

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Пензенский государственный университет
архитектуры и строительства»
(ПГУАС)

В.А. Щепетова

ОСНОВЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ЭКОЛОГИИ

Пенза 2015

УДК 502:519.87(035.3)

ББК 20.1+22.18

Щ56

Рецензенты: доктор педагогических наук, профессор ФГОУ ВПО «Пензенский артиллерийский инженерный институт» О.В. Варникова;
старший преподаватель кафедры инженерной экологии ФГОУ ВПО «Пензенский государственный университет архитектуры и строительства» И.Н. Симонова

Щепетова В.А.

Щ56 Основы математического моделирования в экологии: моногр. / В.А. Щепетова. – Пенза: ПГУАС, 2015. – 122 с.

ISBN 978-5-9282-1355-8

Рассматриваются основы математического моделирования и возможности его использования в качестве научного метода исследования.

Представлены результаты исследований автора, включающие разработку моделей для решения прикладных задач в области инженерной экологии. Оценена роль моделирования в изучении экологических систем, проведен сравнительный анализ математических моделей для решения различных экологических задач.

Монография подготовлена на кафедре инженерной экологии. Материалы монографии предназначены для студентов, обучающихся по направлению подготовки 20.04.01 «Техносферная безопасность», а также аспирантов и научно-педагогических работников.

ISBN 978-5-9282-1355-8

© Пензенский государственный университет
архитектуры и строительства, 2015

© Щепетова В.А., 2015

ПРЕДИСЛОВИЕ

Качество окружающей среды и анализ потенциальных возможностей ее основных составляющих предполагают четкую организацию мониторинга системы наблюдений и контроля за ее состоянием. При этом токсикологические аспекты всестороннего анализа окружающей среды в условиях современного экологического кризиса приобретают особую значимость. В настоящее время в научных и производственных кругах осознана ограниченность концепции нормирования сбросов и выбросов загрязняющих веществ в природные объекты, которая основана на системе предельно допустимых концентраций.

Санитарно-гигиенические нормативы обеспечивают защиту здоровья человека, тогда как контроль с помощью предельно-допустимых концентраций (ПДК) не защищает экосистемы от различных видов загрязнения. Система критериев оценки качества окружающей среды на основе ПДК имеет много недостатков, например она не учитывает взаимодействие различных загрязняющих веществ между собой, аккумуляцию в организмах, взаимодействие с донными отложениями и т.д. Несмотря на то, что ускорены темпы нормирования загрязняющих веществ в окружающей среде, на сегодняшний день нормативы все еще не могут в полной мере отвечать требованиям.

Трудности нормирования заключаются в том, что для большинства загрязняющих веществ, ПДК которых установлены, нет надежных аналитических методов контроля; часто нормируются одни формы веществ, а в водных объектах присутствуют другие, с иными ПДК. Например, токсичность загрязняющих веществ зависит от конкретных гидрохимических, гидробиологических ситуаций, на фоне которых она проявляется; процессы трансформации загрязняющих веществ в водных экосистемах включают в себя целый ряд стадий, причем часто промежуточные продукты оказываются более токсичными, чем исходные загрязняющие вещества и т.д.

Важным, является нормирование концентрационных уровней содержания антропогенных загрязнителей и экспрессный их аналитический контроль; исследование динамики распространения и оценка их миграционной способности; прогнозирование изменения различных показателей окружающей среды, а также возможности трансграничного и дальнейшего переноса загрязняющих веществ.

Натурное экологическое моделирование на природных объектах является необходимым элементом экологического нормирования. В настоящее время общепризнано представление о том, что нормирование антропоген-

ных нагрузок на экосистемы должно основываться на глубоком анализе большого числа всевозможных факторов, процессов, показателей и т.п., всесторонне характеризующих качественные изменения, наступающие в рассматриваемых экосистемах под влиянием нормируемых воздействий.

Анализ работ отечественных и зарубежных исследований показывает, что исходная информация, необходимая для экологического нормирования не является исчерпывающей, поскольку содержит оценку только либо гидрологических, либо химических, либо геохимических показателей.

