

К.т.н. Немцова А.А.^{*}, к.т.н. Пономаренко Е.Г.^{}**

^{} Национальный фармацевтический университет*

*^{**} Национальная академия городского хозяйства*

Использование балансовых и однокомпонентных моделей при прогнозировании качества поверхностных вод.

Прогноз состояния поверхностных вод, как правило, базируется на математическом моделировании процессов формирования качества воды с учетом существующих и планируемых внешних воздействий на водный объект. Модели качества воды могут быть разной сложности. Чем сложнее моделируемые процессы, тем большее количество параметров включается в модель. В общем случае состояние водной среды S можно описать зависимостью типа

$$S = f(p, L, S_0, G, B, M)$$

Здесь P – гидрологические факторы; L – аллохтонное и автохтонное поступление веществ; S_0 – начальное состояние водной среды; G – геометрия водного объекта; B – биохимические и химические реакции, происходящие в водном объекте; M – климатические и гидрометеорологические условия.

Для оперативного прогноза обычно используются динамические модели, позволяющие учитывать изменчивость состояния водного объекта во времени. При среднесрочном и | или долгосрочном прогнозировании достаточно использовать статические модели. В зависимости от объема знаний о данном водном объекте и уровня представлений об основных закономерностях процесса формирования качества воды, используются статистические или аналитические математические модели качества воды. Аналитические модели отличаются большей, по сравнению со статистическими моделями, универсальностью и широко используются в прогностических расчетах.

По уровню сложности модели качества воды можно разделить на следующие группы:

- балансовые модели, в основе которых лежит баланс между поступлением, отъемом и изменением в результате внутри водоемных процессов массы вещества в водном объекте;

- однокомпонентные модели, описывающие трансформацию отдельных веществ в водной среде;

- двухкомпонентные модели, чаще всего используемые для описания взаимосвязанной трансформации БПК и растворенного кислорода в природных поверхностных водах;

- многокомпонентные модели, описывающие взаимосвязанную трансформацию веществ в водной массе.

Балансовые модели получили широкое распространение при прогнозировании качества воды в водоемах. В основе этого класса моделей лежит оценка водного баланса и баланса веществ в водоеме. Приходная часть баланса определяется поступлением водных масс и веществ с водосбора, расходная – стоками из водоема, испарением, обменом с донными отложениями. Внутриводоемные процессы описываются в терминах “черного ящика” или приближенно оцениваются на основе баланса масс. Балансовые оценки базируются на систематических измерениях на водосборной территории и в самом водоеме.

При долгосрочном прогнозировании качества воды в водоемах часто используются балансовые модели, позволяющие рассчитать значения средних концентраций веществ в зависимости от величины антропогенной нагрузки на водоем. В рамках этих моделей средняя концентрация вещества в водоеме, сложившаяся под влиянием постоянной антропогенной нагрузки, определяется по следующим расчетным зависимостям:

- для консервативных веществ в непроточных водоемах

$$C_{\text{ср}} = \frac{Q_{\text{ст}} \cdot C_{\text{ст}} \cdot T}{W}$$

Здесь $Q_{\text{ст}}$ - суммарный расход сточных вод, поступающих в водоем, м³/год;
 $C_{\text{ст}}$ – средневзвешенная концентрация вещества в сточных водах, г/м³; W – объем водоема, м³; T – длительность прогноза, год;

- для неконсервативных веществ в непроточных водоемах

$$C_{\text{ср}} = \frac{Q_{\text{ст}} \cdot C_{\text{ст}}}{k \cdot W}$$

где k – величина коэффициента неконсервативности вещества, 1/год;

- для проточных водоемов

$$C_{\text{ср}} = C_{\text{пр}} - (C_{\text{пр}} - C_0) \cdot \exp\left(-\left(\frac{Q_{\text{выт}}}{W} + k\right) \cdot T_{\text{усл}}\right)$$

где $C_{\text{пр}} = \frac{Q_{\text{ст}} \cdot C_{\text{ст}}}{Q_{\text{выт}} + k \cdot W}$ – концентрация вещества, устанавливающаяся при достаточно большой длительности процесса трансформации; C_0 – первоначальная концентрация вещества, г/м³; $Q_{\text{выт}}$ – расход вытекающей из водоема воды, м³/год; $T_{\text{усл}}$ – условное время водообмена, год.

