речных ПРОцессов") та "MODYRPRO" ("MOdeling of the DYnamic River PROcesses"), відповідно.

5.1 Загальна інформація про пакет прикладних програм

Пакет прикладних програм (ППП) МОДИРПРО дозволяє оцінювати якість річкових вод і призначений для проведення моделювання та прогнозування її динаміки.

Пакет програм написано на основі пакета прикладних програм MathCAD 7 Professional (далі просто MathCAD 7 Pro) та за допомогою мови програмування Borland Turbo Pascal версії 7.0 (далі просто PASCAL).

PASCAL-програми координують введення користувачем вхідних даних, їх обробку та приведення до формату, зручного для використання в MathCAD-програмах, які виконують всі обчислення.

Крім того, MathCAD-програми виводять на екран графіки, котрі ілюструють результати розрахунків, та передають отримані результати в текстові файли MS-DOS, які потім використовуються відповідними PASCAL-програмами. Далі, PASCAL-програми обробляють отримані результати і забезпечують їх виведення в зручному для користувача вигляді на екран і в текстові файли.

ППП МОДИРПРО здатний до моделювання багатьох показників якості води, котрі задовольняють чотири основні вимоги, наведені в підрозд. 2.2, наприклад:

- хімічні показники (концентрація в воді різних хімічних речовин, наприклад, азоту, фосфору, нафтопродуктів, фенолів, хлоридів, завислих речовин, розчиненого кисню тощо);
- бактеріологічні показники (вміст у воді сапрофітів, кишкових паличок, сальмонел тощо);
- інтегральні показники (окислюваність, величина хімічного чи біохімічного споживання кисню, жорсткість тощо).

Необхідними даними для роботи ППП є:

- набір значень показника $\hat{X}$, котрий моделюється, в створах річки (кількість створів не менша п'яти);
- значення цього показника U, R в водах, що надходять на входи;
- витрати вод q , що надходять на входи;
- місцезнаходження входів τ ,
- місцезнаходження виходів μ ;
- усереднена по створах швидкість течії річки v на кожній елементарній ділянці річки;
- можливі місцезнаходження τ_w та витрати вод q_w офіційно незареєстрованих додаткових входів, якщо ці дані є;

– прогнозні припущення про можливі зміни в U , R , q , τ_w , q_w .

Для виконання обчислень в МОДИРПРО необхідний IBM-сумісний комп'ютер класу, не нижче Pentium, але для введення вхідних даних та перегляду підсумкових файлів можна використовувати будь-який IBM-сумісний комп'ютер, на якому працює редактор текстових файлів MS-DOS.

Пакет прикладних програм має простий інтерфейс та алгоритм введення вхідних даних і виведення результатів, зрозумілий для користувача, не знайомого з програмуванням.

Результати виводяться на екран в зрозумілому для користувача вигляді та в текстові файли. Після закінчення роботи формується загальний файл-протокол з усіма використаними вхідними та вихідними даними, який зберігається в окремому підкаталозі і не знищується під час подальшої роботи з пакетом програм.

Вимоги до ділянки річкової системи, на якій проводиться моделювання, та до системи її моніторингу:

1) першим входом ділянки моделювання є великий водовідбір (водовідбір так само негативно впливає на якість річкових вод, як і стоки, оскільки зменшує об'єм води для розбавлення);

2) другим, третім та четвертим входами річки є її притоки, причому перша з них є приймачем не більше як п'яти, а друга — трьох джерел стічних вод, до третьої притоки стічні води не надходять (загалом, може надходити і більше, але сумарний вплив додаткових входів враховується лише в значенні показника в фоновому створі притоки перед першим з її входів);

3) на ділянці моделювання в основному водотоці річки є п'ять створів вимірювань.

Прикладом такої річкової системи є ділянка річки Південний Буг, розташована в межах міста Вінниці.

ППП МОДИРПРО розв'язує поставлені в підрозд. 1.4. задачі:

1. Поточне моделювання динаміки показників якості води на конкретній ділянці реальної річки в межах великого промислового міста.

1) ідентифікація математичної моделі річкових процесів, за якою можна оцінити якість річкової води в будь-якій точці лінії основної течії річки;

2) обчислення значень показників якості води в місцях водокористування;

2. Виявлення та ідентифікація характеристик офіційно незареєстрованих входів.

3. Прогнозування якості річкових вод в річці на виділеній ділянці моделювання для випадків, коли за тих же природних умов, за яких проводилась ідентифікація моделей, змінюються деякі параметри входів (витрати та якість стічних вод чи природних стоків).

Додатково ППП дозволяє усувати неповноту вхідних даних — проводити відновлення даних про входи: в разі, якщо на деякій елементарній ділянці невідомі значення U або R , тоді можна їх обчислити одночасно з ідентифікацією математичної моделі за даними вимірювань $\hat{X}$.

Всі одиниці фізичних величин, що використовуються в обчисленнях в ППП, — в системі СІ, однак величини концентрації хімічних величин — в "мг/дм³" або в "мг/л", а величини вмісту різних бактерій та мікроорганізмів — в "штуках" або "тисячах штук", в "дм³" або в "літрах" води.

5.2 Складові пакета прикладних програм

Пакет МОДИРПРО містить 84 програми та близько 120 текстових файлів даних. Працює він на комп'ютері, на якому встановлено пакет прикладних програм MathCAD 7 Pro. Всі вимоги до параметрів комп'ютера у пакета МОДИРПРО такі ж самі, як і в пакета MathCAD 7 Pro. Це — комп'ютер класу "Pentium" (зі стандартною конфігурацією), а найкраще — "Pentium Pro" або вище.

Загалом, ППП МОДИРПРО займає приблизно (в залежності від сформованої користувачем конфігурації пакета) 2200 Кб дискового простору і весь розміщується в каталозі MODYRPRO. Каталог MODYRPRO з пакетом програм МОДИРПРО може бути розташований в будь-якому місці дискового простору, а не обов'язково в каталозі MathCAD 7 Pro. Не є обов'язковим і шлях до головної програми пакета MathCAD 7 Pro Mcad.exe:

"C:\PROGRA~1\MATHSOFT\MATHCAD".

Каталог MODYRPRO містить такі підкаталоги:

- ETAPS — список робочих bat-файлів;
- HELP_DOC — doc-файли з описом пакета МОДИРПРО, набрані в редакторі MS Word;
- INPUT — вхідні текстові файли пакета: 5 файлів з вхідною інформацією (дані про річковий об'єкт);
- OUTPUT — підсумкові текстові файли пакета; взагалі, є 7 видів таких файлів з результатами обробки вхідних даних та результатами моделювання і прогнозування;
- PROGRAM — робочі PASCAL- та MathCAD-програми, а також буферні текстові файли, через які ці програми обмінюються

інформацією;

- PROT — текстові файли з протоколами досліджень — всі ці файли формуються після завершення роботи з пакетом МОДИРПРО відповідною PASCAL-програмою.

В підкаталозі PROGRAM знаходяться два підкаталоги, які містять:

- EXE — PASCAL-програми, які виконують всі обчислення та введення / виведення даних на екран та в текстові файли, 6 допоміжних PASCAL-модулей, програму ініціалізації пакета (запускається тільки один раз після встановлення пакета на комп'ютер), а також програму виведення заставки пакета, програму утворення конфігурації пакета та командний стартовий bat-файл;

- MCD — MathCAD-програми, які або безпосередньо виконують необхідні розрахунки, або із заданими параметрами автоматично викликають ці розрахункові програми.

Крім цього, підкаталог PROGRAM\MCD містить ще підкаталог DATA, де розташовані близько 120 згадуваних вище буферних текстових файлів.

Пакет МОДИРПРО може використовуватися в двох режимах:

- 1) ідентифікації математичної моделі динаміки річкових процесів;
- 2) моделювання, тобто розв'язання різних задач за допомогою ідентифікованої моделі.

Пакет програм МОДИРПРО є впровадженим та використовується для моделювання якості води річки Південний Буг в межах міста Вінниці в Держуправлінні екобезпеки у Вінницькій області та в Південно-Бузькому басейновому водогосподарському об'єднанні.

Використання ППП МОДИРПРО на практиці показало, що за його допомогою можна будувати адекватні математичні моделі процесів

забруднення та очищення річкових вод, які можна було б використовувати для оцінювання якості річкових вод. Таким чином, поставлені в книзі задачі моделювання можна вважати розв’язаними.

5.3 Висновки

Описано пакет прикладних програм (ППП) для моделювання річкових процесів, в основу якого покладено описане в книзі математичне, алгоритмічне та методичне забезпечення — PPP “МОделювання ДИнаміки Річкових ПРОцесів” (“МОДИРПРО”).