Математическое моделирование любой экологической системы представляет собой обширный, продолжительный и дорогостоящий эксперимент.

Важно помнить, что математическая модель есть приближенное описание какого-либо класса явлений внешнего мира с помощью математической символики. Использование моделей всегда и неизбежно связано с упрощением, идеализацией моделируемого объекта. Сама модель не охватывает объекта во всей полноте его свойств, а отражает лишь некоторые его исследуемые характеристики. Самое важное, модель должна быть удобна, более доступна для исследования, чем модульный объект.

1. СТАНОВЛЕНИЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ КАК НАУЧНОГО МЕТОДА ИССЛЕДОВАНИЯ

1.1. Краткий исторический обзор развития моделирования как метода исследования

Элементы моделирования, можно обнаружить во многих научных документах прошлого. Один из таких элементов – проведение аналогии между предметами – можно найти в трудах античных ученых [1].

Античные ученые использовали в своих работах термины «аналог», «аналогия», «подобие» и т.д. Аналогия была определена Евклидом как подобие отношений. Первоначальное рассмотрение отношений было только между числами, затем распространилось на самые различные области действительности (проводилась аналогия между здоровьем человека и благополучием государства и другие). Платон и Аристотель рассматривали как количественные, так и качественные аналогии. Но если при количественной аналогии возможно равенство отношений, то качественная аналогия может свидетельствовать только о подобии как сходстве функций и органов. Аристотель дал такое определение аналога: «Я разумею под аналогом следующее: одним присуще легкое, другим оно не присуще: но то, что для имеющих его представляет собой легкое, то для других нечто иное, взамен него; и у одних имеется кровь, а у других ее аналог, обладающий той же силой, как у животных с кровью – кровь» [2].

Таким образом, в роли аналогов выступали естественные тела, находящиеся в природе, и уже тогда понимание аналога было близко современному значению этого термина.

Почти одновременно с аналогиями между микрокосмом и макрокосмом, с помощью которых античные философы пытались проникнуть в недоступный непосредственному восприятию органов чувств микрокосм (Демокрит и Левкипп, например, сопоставляли пылинки в воздухе с атомами), ученые, изучавшие Землю, заключали о происхождении и развитии нашей планеты также по аналогии с повседневными обычными явлениями.

В начале нового летосчисления древнеримский ученый Страбон впервые сделал вывод о подвижности земной коры. Аналогия играла в его рассуждениях большую роль. Отвергая мнение Эратосфена о поднятии уровня моря из-за наносов рек, Страбон рассуждал так: приливы и отливы моря аналогичны дыханию живого существа и так же, как живые существа очищают свое тело, так и море выбрасывает на берег все инородные тела. Но

если маленькие островки могут быть затоплены или подняты на поверхность, то можно представить, что таким путем могут быть подняты или опущены материки.

Такие аналогии выполняли заместительную-эвристическую функцию, хотя выводы на основе их применения были в большой степени гипотетическими, так как не были выработаны критерии правомерности переноса информации с аналога на прототип.

По мере расширения использования аналогии развивались логические основы этого метода. Уже в античное время были выработаны некоторые условия правомерности переноса информации с аналога на прототип, в частности то, что у аналога и прототипа должно быть как можно больше общих существенных для них свойств.

В древнем мире и, особенно в период становления экспериментальной науки в новое время можно встретить предшественников современного моделирования несколько иного рода. Для того чтобы узнать о поведении какого-либо сооружения, строили уменьшенную копию, а затем по результатам ее испытаний судили об оригинале. В этом случае ученый уже не искал сходный объект в природе, а по определенным правилам конструировал его.

В естествознании близкими к упомянутым копиям сооружений являлись мысленные построения, основанные на идеализации некоторых свойств реальных объектов. Широко известны, например, мысленные модели Г. Галилея.