Однокомпонентные модели качества воды используются в прогнозных расчетах содержания веществ в водоемах и водотоках с учетом процессов биохимической трансформации веществ. Скорость трансформации, оцениваемая величиной коэффициента неконсервативности, зависит от свойств вещества, гидродинамических характеристик потока, условий внешней среды. Величина коэффициента неконсервативности определяется как $k = k_{\text{ст}} \cdot k_{\text{дин}}$, где $k_{\text{ст}}$ и $k_{\text{д}}$ – статическая и динамическая составляющие коэффициента неконсервативности соответственно, 1/сут. Статическая составляющая $k_{\text{ст}}$ характеризует скорость биохимической трансформации вещества в статических условиях. Ее величина определяется для каждого вещества экспериментально. Динамическая составляющая $k_{\text{д}}$ учитывает интенсификацию процессов биохимической трансформации в водном потоке. Величина $k_{\text{д}} \geq 1$ и увеличивается при росте скорости потока в диапазоне от 0 до 0,2 м/с. При отсутствии информации о величине динамической составляющей, значение коэффициента неконсервативности вещества принимается равным значению его статической составляющей.

Зависимость скорости биохимической трансформации веществ от температуры воды учитывается при прогнозных расчетах по формулам

$$\begin{aligned} k &= k_{20} \cdot \left[1,12 \cdot (T+1)^{-0,038}\right]^{T-20} && \text{при } 0 \leq T < 5^{\circ}\text{C} \\ k &= k_{20} \cdot 1,047^{T-20} && \text{при } T \geq 5^{\circ}\text{C} \end{aligned}$$

где k_{20} – величина коэффициента неконсервативности вещества при 20°C, 1/сут; T – температура воды, °C.

Для прогноза качества воды с учетом процессов переноса и трансформации веществ используется уравнение турбулентной диффузии. При среднесрочном и/или долгосрочном прогнозировании используется запись этого уравнения для условий установившегося потока. Для водотоков обычно используется одномерное уравнение продольной дисперсии, получаемое осреднением по живому сечению потока трехмерного уравнения турбулентной диффузии. Для водоемов, в зависимости от их гидродинамических характеристик, могут использоваться одно-, двух- и трехмерные уравнения турбулентной диффузии. Двух- и трехмерные уравнения турбулентной диффузии, как правило, не имеют аналитического решения и решаются численными методами.

Уравнение продольной дисперсии при граничном условии $C(0) = C_0$

$$D \frac{d^2 C}{dx^2} - v \frac{dC}{dx} - k \cdot C + f = 0$$

имеет аналитическое решение вида

$$C(x) = C_0 \cdot \exp(\gamma \cdot x) + \frac{f}{k} \cdot (1 - \exp(\gamma \cdot x)); \quad \gamma = \frac{v - \sqrt{v^2 + 4 \cdot k \cdot D}}{2 \cdot D},$$

где C_0 – концентрация вещества в начальном створе, г/м³; k – коэффициент неконсервативности вещества, 1/с; v – скорость потока, м/с; D – коэффициент продольной дисперсии, м²/с; f – интенсивность аллохтонного поступления вещества, г/м³с. Величина коэффициента продольной дисперсии определяется по формуле Караушева

$$D = \frac{v \cdot g \cdot h}{37 \cdot n_{ш} \cdot Sh^2}$$

где g – ускорение силы земного тяготения, м/с²; h – глубина потока, м; $n_{ш}$ – коэффициент шероховатости русла; Sh – коэффициент Шези, √м/с.