Приведена загальна інформація про PPP: вхідні та вихідні дані, вимоги до апаратного забезпечення, можливості, задачі, котрі розв’язуються, обмеження на використання тощо. Описано основні складові PPP та їх взаємодія.

Підкреслено, що PPP є запатентованим в ДААСП України та є впровадженим в Держуправлінні екобезпеки у Вінницькій області.

ВИСНОВКИ

В книзі на основі аналізу виділено найголовніші показники якості води річок і водойм України та зроблено огляд їх особливостей. Встановлено, що достатню інформацію про якість річкової води можна отримати, оцінюючи значення фізико-хімічних та бактеріологічних показників якості води.

Виконано аналіз відомих основних математичних моделей динаміки значень хімічних та бактеріологічних показників якості води, які є поширеними як у нас в Україні, так і за кордоном. Виявлено їх основні обмеження та недоліки.

На основі проведеного аналізу сформульовано основні задачі, які повинні бути розв'язані в книзі.

У відповідності з поставленими задачами запропоновано новий підхід до побудови математичних моделей динаміки хімічних та бактеріологічних показників якості води, які позбавлені недоліків, що притаманні відомих моделям. У відповідності із запропонованим підходом розроблено узагальнену математичну модель, яка описує динаміку значень хімічних та бактеріологічних показників якості води на ділянці річки будь-якої довжини з будь-якою кількістю входів та виходів.

Розроблено математичні моделі динаміки хімічних та бактеріологічних показників якості води для окремих елементарних ділянок річки, які можуть бути використані як складові узагальненої математичної моделі річки в цілому.

Математичні моделі динаміки річкових вод синтезовано в просторі стану показників їх якості.

Запропоновано дві форми представлення узагальненої моделі та вказано переваги кожної з них.

Введено поняття "моделі першого порядку" і "моделі другого порядку", які описують динаміку значень показників якості річкової води на базі спеціально сконструйованих диференціальних рівнянь першого і другого порядків, відповідно. Обґрунтовано можливість використання моделі першого порядку нарівні з моделлю другого порядку. Відзначено головні переваги і недоліки однієї порівняно з іншою.

Розроблено співвідношення та алгоритми розв'язання рівнянь моделей першого та другого порядків. Доведено збіжність алгоритмів розв'язання. Проведено аналіз деяких особливостей запропонованих математичних моделей за допомогою числових рядів.

Розроблено алгоритми та методики ідентифікації параметрів та структури математичних моделей першого і другого порядків. Зокрема, для визначення оптимальних структури та параметрів моделей застосовано критерій мінімуму суми квадратів похибок між експериментальними даними та значеннями, які обчислюються за моделями. Виведено співвідношення для проведення масштабування моделей — для переходу від реальних одиниць часу до умовних.

Розроблено алгоритм ідентифікації характеристик додаткових офіційно незареєстрованих входів.

Описано розроблений комп'ютерний пакет прикладних програм "МОделювання ДИнаміки Річкових ПРОцесів" ("МОДИРПРО"). Приведено його основні характеристики та складові.

На відміну від моделей та методик, розроблених іншими авторами, запропоновані в цій книзі працюють за умов відсутності

деяких вхідних даних, забезпечуючи можливість математичного довизначення останніх, та дозволяють використовувати їх в подальшому для синтезу закону керування якістю річкових вод внаслідок того, що вони трансформовані в простір стану показників якості цих вод.

Пакет прикладних програм МОДИРПРО, розроблений за метаріалами книги, пройшов успішну апробацію і прийнятий в якості інструменту практичного моніторингу річкових вод в Держуправлінні екобезпеки у Вінницькій області та в Південно-Бузькому басейновому водогосподарському об'єднанні, а в якості інструменту моделювання річкових процесів — в Вінницькому АТ "Вінницяводпроект".

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Айтсам А.М, Вельнер Х.А., Пааль Л.Л. Расчеты изменений концентраций загрязняющих веществ в реках // Гигиена и санитария. — 1968. — № 11. — С. 12—16.
2. Алекин О.А. Основы гидрохимии. — Л.: Гидрометеиздат, 1970. — 113 с.
3. Алекин О.А., Семенов А.Д., Скопинцев Б.А. Руководство по химическому анализу вод суши. — Л.: Гидрометеиздат, 1973. — С. 22—31.
4. Розробка методів ідентифікації математичних моделей динаміки якості річкових вод та алгоритмів збору необхідної для цього інформації: Звіт про НДР (проміжн.) / Винниц. гос. техн. ун-т. — 47-Д-172; № ДР 0197U012588; Інв. № 0298U000657.— К., 1998.— 85 с.
5. Аткинсон Б. Биохимические реакторы.— М.: Пищевая промышленность, 1981.— 471 с.
6. Балацкий О.Ф. Природоохранная работа на промышленном предприятии. — К.: Техника, 1986. — 265 с.
7. Беклемешев Д.В. Дополнительные главы линейной алгебры.—М.: Наука, 1983.—336 с.
8. Беляев В.И. Математическое моделирование процессов диффузии неконсервативных частиц в экологических системах // Автоматика. — 1984.— № 2.— С. 58—65.
9. Биологическая очистка производственных сточных вод: Процессы, аппараты и сооружения / Под ред. С.В. Яковлева.— М.: Стройиздат, 1985.— 208 с.
10. Бойчук Л.М. Имитационное моделирование речных

водохранилищ на основе интегральных инвариантов линейных динамических систем // Автоматика. — 1985.— № 6.— С. 64—73.

11. Бочаров Е.П. Многокритериальная постановка задачи оптимизации качества окружающей среды // Экономика и матем. методы. — 1991. — Т.27. — Вып. 5. — С. 976—978.

12. Вавилин В.А. Нелинейные модели биологической очистки и процессов самоочищения в реках.— М.: Наука, 1983.— 300 с.

13. Вавилин В.А., Васильев В.Б. Математическое моделирование процессов биологической очистки сточных вод активным илом. — М.: Наука, 1979. — 119 с.

14. Васильченко Г.В., Гриневич Л.А. Инженерная защита от затоплений населенных пунктов и сельхозугодий в поймах рек припятского Полесья // Проблемы использования и охраны водных ресурсов: Межведомственный сб. — Минск: Наука и техника, 1986. — С. 103—119.

15. Верлань А.Ф., Москалюк С.С. Математическое моделирование непрерывных динамических систем. — К.: Наук. думка, 1988. — 287 с.

16. Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. Матрицы и вычисления.— М.: Наука, 1984.— 320 с.

17. Возная В.Н. Химия воды и микробиология. — М.: Химия, 1967.

18. Волков Д.М. Дифференциальные уравнения и их приложения в естествознании. Ч. I. — Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1961. — 133 с.

19. Вольтерра В. Математическая теория борьбы за существование.— М.: Наука, 1976.— 286 с.

20. Вычислительные процессы в системах управления и моделирования / А.Ф. Верлань, И.Е. Ефимов, А.В. Латышев. — Л.:

Судостроение, 1981. — 248 с.

21. Гидравлика, водоснабжение и канализация: Учебник для вузов / В.И. Калицун, В.С. Кедров, Ю.М. Ласков, П.В. Сафонов. — 3-е изд.— М.: Стройиздат, 1980.— 359 с.

22. Глинка Н.Л. Общая химия: Учеб. пособие для вузов / Под ред. В.А. Рабиновича. — 21-е изд. — Л.: Химия, 1980.— 720 с.

23. Гольдберг В.М., Газда С. Гидрогеологические основы охраны подземных вод от загрязнения. — М.: Недра., 1984.— 262 с.

24. Горстко А.Б. Математическая модель экосистемы Азовского моря. — М.: Знание, 1979. — 64 с.

25. Горстко А.Б., Сурков Ф.А. Математика и проблемы сохранения природы.— М.: Знание, 1975. — 63 с.

26. Горстко А.Б., Угольницкий Г.А. Введение в моделирование эколого-экономических систем / Под ред. Г.С. Маркман. — Ростов-на-Дону: Изд.-во ун-та, 1990.— 112 с.

27. ГОСТ 24849-81. Вода питьевая. Полевые методы санитарно-микробиологического анализа. — Введ. 1981. — М.: Изд-во стандартов, 1981. — 35 с.

28. Демидович Б.П., Марон И.А. Основы вычислительной математики. — 3-е изд. — М.: Наука, 1966. — 664 с.

29. Демидович Б.П., Марон И.А. Численные методы.— М.: Наука, 1968. — 464 с.

30. Деруссо П., Рой Р., Клоуз Ч. Пространство состояний в теории управления (для инженеров).— М.: Наука, 1970.— 620 с.

31. Дружинин Н.И., Шишкин А.И., Федоровичева С.П. Факторный анализ показателей качества природных вод // Мелиорация и водное хозяйство. — 1990. — № 8. — С. 17—18.