Исключительно велика роль И. Ньютона в разработке логических основ моделирования и теоретическом обосновании применения моделей в науке и технике. Изучение закономерностей механического движения тел привело И. Ньютона к выводу теоремы о подобии движений. Сопоставление двух явлений великий английский ученый проводил не только в пространственном (геометрическое подобие), но и временном аспекте, как подобие процессов. Ньютон писал об этом так: «...я называю движение подобными и, по прошествии пропорциональных промежутков времени, подобным образом расположенных тел подобными, когда в конце любых таковых промежутков времени относительное расположение этих тел подобно; предполагая, что частицы одной системы сопоставляются с соответствующими частицами другой» [3]. Результаты исследования одного процесса стало возможным обоснованно распространять на все подобные процессы.

Осознанию специфичности модельного способа познания помогло следующее обстоятельство. Механические представления, широко распро-

странившиеся в новое время, ученые все чаще стали применять для объяснения самых разнообразных процессов действительности. Ограниченность таких экстраполяций, их модельный характер становились все более очевидными. В некоторых случаях физические и химические эксперименты имели также ярко выраженную модельную окраску. Ж.-Л. Бюффон охлаждал раскаленные шары с целью определения длительности остывания Земли (сведения об этих опытах Ж.-Л. Бюффон поместил в 1-м и 2-м томах «Дополнений» к своей «Естественной истории», вышедших в 1774 и 1775 гг.). В конце XVIII в. шотландский ученый Д. Холл проводил эксперименты с использованием сукна и влажной глины. Путем бокового сдавливания этих предметов он получал складки, сходные с наблюдаемыми геологами в природе. Д. Холл также сплавлял изверженные породы для доказательства их происхождения из магмы. Получаемые сплавы в данном случае были не более чем моделями магмы.

Метод актуализма, сформулированный Ч. Лайелем, представлял собой научную основу использования современных процессов для оценки геологических процессов, протекавших в прошлом. Но этот метод только в том случае может быть определен как модельный, если утверждается именно сходство современных и древних процессов, а не их тождество, как полагал Ч. Лайель.

Итак, элементы, необходимые для становления метода моделирования, – проведение аналогии, уменьшенные копии, мысленный эксперимент, установление подобия процессов – постепенно накапливались в естествознании, с тем, чтобы привести к формированию нового метода исследования.

К середине XIX в. в естествознании был накоплен большой арсенал моделей и того опыта, который необходим для становления метода моделирования. Это время было началом оформления моделирования как научного метода исследования, связанного в содержательном плане с созданием неевклидовых геометрий, применением механических моделей в физике и разработкой теории подобия.

Вообще говоря, метод моделирования имманентен научному познанию и зачатки его можно проследить на всех стадиях развития науки. Но оформился он как строгий метод научного исследования лишь на достаточно высокой ступени науки, и это было связано со становлением определенных тенденций в самой науке.

Слово «модель» впервые было применено как научное понятие в связи с созданием неевклидовых геометрий. Ученые в тот момент впервые осознали, что научная мысль вышла за привычные рамки описания действительности, ее упрощения и обобщения. Для доказательства возможности

объективного существования противоречащих опыту и здравому смыслу построений пришлось в самой действительности создавать материальные модели, прототипами которых были бы неевклидовы геометрии (имеются в виду фигуры, на поверхностях которых выполняются соотношения неевклидовых геометрий). Наличие таких моделей определялось в какой-то мере степенью активности познания. В настоящее время знаковые модели-интерпретации в математике применяются очень широко и по своим функциям приближаются к моделям в технике, которые были известны давно, но приобрели научный статус только после разработки теории подобия в середине XIX в. Данная теория дала возможность при моделировании физических процессов заменить полуинтуитивные соображения строгим научным методом, устанавливающим необходимые и достаточные условия подобия. Понятие подобия близко в данном случае к определению его Ньютоном и используется для выявления общих закономерностей данного класса процессов одной природы на основании исследований некоторых представителей этого класса. Особенностью таких исследований является целенаправленность выбора подобной системы, фиксация подобия и экспериментирование с ней с соблюдением определенных правил.