Одним из основных внешних диффузных источников поступления в водный объект веществ является неорганизованный поверхностный сток. В этом

случае интенсивность аллохтонного поступления вещества в водный объект определяется по формуле

$$f = \frac{Q_{\text{пов}} \cdot C_{\text{пов}}}{L \cdot w}$$

где $Q_{\text{пов}}$ и $C_{\text{пов}}$ – расход и концентрация вещества в поверхностном стоке, соответственно $\text{м}^3/\text{с}$ и $\text{г}/\text{м}^3$; L – протяженность водосборной территории, м ; w – площадь живого сечения потока, м^2 .

Для консервативного вещества прогноз качества воды с учетом внешнего диффузного поступления его в водный объект производится по формуле

$$C(x) = C_0 + \frac{f}{v} x$$

Если в водный объект поступают сточные воды одного или нескольких выпусков сточных вод, то прогноз качества воды осуществляется на основе баланса масс веществ с учетом их возможной трансформации в водной среде. Расчет концентрации вещества в максимально загрязненной струе производится в этом случае по формуле

$$C_{\text{max}} = C_{\hat{o}} \cdot \exp(\gamma \cdot x_{\hat{o}}) + \sum_{i=1}^N \frac{C_{\text{ст},i} - C_{\hat{o}}}{n_i} \cdot \exp(\gamma \cdot x_i), \quad \gamma = \frac{v - \sqrt{v^2 + 4 \cdot k \cdot D}}{2 \cdot D}$$

где $C_{\text{ф}}$ – концентрация вещества в фоновом створе, $\text{г}/\text{м}^3$; $C_{\text{ст},i}$ – концентрация вещества в сточных водах i -го выпуска, $\text{г}/\text{м}^3$; n_i – кратность разбавления сточных вод i -го выпуска в контрольном створе; $x_{\text{ф}}$ и $x_{\text{ст},i}$ – расстояния от фонового створа и выпусков сточных вод до контрольного створа, м ; N – количество выпусков сточных вод. Для консервативных веществ расчет ведется по этой же формуле при величине коэффициента неконсервативности $k=0$.

Если в водный объект одновременно поступают сточные воды организованных выпусков и неорганизованный поверхностный сток с территории, то решение определяется в соответствии с принципом суперпозиции для неконсервативных веществ по формуле

$$C_{\text{max}} = C_0 \cdot \exp(\gamma \cdot x_{\text{ф}}) + \sum_{i=1}^N \frac{C_{\text{ст},i} - C_{\text{ф}}}{n_i} \cdot \exp(\gamma \cdot x_i) + \frac{f}{k} \cdot (1 - \exp(\gamma \cdot x_{\text{ф}}))$$

Для консервативных веществ формула упрощается до вида

$$C_{\max} = C_o + \sum_{i=1}^N \frac{C_{\text{ст.}i} - C_{\phi}}{n_i} + \frac{f}{v} \cdot x$$

Как показали многочисленные эксперименты турбулентность потока оказывает решающее влияние на процессы смешения и разбавления сточных вод, но не на процессы трансформации веществ в водном потоке. Поэтому, при расчетах качества воды турбулентностью потока зачастую пренебрегают. В этом случае расчет производится по тем же формулам, но принимается

$$\gamma = -\frac{k \cdot x}{v}$$

где **k** - коэффициент неконсервативности, **v** - скорость течения, **x** - расстояние.

Оперативный прогноз качества воды требует учета изменчивости процесса формирования качества воды во времени. В этом случае используется уравнение продольной дисперсии, записанное для неустановившихся условий.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - k \cdot C \quad \text{при} \quad C(x, 0) = 0$$

В общем виде это уравнение не имеет аналитического решения и решается численными методами. Однако в ряде частных случаев такое решение существует. Важное практическое значение имеет прогноз последствий аварийного залпового сброса сточных вод в водный объект. В этом случае процесс трансформации и переноса веществ водным потоком описывается зависимостью

$$C(x, t) = \frac{M}{2 \cdot \omega \cdot \sqrt{\pi \cdot D \cdot t}} \cdot \exp \left(-\frac{(x - v \cdot t)^2}{4 \cdot D \cdot t} - k \cdot t \right)$$

где **M** – масса поступившего со сточными водами вещества, г; **ω** - площадь живого сечения потока, м².