32. Дубовой В.М., Кветний Р.Н. Програмування комп'ютеризованих систем управління та автоматики. — Вінниця: Вид-во Вінниц. держ. техн. ун-ту, 1997. — 208 с. — Укр.
33. Дубровин О.Ф., Хилук Л.Ф. О структуре имитационных моделей водохозяйственного комплекса бассейна Днепра // Автоматика. — 1984. — № 1. — С. 26—31.
34. Зенин А.А., Белоусова Н.В. Гидрохимический словарь / Под ред. А.М. Никанорова. — Л.: Гидрометеиздат, 1988. — 240 с.
35. Зуев Е.А. Язык программирования Turbo Pascal 6.0, 7.0. — М.: Веста, Радио и связь, 1993. — 384 с.
36. Ивахненко А.Г. Комбинированные имитационно-индуктивные методы моделирования экологических систем // Автоматика. — 1979. — № 5. — С. 8—17.
37. Ивахненко А.Г. Развитие, современное состояние и будущее МГУА (обзор) // Автоматика. — 1982. — № 5. — С. 3—17.
38. Ивахненко А.Г., Востров Н.Н., Пятков В.И. Трехэтапная структурная идентификация сложных пространственных объектов // Автоматика. — 1977. — №4. — С. 16—22.
39. Ивахненко А.Г., Ковальчук П.И., Высоцкий В.Н. Моделирование случайных полей загрязнения водоемов по алгоритмам МГУА // Автоматика. — 1974. — № 3. — С. 30—40.
40. Ивахненко А.Г., Кротов Г.И. Моделирование загрязнения среды при отсутствии информации о выбросах источников загрязнения // Автоматика. — 1977. — № 5. — С. 14—31.
41. Ивахненко А.Г., Кротов Г.И. Модернизированные алгоритмы МГУА для идентификации и двухуровневого долгосрочного прогноза экосистемы оз. Байкал // Автоматика. — 1983. — №2. — С. 11—17.

42. Ивахненко А.Г., Кротов Г.И., Чеберкус В.И. Многорядный алгоритм самоорганизации долгосрочных прогнозов (на примере экологической системы оз. Байкал) // Автоматика. — 1980. — № 4. — С. 28—47.
43. Ивахненко А.Г., Овчинников В.А. Управление днепровским каскадом водохранилищ ГЭС при двух критериях оптимальности на основе принципа самоорганизации // Автоматика. — 1975. — № 2. — С. 49—59.
44. Ивахненко А.Г., Сарачев А.П., Светальский Б.К. Определение базисного множества наблюдаемых переменных в задаче управления качеством воды. — Автоматика, 1984. — № 6. — С. 3—7.
45. Ивахненко А.Г., Степашко В.С. Самоорганизация моделей и долгосрочное прогнозирование речного стока при помощи балансового критерия // Автоматика. — 1975. — № 5. — С. 34—41.
46. Ивахненко А.Г., Юрачковский Ю.П. Моделирование сложных систем по экспериментальным данным. — М.: Радио и связь, 1987. — 120 с.
47. Ивлев А.М. Биогеохимия. — М.: Высш. шк., 1986. — 127 с.
48. Ильичев В.Г. Возможный механизм адаптации в моделях экологических систем // Автоматика. — 1989. — № 1. — С. 67—71.
49. Калина Г.П., Чистович Г.М. Санитарная микробиология. — М.: Химия, 1969. — 157 с.
50. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. — М.: Наука, 1971. — 576 с.
51. Кантере В.М. Теоретические основы технологии микробиологических производств: Учебное пособие.— М: Агропромиздат, 1990. — 271 с.

52. Карапетьянц М.Х., Дракин С.И. Общая и неорганическая химия. Учебное пособие для вузов.— М.: Химия, 1981.— 632 с.
53. Караушев А.В., Шварцман А.Я., Бесценная М.А. Теоретическое и экспериментальное изучение разбавления сточных вод в реках и водоемах // Труды IV Всесоюз. гидрол. съезда. — Т.9. — Л.: Гидрометеиздат. — 1976. — С. 27—35.
54. Карюхина Т.А., Чурбанова И.Н. Химия воды и микробиология. Учебник для техникумов.— М.: Стройиздат, 1974.— 215 с.
55. Кокин К.А. Экология высших водных растений.— М.: Изд.-во Моск. гос. ун.-та, 1982.— 160с.
56. Корниш-Боуден Э. Основы математики для биохимиков. — М.: Мир, 1983. — 144 с.
57. Корявов П.П. Проблемы замыкания системы гидрологических моделей речного бассейна // Математическое моделирование. Процессы в сложных экономических и экологических системах / Под ред. А.А. Самарского, Н.Н. Моисеева, А.А. Петрова.— М.: Наука, 1986. — С. 220—240.
58. Костюк В.И., Карнаух Г.С. Очистка сточных вод машиностроительных предприятий. — К.: Техника, 1990. — 258 с.
59. Крапивин В.Ф., Моисеев Н.Н., Свирежев Ю.М. Модель глобальных эколого-экономических процессов в биосфере // Автоматика. — 1978. — № 4. — С. 78—85.
60. Кротова Э.Н. Континуальные динамические модели эколого-экономических систем // Автоматика. — 1993. — № 3. — С. 82—85.
61. Кудрявцев В.А., Демидович Б.П. Краткий курс высшей математики. — 5-е изд. — М.: Наука, 1978. — 624 с.
62. Курс общей химии / Под ред. Н.В. Коровина. — 2-е изд. — М.:

Высш. шк., 1990. — 446 с.

63. Курс обыкновенных дифференциальных уравнений / Н.П. Еругин, И.З. Штокало и др. — К.: Вища шк., 1974. — 472 с.

64. Левич А.П., Ревкова Н.В., Булгаков Н.Г. Процесс “Потребление — Рост” в культурах микроводорослей и потребности клеток в компонентах минерального питания // Экологический прогноз/ Под ред. В.Н. Максимова.— М.: Изд-во Моск. гос. ун-та, 1986. — С. 26—33.

65. Липаев В.В. Проектирование математического обеспечения АСУ (системотехника, архитектура, технология).— М.: Сов. радио, 1977.— 431 с.

66. Лисичкин В.А., Лебедев В.В., Ватулина Н.И. Об одном подходе к прогнозированию состояния окружающей среды крупного города на основе моделирования // Вестн. Моск. гос. ун-та. — Сер. 6: Экономика.— 1989.— № 6.— С. 65—72.

67. Лурье Ю.Ю. Аналитическая химия промышленных сточных вод.— М.: Химия, 1984. — 447 с.

68. Лурье Ю.Ю., Рыбникова А.И. Химический анализ производственных сточных вод. — М.: Химия, 1974. — 335 с.

69. Маликов В.Т., Кветный Р.Н. Вычислительные методы и применение ЭВМ: Учеб. пособие. — К.: Вища школа, 1989. — 213 с.

70. Математическая биофизика / Ю.М. Романовский, Н.В. Степанова, Д.С. Чернавский. — М.: Наука, 1984.— 304 с.

71. Математическое моделирование. Процессы в сложных экономических и экологических системах / Под ред. А.А. Самарского, Н.Н. Моисеева, А.А. Петрова. — М.: Наука, 1986. — 296 с.

72. Математическое обеспечение сложного эксперимента. — Т.4:

Приближенные методы решения задач математического моделирования сложных радиотехнических систем / Белов Ю.А., Козлов Н.Н., Ляшко И.И., Макаров В.Л. и др. — К.: Наук. думка, 1986. — 264 с.

73. Медоуз Д.Х. Пределы роста: Доклад по проекту римского клуба "Сложные положения человечества". — М.: Изд-во Моск. гос. ун-та, 1991. — 205 с.

74. Методические рекомендации по организации и проведению эпидемиологического и санитарно-вирусологического надзора за качеством воды источников питьевой воды в системе водоснабжения с целью профилактики заболеваемости гепатитом А и другими кишечными вирусными инфекциями / Под ред. А.В. Красновцева. — М.: Химия, 1980. — 82 с.

75. Методические указания по санитарно-микробиологическому анализу воды поверхностных водоемов / Под ред. Б.Н. Онищенко. — М.: Химия, 1986. — 53 с.

76. Методы и средства измерения некоторых химических и физико-химических показателей воды при проведении ее мониторинга в реке / Мокин В.Б.; Винниц. гос. техн. ун-т. — Винница, 1996. — 58 с. — Рус.— Деп. в ГНТБ Украины 23.10.96, № 1963 — Ук96 // Анот. в ж. Депоновані наукові роботи, № 2, 1997.