С другой стороны, развитие метода моделирования было вызвано характерной для второй половины XIX в. тенденцией перехода от изучения вещей к изучению процессов, усложнением предмета исследований. Трудности, связанные с разработкой теории сложных процессов, толкали ученых на усиленные поиски идеализированных аналоговых представлений, которые служили бы мостом от эмпирических данных к теории. Такую роль, например, выполняли механические модели в работах Максвелла, Томсона и др.

Исторически первым типом вещественных моделей в естествознании были механические модели в физике, и именно они послужили эталоном для определения термина «модель». Но данный термин благодаря своему близкому отношению к некоторым тенденциям естествознания проявил склонность к расширению сферы употребления. В философской литературе, начиная с этого времени можно проследить употребление его в широком и узком смысле. Когда в начале XX в. выяснилась ограниченность применимости механических моделей для построения теорий сложных процессов, протекающих в микромире, и исследователи столкнулись с большими трудностями ввиду усиления момента абстрактности в познании, некоторые ученые, понимавшие термин «модель» в узком смысле, как только механические модели, стали призывать к отказу от моделей вообще. С другой стороны, ученые, которые понимали модель в широком смысле

слова, не ограничиваясь одним каким-либо типом моделей, а принимая за основу свойство модели быть сходной с предметом исследования, возводили моделирование в ранг общенаучного метода познания. Так, Н.А. Умов писал: «Все наше мировоззрение, от наиболее обыденного до наиболее возвышенного содержания, представляет собой собрание моделей, образующих более или менее удачный отклик существующего, соответствующих или не соответствующих тем вещам, которые имелись в виду при их построении».

На рубеже XIX–XX вв. все яснее стало проникать в научное мышление представление об относительности знаний. В свете этого теории стали рассматриваться не как окончательные истины в последней инстанции, а как этапы на пути проникновения в сущность явлений. Теория стала определяться как своеобразная модель действительности. Модели выполняли ту же основную функцию, что и теории, – давать звание и обеспечивать адаптацию человека к окружающему миру. Но модель, конечно, более широкое понятие, чем теория. Модель универсальнее, чем понятия теории, которые можно интерпретировать как подтвержденную модель. Понятие «модель» занимает первое место, поскольку модель необходима для становления теории. И оно имеет в общем плане значение не только для науки, не только познавательный, но и преобразовательный статус.

В рамках широкого и узкого понимания модели складывалось отношение к возможностям моделирования и в дальнейшем. Мориц Шлик (немецко-австрийский философ) принижал, вслед за Дюгемом, гносеологическую роль моделирования, поскольку, по его мнению, моделям обязательно должен быть присущ атрибут наглядности. Напротив, Л. Витгенштейн рассматривал и образ, и предложение как модели действительности. Исходной точкой подобного взгляда служило понимание Л. Витгенштейном модели как такого Предмета, у которого с оригиналом существует сходство структуры. Но широкое понимание модели в условиях господства неопозитивистских концепций приводило к утверждениям, что научные знания относятся только к моделям, а не к объективной действительности.

В XX в. метод моделирования во многом благодаря таким тенденциям современного естествознания, как математизация, кибернетизация, синтез знаний, получил исключительно широкое распространение. Это способствовало тому, что само понятие модели также проявило склонность к расширению сферы своего употребления. Спектр объектов, которые только в конкретных науках называют моделями, настолько широк (это и математическое выражение, и мысленный образ, и живые существа, и искусственные сооружения), что невольно возникает вопрос, есть ли основание назы-

вать столь различные предметы одним общим термином. Понятие «модель» нередко стало отождествляться с такими понятиями, как «аналог», «теория», «гипотеза», «описание», «схема» и другими. Именно поэтому, прежде чем говорить о значении метода моделирования, следует разобраться в том, что же можно понимать под моделью.