77. Методы и средства определения удельной электропроводности воды при проведении мониторинга реки / Мокин В.Б.; Винниц. гос. техн. ун-т. — Винница, 1996. — 36 с. — Рус. — Деп. в ГНТБ Украины 23.10.96, № 1964 — Ук96 // Анот. в ж. Депоновані наукові роботи, № 2, 1997.

78. Многокритериальная задача рационального планирования комплексного использования водных ресурсов бассейнов рек (на

примере р. Днепр) / Л.Ф. Хилюк, С.М. Краснитский, И.К. Мацак и др. // Автоматика. — 1982. — № 3. — С. 47—55.

79. Моисеев Н.Н. Модели экологии и эволюции // Новое в жизни, науке, технике. Математика, кибернетика. — 1983. — № 10.— 64 с.

80. Моисеев Н.Н. Человек и биосфера: Опыт системного анализа и эксперименты с моделями.— М.: Наука, 1985.— 272 с.

81. Мокін Б.І., Мокін В.Б. Математичні методи ідентифікації електромеханічних процесів. — Ч.1: Ідентифікація електромеханічних процесів в лінійних детермінованих системах з зосередженими параметрами: Навчальний посібник. — Вінниця: УНІВЕРСУМ-Вінниця, 1998. — 153 с.

82. Мокін Б.І., Мокін В.Б. Новий підхід до моделювання процесів в річкових системах / Труды Междунар. конф. “Физико-технические и технологические приложения математического моделирования”.— К.: ЗАО “Южполиграфсервис”, 1998.— С. 172—175.

83. Мокін В.Б., Мокін О.Б. До питання побудови математичної моделі одного класу нелінійних електромеханічних систем // Праці 5-ої Міжнародної конф. "Контроль і управління в складних системах" (КУСС-99). — Т. 3. — Вінниця: УНІВЕРСУМ-Вінниця, 1999.— С. 136—139.

84. Мокін В.Б. До питання про збіжність алгоритму розв’язання рівнянь, які моделюють динаміку хімічних та бактеріологічних показників якості річкових вод // Вісник ВПІ. —1998.— № 3.— С. 28—35.

85. Мокін В.Б. Модель річки як об’єкта керування // Зб. тез 3-ої Міжнародної конф. "Контроль і управління в технічних системах" (КУТС-95). — Ч. 1. — Вінниця: Типограф. УВС. — 1995. — С. 47.

86. Мокін В.Б. Новий підхід до комп'ютерного моделювання динаміки річкових процесів / 3б. тез семінару "Сучасні проблеми водопостачання та знезараження стічних вод". — К.: Знання, 1998.— С. 15.
87. Мокін В.Б. Побудова алгоритму розв'язання рівнянь, які моделюють динаміку зміни хімічних та бактеріологічних показників якості річкових вод // Вісник ВПІ. —1998.— № 2. — С. 41—47.
88. Мокін В.Б. Синтез математичної моделі у просторі стану показників якості річкової води // Праці 4-ої Міжнародної конф. "Контроль і управління в технічних системах" (КУТС-97). — Т. 1. — Вінниця: УНІВЕРСУМ-Вінниця, 1997.— С. 168—173.
89. Мокін В.Б. Синтез моделі річки на основі упорядкування основних процесів // Вісник ВПІ. — 1997. — № 2. — С.: 43—48.
90. Мокін В.Б. Синтез просторово-розподіленої моделі річки на основі моделі упорядкування основних процесів // Вісник ВПІ. — 1997.— № 3. — С.: 52—56.
91. Мокін В.Б. Узагальнена математична модель річки в межах великого промислового центру // Вісник ВПІ.— 1995.— № 1.— С. 26—31.
92. Новиков Ю.В., Ласточкина К.О., Болдина З.Н. Методы исследования качества воды водоемов / Под ред. А.П. Шицковой.—М.: Медицина, 1990.— 400 с.
93. Объективный системный анализ и двухуровневый долгосрочный прогноз для экосистемы Каховского и Кременчугского водохранилищ / А.Г. Ивахненко, Б.К. Светальский, А.П. Сарычев и др. // Автоматика.— 1984. — № 2. — С. 30—41.
94. Объективный системный анализ экологической системы

Каховского водохранилища по критерию несмещенности / А.Г. Ивахненко, Л.А. Сиренко, А.И. Денисова и др. // Автоматика. — 1983. — № 1. — С. 66—76.

95. Ордынцев В.М. Математическое описание объектов автоматизации. — М.: Маш-ние, 1965. — 360 с.

96. Охрана окружающей среды: Модели управления чистотой природной среды / К.Г. Гофман, А.А. Гусев и др. — М.: Экономика, 1977.— 231 с.

97. Очков В.Ф. Mathcad 7.0 Pro для студентов и инженеров. — М.: Комп'ютер Пресс, 1998.—384 с.

98. Попков Н.В., Тулупчук Ю.М., Хилук Л.Ф. Задача трехкритериального управления водохозяйственным комплексом Днепровского водохранилища // Автоматика. — 1978. — № 2. — С. 44—53.

99. Практические рекомендации по расчету разбавления сточных вод в реках, озерах и водохранилищах / Под ред. А.В. Караушева. — Л.: Фотоофсетн. лаборатория ВНИГЛ ГГИ, 1970. — 90 с.

100. Проблемы фиксации азота. Неорганическая и физическая химия. Биохимия / Под ред. Р. Харди, Ф. Боттомли, Р. Бернса. — М.: Мир, 1982. — 735 с.

101. Прозоров И.В., Николадзе Г.И., Минаев А.В. Гидравлика, водоснабжение и канализация: Учеб. пособие для строит. вузов. — М.: Высш. шк., 1990.— 448 с.

102. Ракитский Ю.В., Устинов С.М., Черноруцкий И.Г. Численные методы решения жестких систем. — М.: Наука, 1979. — 208 с.

103. Рамад Ф. Основы прикладной экологии: Воздействие человека на биосферу. — Л.: Гидрометеиздат, 1981. — 543 с.

104. Речкалов В.В. Оценка роли зоопланктона в потреблении кислорода подо льдом // Экология. — 1992. — № 2. — С. 83—85.
105. Родзиллер И.Д. Прогноз качества воды водоемов — приемников сточных вод.— М.: Стройиздат, 1984.— 263 с.
106. Руднева Н.А., Обожин А.В. Влияние сточных вод на содержание микроэлементов в органах рыб // Экология. — 1992. — № 2. — С. 79—81.
107. Руководство по химическому анализу поверхностных вод суши / Под ред. А.Д. Семенова. — Л.: Гидрометеиздат, 1977. — 541 с.
108. СанПиН 4630-88. Охрана поверхностных вод от загрязнения.— Введ. 1988. — М.: Изд-во стандартов, 1981. — 38 с.
109. СанПиН 4630-89. Санитарные правила и нормы охраны поверхностных вод от загрязнения. — Введ. 1.01.1989. — К.: Вид-во стандартів, 1989. — 47 с.
110. СанПін. Вода питна, гігієнічні вимоги до якості води централізованого господарсько-питного водопостачання. — Введ. 23.12.96. — К.: Вид-во стандартів, 1996. — 24 с.
111. Семевский Ф.Н., Семенов С.М. Математическое моделирование экологических процессов.— Л.: Гидрометеиздат, 1982.— 279 с.
112. Синельников В.Е. Механизм самоочищения водоемов.— М.: Стройиздат, 1980.— 200 с.
113. Сорокин Ю.И. Роль бактерий в жизни водоемов.— М.: Знание, 1974. — 165 с.
114. Спектральный анализ и долгосрочный прогноз ведущих составляющих экологической системы оз. Байкал по фазовому инварианту / А.Г. Ивахненко, Г.И. Кротов, Ю.В. Коппа и др. //

Автоматика. — 1985. — № 2. — С. 15—24.

115. Споры о будущем: Окружающая среда / Под ред. А.М. Рябчикова.— М.: Мысль, 1983.— 175 с.

116. Справочник по гидрохимии / Под ред. А.М. Никанорова.— Л.: Гидрометеиздат. 1989.— 392 с.

117. Справочник по теории автоматического управления / Под ред. А.А. Красовского.— М.: Наука, 1987.— 712 с.

118. Техническая кибернетика. Теория автоматического регулирования. Кн. 1. Математическое описание, анализ устойчивости и качества систем автоматического регулирования / Под ред. В.В. Солодовникова.— М.: Машиностроение, 1967.— 770 с.

119. Трунова О.Н. Биологические факторы самоочищения водоемов и сточных вод.— Л.: Наука, 1979. — 109 с.

120. Турбо Паскаль 7.0. — 3-е изд. / Под ред. Т.Ф. Зиминной, И.В. Стеценко, Л.И. Мезенко. — К.: Издательская группа ВНУ, 1996.— 448 с.