В философско-методологической литературе предложено несколько подходов к унификации понятия «модель». Прежде всего, напрашивается естественный, казалось бы, вывод о необходимости исключить из научного оборота те значения термина «модель», для выражения которых существуют другие термины. Однако эти устремления сталкиваются с определенными трудностями. Во-первых, перечисленные выше смежные термины не имеют однозначных общепринятых определений, и поэтому их использование для унификации понятия «модель» вряд ли прояснит картину.

Во-вторых, несомненно, что сферы употребления рассматриваемых терминов пересекаются и один и тот же предмет может быть с полным основанием назван в одном случае моделью, а в другом – теорией или гипотезой и т.д. Кроме того, четкие разграничительные линии между понятием «модель» и смежными понятиями не позволяет провести динамизм, заложенный в понятии «модель» и особенно заметный сейчас, в эпоху бурного распространения метода моделирования в современном естествознании.

При унификации понятия «модель» путем отбрасывания некоторых смежных понятий основная проблема – на это справедливо обращает внимание А.И. Уемов [4] – заключается в том, что трудно найти объективное основание отбрасывания понятий. Ученые, занимающиеся моделированием, обычно не дают определения термину «модель» и имеют в виду только тот конкретный тип моделей, который используют в своей работе. Нередко понимание, которое принимается тем или иным исследователем в отличие от иных, представленных в литературе, просто постулируется. Характерно, например, такое высказывание: «Понятие «моделирование» в современной философии трактуется весьма широко как некоторая образная форма мышления. Однако, по крайней мере, для практических целей, удобнее ограничить это понятие, используя его только применительно к материальным моделям, которые обладают физическим и математическим подобием» [5]. Вполне понятно, что такое ограничение тех или иных принятых значений ведет не столько к унификации терминологии, сколько к разнобою в определении модели.

Второй путь к унификации термина «модель» состоит в обобщении. «Охватывающее» понятие строится на основе всех или большинства определений данного термина, используемых в науке. Ценность «охватываю-

щих» понятий заключается в том, что они препятствуют толкованию термина в соответствии с тем конкретным типом моделей, который использует естествоиспытатель или инженер. Построение «охватывающего» понятия модели позволяет выявить общее, что содержат в себе различные его определения, и наметить основные контуры, в пределах которых развивается понятие «модель».

А.И. Уемов построил «охватывающее» понятие модели на основе изучения нескольких десятков определений в отечественной и зарубежной литературе. Он определяет модель как систему, «исследование которой служит средством для получения информации о другой системе» [4]. Н.М. Амосов, определение которого вошло в число рассмотренных А.И. Уемовым, считает, что модель может быть не только системой, но также структурой и программой [6]. А.И. Уемов оговаривается в данном случае, что, по его мнению, и структура и программа также являются системами. Трудность определения термина «модель» через термин «система» состоит в том, что система также не имеет однозначного определения, поэтому и термин «модель» продолжает в данном случае оставаться неоднозначно определенным. К.Е. Морозов, определение которого не использовалось А.И. Уемовым при выведении «охватывающего» понятия, утверждает, что модель не всегда является системой, и считает более предпочтительным термин «объект» [7]. Если же в соответствии с принципами построения «охватывающего» понятия не включать термин «система» в понятие модели, то определение А.И. Уеова модифицируется таким образом: модель есть предмет любого рода, который исследуется вместо другого предмета с целью получения каких-либо знаний о последнем.

В определениях модели (например у А.И. Уеова) часто нет указания на степень соответствия модели оригиналу. Это оправдывается следующими обстоятельствами. Любой предмет имеет какое-то сходство и различие с любым другим предметом и, следовательно, может рассматриваться в качестве модели любого другого предмета. Наперед нельзя сказать, что данный предмет никогда не будет моделью какого-либо другого предмета. Но предмет может быть назван моделью другого предмета лишь тогда, когда будет фиксировано сходство этих двух предметов, причем следует отметить, что формы («линии», критерии, степени), сходства развиваются и обобщаются в процессе развития науки. «Охватывающее» понятие модели не свидетельствует, конечно, о том, что степень соответствия модели прототипу, степень замещения ею прототипа не имеет никакого значения и не оказывает влияния на ценность получаемой информации. Однако данные характеристики должны рассматриваться с учетом специфики конкретного

предмета исследования и используемого вида моделирования. А.Н. Кочергин, определяя модели в качестве «заместителей объекта исследования, находящихся с последним в таком сходстве (или соответствии), которое позволяет получить новое знание об этом объекте», справедливо добавляет: «Что же касается специфики такого заместителя, характера и полноты сходства и соответствия модели и прототипа, цели, назначения и возможности модели и т.д., то они могут быть различными» [8].

В понятие модели часто не входят динамический и исследовательский моменты, но не следует забывать, что в науке это понятие функционирует в контексте другого понятия – моделирования. В термине «моделирование» находит свое отражение динамический момент – прежде всего исследование или, в более широком плане, оперирование предметом, в котором зафиксировано сходство с предметом исследования, т.е. с моделью, для получения знаний об оригинале. Поскольку термин «модель» неразрывно связан с термином «моделирование», предполагается, что сам выбор модели нужен для того, чтобы лучше узнать прототип. Под моделированием, таким образом, следует понимать совокупность всех операций, проводимых с моделью.

Моделирование не сразу появилось во всех областях естествознания. Первенство осталось за математикой, физикой, техническими дисциплинами. В биологию и науки о Земле метод моделирования проник в конце XIX – начале XX в. в результате развертывания отмеченной выше тенденции. Несколько более позднее распространение его в биологии и науках о Земле объясняется необычайно высокой степенью сложности предмета этих наук, хотя именно данное обстоятельство обусловило широкое применение метода моделирования в дальнейшем. Большая степень устойчивости гео- и биосистем делала классификацию вещей более важной задачей (особенно принимая во внимание роль анализа как основного метода научного исследования), нежели изучение механизма целостного функционирования систем на основе использования моделей. Слабость теоретической базы не давала возможности моделям, используемым в биологии и науках о Земле, выполнять функцию интерпретации теории, аналогично тому, как это происходило в математике. К тому же для моделирования гео- и биосистем нужен был, по-видимому, определенный набор моделей, выработанных такими науками, как физика и химия.

Возможности применения метода моделирования в слабо формализованных науках возрастают по мере развития других областей науки и техники. Медунин А.Е. проследил происхождение многочисленных моделей преимущественно в науках о Земле и пришел к следующему выводу: «Все

отрасли культуры – наука, техника и даже искусство – создают в совокупности, так сказать, «портфель моделей», из которых каждая конкретная наука черпает свои представления. Эволюция моделей происходит как аппроксимация абсолютной истины» [9].

Широкое применение метода моделирования в науках о Земле объясняется, помимо всего прочего, внутренней логикой развития этих наук. Условно в науках о Земле можно выделить три этапа: описательный, или географический, когда основное внимание уделялось описанию современных процессов (от возникновения географии до зарождения геологии), исторический, или геологический, когда на первый план вышло изучение истории Земли, и современный, или экологический этап, формирующийся в XX в. На этом этапе во главу угла снова ставится исследование современных земных процессов на наиболее высоком теоретическом уровне. Это отнюдь не означает, что не проводится описания земных процессов или изучения их истории. Оба эти аспекта входят в исследование Земли на современном этапе. Но описание само по себе уже не может полностью удовлетворить ученых. Исторический этап постепенно терял свою значимость по мере того, как обнаруживалась огромная продолжительность существования Земли. Исторический аспект сам по себе сейчас не является столь актуальным, так как, если выясняется, что процесс протекает медленно, в течение миллионов лет, изучение его теряет большую долю ценности, особенно если учесть динамичность современных процессов, вызванных практической деятельностью человека.