121. Турчак Л.И. Основы численных методов: Учебное пособие.— М.: Наука, 1987. — 320 с.

122. Уморин П.П. Устойчивость сообщества “водоросли—бактерии—простейшие” к воздействию хлоратов // Экология, 1992.— № 5.— С. 36—42.

123. Унифицированные методы анализа вод / Под ред. Ю.Ю. Лурье. — М.: Химия, 1971. — 375 с.

124. Унифицированные методы исследования качества вод. — Ч.1: Методы химического анализа вод. — Изд. 2-е. — М.: СЭВ, 1974. — С. 90—100.

125. Фалькенмарк М. Гидрология и управление окружающей средой // Природа и ресурсы / ЮНЕСКО. — 1991. — Т.27. —

№ 1—2. — С. 61—70.

126. Форрестер Дж. Динамика развития города.— М.: Прогресс, 1974. — 286 с.

127. Фролов В.А. Определение степени смешения сточных вод с водой водотока // Производственные сточные воды.— Вып. 2.— М.: Медгиз, 1950.— С. 134—141.

128. Хефлинг Г. Тревога в 2000 году: Бомбы замедленного действия на нашей планете. — М.: Мысль, 1990. — 270 с.

129. Хилюк Л.Ф. Стохастическая многокритериальная задача управления комплексным использованием водных ресурсов бассейнов рек // Автоматика. — 1978. — № 4. — С. 60—70.

130. Холланд М., Раст У., Рюдинг С. Управление качеством воды // Природа и ресурсы / ЮНЕСКО. — 1991. — Т.27. — № 1—2. — С. 50—60.

131. Худенко Б.М., Шпирт Е.А. Аэраторы для очистки сточных вод.— М.: Стройиздат, 1973.— 113 с.

132. Чеберкус В.И., Курковский А.П. Самоорганизация точечных моделей для прогнозирования содержания растворенного кислорода и взвешенных веществ в реке // Автоматика. — 1979. — № 5. — С. 85—89.

133. Черкинский С.Н. Санитарные условия спуска сточных вод в водоемы. — М.: Изд-во Мин-ва коммунал. хоз-ва РСФСР, 1962. — 238 с.

134. Шикломанов И.А. Мировые водные ресурсы // Природа и ресурсы / ЮНЕСКО. — 1991. — Т.27. — № 1—2. — С. 81—90.

135. Шуп Т. Решение инженерных задач на ЭВМ: Практическое руководство. — М.: Мир, 1982. — 238 с.

136. Экологическое нормирование антропогенных нагрузок. Т.1.

Общие подходы / В.С. Безель, Ф.В. Кряжимский, Л.Ф. Семерилов, Н. Г. Смирнов. — М.: Экология, 1992. — № 6. — С. 3—12.

137. Эколого-экономическая стратегия развития региона: Математическое моделирование и системный анализ на примере Байкальского региона / В.Е. Викулов, В.И. Гурман и др. — Новосибирск: Наука, 1990. — 184 с.

138. Яковлев С.В., Карюхина Т.А. Биохимические процессы в очистке сточных вод.— М.: Стройиздат, 1980.— 200 с.

139. Яцало Б.И. О прогнозировании динамики экологических систем // Автоматика, 1987.— № 1.— С. 69—72.

140. Яцык А.В. Экологические основы рационального водопользования. — К.: Генеза, 1997. — 628 с.

141. Beck M.B., Young P.C. A Dynamic Model for DO-BOD Relationships in a Non-Tidal Stream // Water Research.—1975.—V. 9.— P. 769—776.

142. Bellman R. Mathematician the Rand Corporation. — New York

143. Camp T.R. Field Estimates of Oxygen Balance Parameters // Proc. A.S.C.E., J. Sanit. Eng. Div.—1965.—V. 91 (SA5).—P. 1—16.

144. Chen C.W. Concepts and Utilities of Ecological Model // Proc. A.S.C.E., J. Sanit. Eng. Div.—1970.—V. 96 (SA5).—P. 1085—1097.

145. Dobbins W.E. BOD and Oxygen Relationships in Stream // Proc. A.S.C.E., J. Sanit. Eng. Div.—1964.—V. 90 (SA3).—P. 53—78.

146. Dresnack R., Dobbins W.E. Numerical Analysis of BOD and DO profiles // Proc. A.S.C.E., J. Sanit. Eng. Div.—1968.—V. 94 (SA5).—P. 789—807.

147. Eykhoff P. System Identification. — New York: Wiley, 1976. — 607 p.

148. Hansen W.D., Frankel R.J. Economic Evaluation of Water Quality — a Mathematical Model of Dissolved-Oxygen Concentration in Freshwater Streams.—SERL Report ¹ 65-11.—Sanitary Engineering Research Laboratory, University of California, Berkeley.—1965.—46 p.

149. Mathematical Models in Water Pollution Control / Edited by A. James. — John Wiley and Sons Ltd.: New York, Chichester, Brisbane, Toronto, 1978. — 470 p.

150. Mokin V.B. New Models of Processes in a River // 20TH International Scientific Symposium of Students and Young Research Workers.— Zielona Gora, Poland, 1998. — Vol.V, Part II: Management.— P. 67—71.

151. Monod J. Recherches Sur La Croissance Des Cultures Bacteriennes.— Paris: Hermann et Cie, 1942.—127 p.

152. O'Connor D.J., Di Toro D.M. Photosynthesis and Oxygen Balance in Streams // Proc. A.S.C.E., J. Sanit. Eng. Div.—1970.—V. 96 (SA2).—P. 547—571.

153. Ray W.H. Advanced Process Control. — Toronto, London, New York: McGraw — Hill Inc., 1981. — 363 p.

154. Rich L.G., Andrews J.F., Keinath T.M. Diurnal pH Patterns as Predictors of Carbon Limitation in Algal Growth // Water and Sewage Works.—1972.—V.119.—P. 126—130.

155. Shastry J.S., Fan L.T., Erickson L.E. Nonlinear Parameter Estimation in Water Quality Modelling // Proc. A.S.C.E., J. Env. Eng. Div.— 1974.—V. 100 (EE2).—P. 369—390.

156. Streeter H.W., Phelps E.B. A Study of the Pollution and Natural Purification of the Ohio River // Bulletin U. S. Public Health Service. — № 146.—1925.—P. 37—42.

157. Thomann R.V., Di Toro D.M., O'Connor D.J. Preliminary Model of Potomac Estuary Phytoplankton // Proc. A.S.C.E., J. Env. Eng. Div.—1974.—V. 100 (EE3).—P. 127—142.

ДОДАТКИ

Додаток А

Аналіз існуючих класифікацій показників якості річкових вод та перелік основних показників якості води

А.1 Аналіз існуючих класифікацій показників якості річкових вод

Загально прийнято всі показники ділити на п'ять основних груп [17, 34, 54, 76, 77, 92, 109, 110, 116, 123, 124]:

1) фізичні показники: середні температура, щільність, питома електропровідність води тощо;

2) органолептичні показники: запах, смак і присмак, колір і кольоровість води тощо;

3) хімічні показники:

– концентрації у воді різних хімічних речовин: твердих, рідинних чи газоподібних мінеральних чи органічних;

– різні показники споживання кисню: біохімічне споживання кисню (БСК), хімічне споживання кисню (ХСК), перманганатна окислюваність тощо;

– концентрація завислих речовин;

– водневий потенціал рН;

– окислювально-відновлювальний потенціал Eh

тощо;

4) бактеріологічні показники: вміст у воді бактерій (їх видова різноманітність та чисельність), наприклад, вміст у воді колифагів, вміст лактозопозитивних кишкових паличок тощо;

5) біологічні (гідробіологічні) показники: вміст у воді різних видів

гідробіонтів та показники, які характеризують їх життєдіяльність.

Це — загальна класифікація показників, яка має більше теоретичну, ніж практичну спрямованість. Дійсно практичну спрямованість мають спеціальні державні стандарти, які використовуються державними санітарно-епідеміологічними органами і установами та різними організаціями, які займаються охороною і контролем якості навколишнього середовища. На даний час в Україні є два таких чинних стандарти [109, 110]:

— державний стандарт “Санитарные правила и нормы охраны поверхностных вод от загрязнения” (СанПиН 4630—89), який використовується Управліннями екологічної безпеки України для контролю за якістю річкових вод і стічних вод усіх категорій;

— державний стандарт “Державні санітарні правила і норми “Вода питна, гігієнічні вимоги до якості води централізованого господарсько-питного водопостачання”, затверджений наказом Міністерства охорони здоров’я України № 383 від 23 грудня 1996 р., який використовується Санітарними епідемстанціями України для контролю за якістю питної води.