Существенной чертой первых двух этапов было то, что главным эмпирическим методом исследования служило наблюдение. Но если в античное время, когда природа рассматривалась как единое целое и существовала единая наука, не разделявшаяся с философией, методы, используемые отделами этой науки, также не расчленились, то на втором этапе произошло методологическое расслоение. Развитие таких естественных наук, как физика и химия, пошло по пути экспериментального исследования процессов. Эти науки, поднимаясь на высшие ступени абстрактности, создавали все более идеализированные модели сложных природных процессов. Впрочем, именно анализ был одной из причин успехов естествознания. И лишь в XX в., когда связь философии и фундаментальных наук с науками о Земле становится все более тесной и происходит возврат к целостному изучению природы, общенаучные методы все сильнее пробивают себе дорогу в науке о Земле. Важное значение уделяется изучению современных земных процессов, что способствует сближению методологического аппарата этих наук и наук физико-химического цикла.

Современный этап исследования Земли характеризуется тем, что лидеры естествознания – физика и химия способствовали созданию технических средств, которые дают основу для перехода от геологического наблюдения к геологическому эксперименту. Закладывается единство методологии современного естествознания. Методы и средства, применяемые в физике и химии, направляются в науки о Земле по мере того, как Земля все в большей степени становится объектом преобразовательной деятельности человека. Одним из таких методов и средств является моделирование.

Естественные объекты, изучаемые в биологии и науках о Земле, рассматриваются как сложные динамические системы подчас с нечеткими границами (это в большей степени относится к объектам исследования наук о Земле). В таких системах происходит, как правило, взаимное наложение нескольких физических, химических и биологических процессов. Для природных систем полностью справедливы слова У. Эшби: «Исследователи сложных систем должны заниматься упрощенными формами, ибо всеобъемлющие исследования бывают зачастую совершенно невозможны». Таких упрощенных форм, т.е. моделей, должно быть тем больше и типы их должны быть тем разнообразнее, чем сложнее изучаемое явление. Более того, понимая многоаспектность какого-либо явления или процесса, ученые сознательно рассматривают различные варианты объяснения этого явления, создавая, таким образом, набор моделей, каждая из которых рассматривает данный процесс с какой-либо одной стороны.

Отмеченные причины имели большое значение для превращения моделирования из вспомогательного способа исследования в один из основных методов наук о Земле. Характерным является то обстоятельство, что моделирование выступает при этом как бы стержнем, скелетом, вокруг которого объединяются новые тенденции в науках о Земле. Так, П. Хаггет и Р. Чорли, основываясь на концепции парадигм Т. Куна, пришли к выводу, что в настоящее время насущной стала проблема замены традиционной парадигмы географии, основанной на классификационных построениях, новой парадигмой, основанной на моделировании [10]. Для традиционной парадигмы, по их мнению, характерно накопление материала в региональном, отраслевом и историческом аспектах. Но сейчас эта парадигма уже не удовлетворяет ученых, во-первых, из-за все большего дробления изучаемой территории и увеличения числа параметров (что приводит к огромному росту географической информации, вмешательству географии в смежные отрасли естествознания и чрезмерному дроблению географии на отдельные дисциплины) и, во-вторых, из-за трудности обнаружения связи между одними и теми же параметрами на различных территориях. Про-

стую регистрацию фактов, характерную для старой парадигмы, авторы считают в настоящее время не только неудовлетворительной, но и невозможной.

Новую парадигму П. Хаггет и Р. Чорли предлагают основать на моделировании (под моделями ими понимаются «созданные исследователем в ходе тщательного отбора приближения (аппроксимации), которые позволяют, исключив случайные детали, увидеть в некоей обобщенной форме существенные, нужные или интересующие нас аспекты реального мира»). При этой парадигме упор делается на изучении процессов и свойств объектов, заслуживающих внимания с точки зрения целей, стоящих перед географом. Причины, по которым новая парадигма должна быть принята, по мнению П. Хаггета и Р. Чорли, три. Во-первых, новая парадигма успешно противостоит захлестывающему потоку информации в географии, отсекая данные, не нужные для конкретной цели исследования. Во-вторых, новая парадигма отвечает стремлению ученых к изящным и простым построениям. Наконец, в-третьих (это главное) новая парадигма обладает мощным потенциалом развития по сравнению с предыдущей за счет широкого использования математики и физики.