Зокрема, державний стандарт СанПиН 4630—89 має за мету “попередження та усунення існуючого забруднення водних об’єктів, яке може призвести до розвитку інтоксикацій у населення при використанні води для господарсько-питних цілей, виникненню випадків інфекційних та паразитних захворювань, які розповсюджуються водним шляхом, а також до порушення умов рекреації в зв’язку з появою у воді неприємних запахів, офарблення, піно- та плівкоутворенням” [109]. Правила “встановлюють гігієнічні вимоги та нормативи якості поверхневих вод, регламентують різні види господарської діяльності,

які виконують або можуть виконувати неприємний вплив на стан поверхневих вод, а також відведення у водотоки й водойми всіх категорій стічних вод та поверхневого стоку” [109].

Під час формування гігієнічної класифікації водних об’єктів за ступенем забруднення всі показники якості води діляться на такі групи [109]:

- органолептичні;
- токсикологічні;
- показники, які характеризують санітарний режим (БПК₂₀ та концентрація розчиненого у воді кисню);
- бактеріологічні (кількість лактозопозитивних кишкових паличок в 1 дм³).

Державний стандарт “Державні санітарні правила і норми “Вода питна, гігієнічні вимоги до якості води централізованого господарсько-питного водопостачання”⁴⁾ регламентує основні правила і норми водоспоживання, водокористування та контролю за якістю води, основні гігієнічні вимоги до неї та відповідальність за недотримання цих вимог [110].

В гігієнічних вимогах до якості питної води всі показники якості води діляться на такі групи [110]:

- а) мікробіологічні: вміст у воді колифагів, вміст лактозопозитивних кишкових паличок тощо;
- б) паразитологічні: вміст патогенних кишкових найпростіших та вміст кишкових гельмінтів;
- в) токсикологічні:

⁴⁾ Цей стандарт цікавить нас лише як стандарт, який регламентує контроль за якістю водозабірної води для питних потреб, а не як стандарт для якості річкової води.

1) неорганічні компоненти: концентрації алюмінію, барію, миш'яку, селену, свинцю, нікелю, нітратів та фтору,

2) органічні компоненти: концентрація різних або сума усіх їх видів тригалометанів та пестицидів,

3) інтегральні показники: перманганатна окислюваність, концентрація загального органічного вуглецю;

г) органолептичні: запах, кольоровість, каламутність, присмак води тощо;

д) показники радіаційної безпеки питної води: загальні об'ємні активності альфа- і бета-випромінювачів;

е) показники фізіологічної повноцінності мінерального складу води: загальні мінералізація, жорсткість і лужність, а також концентрація магнію та фтору.

Крім цієї класифікації, в [110] приведені, також, існуючі типи контролю за якістю питної води:

а) повний — визначення всіх регламентованих державними правилами і нормами показників якості води;

б) загальний фізико-хімічний контроль — визначення концентрацій речовин (компонентів), які характеризують нешкідливість хімічного складу води;

в) скорочений контроль — включає визначення лише деяких показників якості води, зокрема:

1) контроль епідемічної безпеки води: показник ЗМЧ — загальне число мікроорганізмів (бактерій) в 1 см³ води, індекс БГКП — число бактерій групи кишкових паличок (коліформних мікроорганізмів) в 1 см³ води;

2) контроль нешкідливості хімічного складу води: водневий

показник рН, окислюваність перманганатна, концентрація нітратів, заліза, залишкового активного хлору, ТГМ — тригалометани (сума) — хлороформ, дібромхлорметан, тетрахлорвуглець тощо;

3) органолептична оцінка: каламутність, кольоровість, присмак, запах;

г) спеціальний контроль епідемічної безпеки питної води;

д) спеціальний токсикологічний контроль та біотестування;

е) спеціальний контроль радіаційної безпеки води.

А.2 Перелік основних показників якості води

Найголовнішими групами хімічних показників якості річкової води вважаються такі [2, 3, 17, 34, 54, 67, 68, 92, 107, 109, 110, 116, 123, 124]:

а) група азоту [2, 3, 17, 34, 54, 92, 107, 116, 123]:

— концентрація азоту амонійного (NH_4^+) (мг/л);

— концентрація азоту нітритного (NO_2^-) (мг/л);

— концентрація азоту нітратного (NO_3^-) (мг/л);

б) група показників кисневого балансу [17, 34, 50, 51, 54, 92, 109, 110, 116]:

— концентрація розчиненого у воді кисню (мг/л);

— величина біохімічного споживання кисню (БСК) (мг/л) — кількість розчиненого у воді кисню в міліграмах, яка потрібна для окислення органічних чи неорганічних речовин, що знаходяться в 1 дм^3 воді, в аеробних умовах в результаті дії біохімічних процесів; визначають величину БСК після n днів інкубації (БСК_n) води до появи нітритів в кількості 0,1 мг/дм³; найчастіше визначаються величини БСК_5

та БСК₂₀ [2, 67, 124];

в) група важких металів [17, 34, 47, 48, 54, 92, 109, 110, 116] — концентрації різних важких металів (мг/л): міді (Cu), свинцю (Pb), цинку (Zn), заліза (Fe), нікелю (Ni), хрому (Cr), кобальту (Co), кадмію (Cd), марганцю (Mn) тощо;

г) група показників органічного забруднення [2, 3, 17, 34, 51, 52, 54, 92, 107, 109, 110, 123, 116]:

— концентрація різних нафтопродуктів (мг/л); як правило, під терміном "концентрація нафтопродуктів" розуміють вміст у воді неполярних та малополярних сполук, які екстрагуються гексаном або петролейним ефіром. Інші складові частини сирової нафти (нафтенові кислоти, феноли тощо) та речовини, які переходять в стічні води в процесі очистки нафтопродуктів, визначають окремо [2, 3, 51, 52, 107, 123];

— концентрація фенолів (мг/л) — концентрація ароматичних сполук з однією або кількома гідроксильними групами в ядрі [2, 67, 68];

— концентрація жирів (мг/л);

— концентрація синтетичних поверхнево-активних речовин (СПАР) (мг/л), які є широкою групою сполук, що є різними за своєю структурою та відносяться до різних хімічних класів; є аніоноактивні, катіоноактивні, амфолітні і неіоногенні СПАР. Більшість СПАР, які використовуються в сучасному господарстві, є аніоноактивними: солі сірчаноокислих ефірів (сульфати) і солі сульфокислот (сульфонати) [2, 3, 51, 52, 107, 123];

— концентрація різних видів тригалометанів або їх загальна концентрація (мг/л) [110];

— концентрація різних видів пестицидів або їх загальна концентрація (мг/л) [110];

д) група солей [47, 48, 51, 52]:

— концентрація хлоридів (мг/л);

— концентрація сульфатів (мг/л);

— концентрація фосфатів (мг/л);

— концентрація фторидів (мг/л);

е) група завислих речовин — концентрація завислих у воді речовин (мг/л) [17, 34, 54, 92, 116];

ж) група токсикологічних неорганічних компонентів [110]:
концентрація алюмінію (Al), барію (Ba), миш'яку (As), селену (Se), свинцю (Pb), нікелю (Ni), нітратів (NO_3^-) та фтору (F) (мг/л);

з) група інтегральних показників [17, 34, 47, 48, 51, 52, 54, 76, 110, 116]:

— концентрація загального органічного вуглецю (мг/л) [110];

— концентрація бікарбонатів (мг/л) [17, 34, 47, 48, 51, 52, 54, 116];

— концентрація загального фосфору (мг/л) [47, 48, 51, 52];

— концентрація загального магнію (мг/л) [47, 48, 51, 52, 110];

— величина водневого показнику рН (одиниці) [47, 48, 51, 52, 76, 110];

— окислюваність перманганатна (мг/л) [17, 34, 47, 48, 51, 52, 54, 92, 109, 110, 116];

— величина сухого залишку (мг/л) — кількість сухого залишку, який лишається після випаровування проби води, віднесена до

початкового об'єму води в пробі [47, 48, 51, 52];

— величина загальної мінералізації (мг/л) [110];

— жорсткість (мг/л) [17, 34, 47, 48, 51, 52, 54, 110, 116];

— лужність (мг/л) [17, 34, 47, 48, 51, 52, 54, 110, 116]

тощо.

Більшість існуючих методів та засобів визначення фізико-хімічних показників якості річкової води детально проаналізована в роботах [76, 77, 92, 123, 124].

Найголовнішими бактеріологічними показниками якості річкової води є такі [17, 27, 49, 51, 54, 74, 75]:

— вміст лактозопозитивних кишкових паличок (ЛКП) (кількість паличок в 1 л води (колі-індекс) — один./л) [27, 109, 110];

— вміст сапрофітних мікроорганізмів (один./л) [17, 34, 54, 75, 116];

— вміст ешеріхія колі (один./л) [54];

— вміст ентерококів (один./л) [75];

— вміст фагів кишкових паличок (коліфагів) (в тому числі: вміст патогенних кишкових найпростіших та вміст кишкових гельмінтів) (один./л) [27, 74, 110];

— вміст сальмонел (один./л) [27, 108];

— вміст шигел (один./л) [27, 108];

— вміст стафілококів (один./л) [27, 75]

тощо.

Додаток Б

Природні шляхи зміни значень показників якості води

Прості шляхи (способи) зменшення значень *хімічних* показників (окремі процеси) [2, 3, 5, 6, 9, 17, 22, 23, 27, 34, 47, 52, 54, 58, 62, 67, 68, 100, 106, 107, 112, 116, 119, 123, 124, 131, 138]:

— розповсюдження та розбавлення, тобто процес змішування забруднених річкових вод з незабрудненими або з менш забрудненими (сюди ж відносяться процеси перемішування та дифузійні процеси) — характерні для всіх речовин;

— осаджування та седиментація, тобто випадіння речовин на дно — характерні для всіх речовин;

— поглинання речовин водними тваринами (раки, риби тощо) та вищими водними рослинами (рогоз, очерет, осока, елодея, ряска, тощо) — характерні для всіх речовин, особливо для завислих;

— перехід газів з води річки в атмосферу — характерний для молекулярних хлору, аміаку, кисню та різних газоподібних продуктів хімічних реакцій;

— адсорбція хімічних речовин завислими речовинами — характерна для всіх речовин, окрім, звичайно, завислих;

Складні способи зменшення значень хімічних показників (набори процесів) складаються з наведених вище процесів, яким передують такі [2, 3, 5, 6, 9, 17, 22, 23, 27, 34, 47, 52, 54, 58, 62, 67, 68, 100, 106, 107, 112, 116, 119, 123, 124, 131, 138]:

— хімічна трансформація, розпад речовин на більш прості, які уходять в атмосферу, поглинаються гідробіонтами або сорбуються

завислими речовинами — характерні для сполук кальцію, магнію, цинку, кадмію, хлору, фтору, свинцю, марганцю, сульфатів, хрому, кобальту, нафтопродуктів, фенолу тощо;

— хімічна трансформація речовин з подальшим осадженням — характерна для нафтопродуктів, а також складних сполук міді, цинку тощо;

— біохімічна трансформація, розклад речовин мікроорганізмами — характерна для усіх органічних і біогенних речовин: нафтопродуктів, фенолу, амонійного азоту, нітритів, нітратів, фосфатів тощо.

Зменшення значень хімічних показників теоретично може відбуватись й іншими шляхами, наприклад [2, 3, 5, 6, 9, 17, 22, 23, 27, 34, 47, 52, 54, 58, 62, 67, 68, 100, 106, 107, 112, 116, 119, 123, 124, 131, 138]:

— адсорбція хімічних речовин ґрунтом;

— процеси випаровування річкової води разом з розчиненими в ній солями;

— винесення вітром солей з дрібними краплями води з гребенів хвиль або під час руйнування повітряних бульбашок піни.

Однак, за винятком окремих випадків, внесок перелічених трьох додаткових шляхів, порівняно з основними, є дуже малим. Тому їх можна не враховувати.

Окрім зниження значень концентрацій хімічних речовин одночасно в річці йдуть і процеси їх збільшення. Перелічимо найбільш суттєві з них.

Шляхи збільшення значень хімічних показників [2, 3, 5, 6, 9, 17, 22, 23, 27, 34, 47, 52, 54, 58, 62, 67, 68, 100, 106, 107, 112, 116, 119, 123, 124, 131, 138]:

— абсорбція газів з атмосфери, наприклад, процеси аерації та реаерації (найбільш суттєві, головним чином, для кисню);

— розклад придонних мулових відкладень (ПМО) з виділенням в воду річки різних хімічних елементів, які містяться в ПМО;

— процес фотосинтезу — збільшення концентрації розчиненого у воді кисню;

— хімічне вивітрювання і вилуження гірських порід, вимивання солей — збільшують вміст у воді річки мінеральних елементів та їх сполук (магнію, кальцію, хлору, сульфатів, амонію, нітритів, нітратів, фосфатів, заліза);

— абразія (руйнування хвилями) і ерозія (руйнування водним потоком) ґрунтів і порід берегів річки — збільшують у воді річки вміст усіх речовин, в т. ч. мінеральних та органічних, розчинених та завислих.

Зрозуміло, що процеси хімічного вивітрювання та вилуження гірських порід, процеси вимивання солей, а на малих і середніх рівнинних річках ще й процеси абразії та ерозії, забезпечують дуже малий внесок в збільшення значень хімічних показників, порівняно з внеском стічних вод. Особливо він малий в усталених руслах з досить постійною течією, тобто в річках, гідрогеологічне формування яких вже завершено.

Процеси розкладу ПМО є інтенсивними тільки тоді, коли в річці різко посилюються процеси відмирання. А це буває або після надходження до річки токсичних чи отруйних хімічних речовин, які спричиняють відмирання більшості живих організмів, або після надходження великої кількості поживних хімічних речовин, які спричиняють розмноження всіх гідробіонтів, особливо водоростей, що, одночасно, збільшує біомасу організмів, які відмирають.

Процес абсорбції більшості газів з атмосфери йде, як правило, дуже повільно і тому його можна не враховувати. Однак абсорбцію кисню (процеси аерації і реаерації), а також процес фотосинтезу, як основні шляхи відновлення концентрації розчиненого у воді кисню, обов'язково слід враховувати. Хоча в суттєво забруднених річках швидкість збільшення концентрації розчиненого у воді кисню може поступатись швидкості його зменшення.

Що стосується *бактеріологічних* показників якості води, то відомо, що на кількість бактерій в воді впливають процеси поглинання їх найпростішими та іншими мікроорганізмами, процеси відмирання в результаті розчинення їх клітин бактеріофагом (лізис клітин) та внаслідок антагонізму з іншими бактеріями [3, 17, 27, 49, 51, 54, 74, 75].

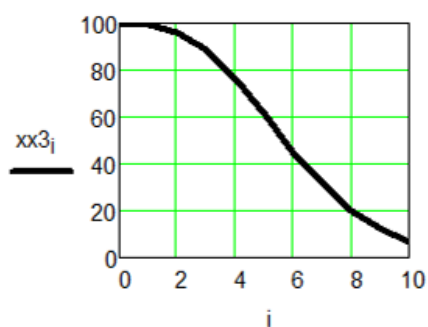
Встановлено, що через однакові проміжки часу відмирає певний і постійний відсоток бактерій по відношенню до їх початкової кількості [3, 17, 27, 49, 51, 54, 74, 75].

Додаток В

Програма прикладу розв'язання рівнянь моделі першого порядку для $l = 2, 3$ за допомогою числових рядів

Програма написана в середовищі пакета прикладних програм Mathcad 7.0 Professional і приведена нижче разом із підсумковими графіками.

$$\begin{aligned}
 N &:= 10 & T &:= 1 \\
 i &:= 0, 1 \dots N & p &:= 1 \dots N & dt &:= \frac{T}{N} & dt &= 0.1 & x_0 &:= 100 & t_i &:= i \cdot dt \\
 M3(k_1, k_2, k_3, t) &:= e^{-k_3 \cdot \left[t - \int_0^t e^{-k_2 \cdot q} (1 - e^{-k_1 \cdot q}) dq \right]} \\
 k_1 &:= 1 & k_2 &:= 2 & k_3 &:= 8 \\
 xx3_i &:= x_0 \cdot M3(k_1, k_2, k_3, t_i)
 \end{aligned}$$



$$SS1(i) := k_1 \cdot k_2 \cdot \frac{(t_i)^3}{3}$$

$$SS2(i) := -k_2 \cdot k_1^2 \cdot \frac{(t_i)^4}{4 \cdot 2!}$$

$$SS3(i) := \frac{(t_i)^5}{5} \cdot \left(k_2 \cdot k_1^3 \cdot \frac{1}{3!} + -k_2^2 \cdot k_1^2 \cdot \frac{1}{2} \right)$$

$$SS4(i) := \frac{(t_i)^6}{6} \cdot \left(-k_2 \cdot k_1^4 \cdot \frac{1}{4!} + k_2^2 \cdot k_1^3 \cdot \frac{1}{2} \right)$$

$$SS5(i) := \frac{(t_i)^7}{7} \cdot \left(k_2 \cdot k_1^5 \cdot \frac{1}{5!} + k_2^2 \cdot k_1^4 \cdot \frac{7}{24} + k_2^3 \cdot k_1^3 \cdot \frac{1}{3!} \right)$$

$$SS6(i) := \frac{(t_i)^8}{8} \cdot \left(-k_2 \cdot k_1^6 \cdot \frac{1}{6!} + k_2^2 \cdot k_1^5 \cdot \frac{1}{8} + -k_2^3 \cdot k_1^4 \cdot \frac{1}{4} \right)$$

$$SS7(i) := \frac{(t_i)^9}{9} \cdot \left(k_2 \cdot k_1^7 \cdot \frac{1}{7!} + -k_2^2 \cdot k_1^6 \cdot \frac{5}{144} + k_2^3 \cdot k_1^5 \cdot \frac{5}{24} + -k_2^4 \cdot k_1^4 \cdot \frac{1}{24} \right)$$

$$SS8(i) := \frac{(t_i)^{10}}{10} \cdot \left(-k_2 \cdot k_1^8 \cdot \frac{1}{8!} + k_2^2 \cdot k_1^7 \cdot \frac{1}{144} + -k_2^3 \cdot k_1^6 \cdot \frac{1}{8} + k_2^4 \cdot k_1^5 \cdot \frac{1}{12} \right)$$

$$S0(i) := SS1(i)$$

$$S1(i) := SS1(i) + SS2(i)$$

$$S2(i) := SS1(i) + SS2(i) + SS3(i)$$

$$S3(i) := SS1(i) + SS2(i) + SS3(i) + SS4(i)$$

$$S4(i) := SS1(i) + SS2(i) + SS3(i) + SS4(i) + SS5(i)$$

$$S5(i) := SS1(i) + SS2(i) + SS3(i) + SS4(i) + SS5(i) + SS6(i)$$

$$S6(i) := SS1(i) + SS2(i) + SS3(i) + SS4(i) + SS5(i) + SS6(i) + SS7(i)$$

$$S7(i) := SS1(i) + SS2(i) + SS3(i) + SS4(i) + SS5(i) + SS6(i) + SS7(i) + SS8(i)$$

$$X_{(0,i)} := x_0 \cdot e^{-k_3 \cdot S0(i)}$$

$$X_{(1,i)} := x_0 \cdot e^{-k_3 \cdot S1(i)}$$

$$X_{(2,i)} := x_0 \cdot e^{-k_3 \cdot S2(i)}$$

$$X_{(3,i)} := x_0 \cdot e^{-k_3 \cdot S3(i)}$$

$$X_{(4,i)} := x_0 \cdot e^{-k_3 \cdot S4(i)}$$

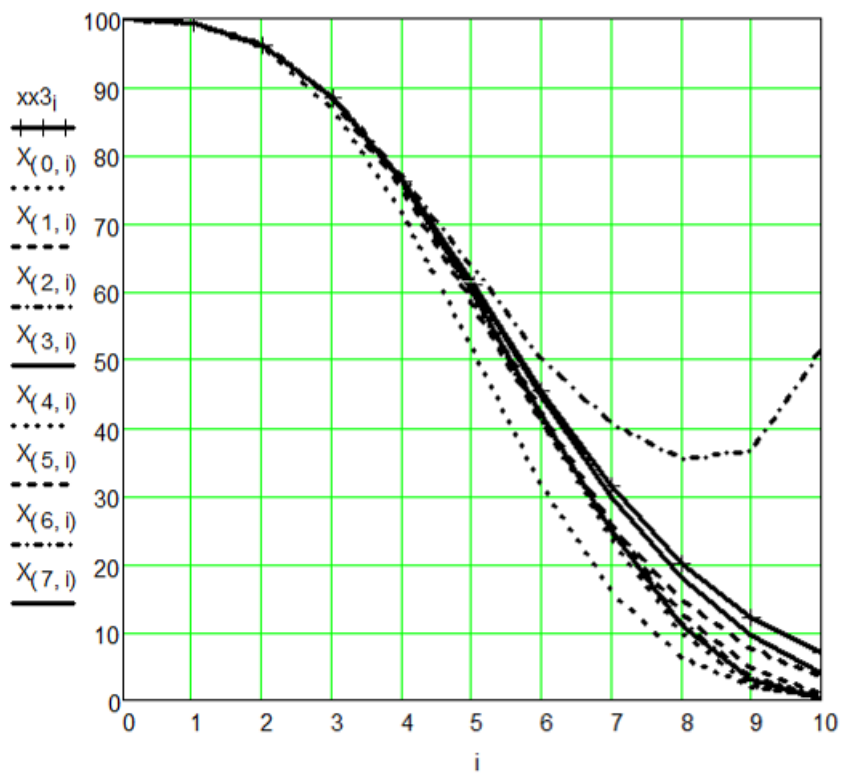
$$X_{(5,i)} := x0 \cdot e^{-k3 \cdot S5(i)}$$

$$X_{(6,i)} := x0 \cdot e^{-k3 \cdot S6(i)}$$

$$X_{(7,i)} := x0 \cdot e^{-k3 \cdot S7(i)}$$

	0	1	2	3	4	5	6	7	8
0	100	99.47	95.82	86.59	71.08	51.34	31.6	16.05	6.52
1	100	99.49	96.13	88	74.82	58.18	40.95	25.95	14.79
2	100	99.49	96.21	88.58	76.89	63.23	50.39	40.62	35.43
X = 3	100	99.49	96.2	88.41	76.09	60.76	44.72	30.07	18.13
4	100	99.49	96.19	88.35	75.73	59.41	41.26	23.73	9.92
5	100	99.49	96.19	88.36	75.8	59.76	42.32	25.88	12.76
6	100	99.49	96.19	88.36	75.79	59.67	41.99	25.09	11.52
7	100	99.49	96.19	88.36	75.79	59.65	41.92	24.89	...

$$xx3^T = (100 \ 99.49 \ 96.197 \ 88.413 \ 76.12 \ 60.923 \ 45.243 \ 31.251 \ 20.184 \ 12.274 \ 7.08)$$



$$P_0 := 100 \cdot \frac{\left[\sum_i |xx3_i - X_{(0,i)}| \right]}{\sum_i |X_{(0,i)}|}$$

$$P_1 := 100 \cdot \frac{\left[\sum_i |xx3_i - X_{(1,i)}| \right]}{\sum_i |X_{(1,i)}|}$$

$$P_2 := 100 \cdot \frac{\left[\sum_i |xx3_i - X_{(2,i)}| \right]}{\sum_i |X_{(2,i)}|}$$

$$P_5 := 100 \cdot \frac{\left[\sum_i |xx3_i - X_{(5,i)}| \right]}{\sum_i |X_{(5,i)}|}$$

$$P_3 := 100 \cdot \frac{\left[\sum_i |xx3_i - X_{(3,i)}| \right]}{\sum_i |X_{(3,i)}|}$$

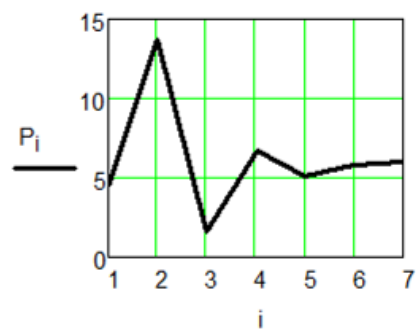
$$P_6 := 100 \cdot \frac{\left[\sum_i |xx3_i - X_{(6,i)}| \right]}{\sum_i |X_{(6,i)}|}$$

$$P_4 := 100 \cdot \frac{\left[\sum_i |xx3_i - X_{(4,i)}| \right]}{\sum_i |X_{(4,i)}|}$$

$$P_7 := 100 \cdot \frac{\left[\sum_i |xx3_i - X_{(7,i)}| \right]}{\sum_i |X_{(7,i)}|}$$

i := 1..7

$$P = \begin{pmatrix} 13.577 \\ 4.545 \\ 13.77 \\ 1.574 \\ 6.783 \\ 5.121 \\ 5.85 \\ 6.042 \end{pmatrix}$$



Наукове видання

**Мокін Віталій Борисович
Мокін Борис Іванович**

Математичні моделі та програми для оцінювання якості річкових вод

Текст друкується в авторській редакції

Вінниця, видавництво “УНІВЕРСУМ-Вінниця”
21021, м. Вінниця, Хмельницьке шосе, 95,
ВДТУ, головний корпус, 9-й поверх
Тел.: (0432) 44-05-32

Підписано до друку 24.04.2000 р.
Формат 42×29.7 1/4
Гарнітура Times New Roman
Друк різнографічний
Умовн.-друк. арк. 8,74
Зам. №2000-0025

Наклад 120 прим.

Віддруковано в комп'ютерному інформаційно-видавничому
центрі Вінницького державного технічного університету
21021, м. Вінниця, Хмельницьке шосе, 94,
ВДТУ, головний корпус, 9-й поверх
Тел.: (0432) 44-01-59