Следует отметить, что в концепции П. Хаггета и Р. Чорли отсутствуют некоторые основные причины повышения значения моделирования в науках о Земле. Лишь в одном месте авторы вскользь указывают на роль практической деятельности общества в становлении новых тенденций в географии: «Развитие техники приводило к стиранию уникальных черт районов, что затрудняло объяснение их географических особенностей местной спецификой».

Как представляется, необходимо дополнить тезис П. Хаггета и Р. Чорли о причинах становления в географии новой парадигмы, основанной на моделировании, распространив его к тому же на все научные направления, изучающие взаимоотношения общества с природной средой.

Значение метода моделирования в исследовании природной среды определяется еще и следующими практическими обстоятельствами. В эпоху интенсивного воздействия человека на природную среду описательный подход в науках о ней не может быть применим как ранее, поскольку он не способен в должной мере выявить динамику функционирования природных систем и тем самым служить основой целенаправленной человеческой деятельности. В то же время такой испытанный метод естествознания, как экспериментальный (хотя можно сказать, что практика и представляет собой крупномасштабное экспериментирование), не всегда может играть главную роль ввиду огромных пространственных размеров, временной

протяженности и сложнодинамического характера функционирования большинства природных процессов, а также в связи с опасностями для человечества, кроющимися в подобных экспериментах (сказанное, конечно, не должно давать повод к противопоставлению моделирования другим методам исследований, с которыми он находится в разнообразной связи. Напомним хотя бы о модельном эксперименте).

Метод моделирования выдвигается ныне на рубеж одного из основных методов познания, призванных дополнить аналитический и экспериментальный методы, поскольку перед учеными стоит задача целостного системного подхода к сложным развивающимся образованиям, к которым мало применим аналитический лозунг исследования: «Разделяйте факторы по одному», и в то же время прямое экспериментирование над которыми невозможно практически или по крайней мере очень рискованно в силу их слабой изученности. Вообще значение науки зависит от того, насколько динамичность ее развития соответствует росту технических возможностей человека изменять природную среду. Научные положения, справедливые для определенного состояния среды, могут стать непригодными для оценки ее в другой момент. Поэтому необходимо все большее количество информационно-прогностических моделей различных фрагментов природной среды. Моделирование необходимо для ускорения поиска оптимального режима функционирования природных и технических систем, для уменьшения риска вызвать необратимые изменения в экосистемах. Моделирование дает количественное описание связей и функционирования сложных природных систем в условиях, когда многие факторы недоступны наблюдению.

Анализ эволюции метода моделирования позволяет сделать вывод, что данный метод, впервые появившись в так называемых точных науках, затем распространился постепенно на биологию, науки о Земле и другие науки и в настоящее время обобщается на исследование такой сверхсложной системы, как биосфера.

На современном этапе развития науки мы сталкиваемся со все более широким применением моделирования. Чтобы понять причины этого, надо вновь обратиться к тенденциям, которые привели к возникновению данного метода. Можно заметить, что в центр исследования ставятся системы, рассматриваемые как сложно динамические с иерархической структурой и эмерджентными свойствами. Трудности их исследования в сочетании со свойственными нашему времени динамизмом и активностью познания определяют необходимость построения большого количества моделей, отражающих на данном этапе познания отдельные стороны данных систем.

Значение моделирования в науках о природной среде обитания человека определяется еще и следующими обстоятельствами, кроме тех, которые были изложены выше и которые характерны для естествознания вообще. Метод моделирования обеспечивает необходимый синтез знаний о природной среде, поскольку дает возможность привлекать модели из физики, химии и математики. Физико-химические и технические модели геологических и биологических систем принято называть масштабными, так как они, как правило, по своим размерам значительно уступают прототипу, т.е. создаются в измененном масштабе. Ценность масштабных моделей объясняется тем, что законы более низких структурных уровней организации материи в более или менее снятом виде справедливы и для высших, хотя по-разному проявляются на различных структурных уровнях. Часть информации при масштабном моделировании непосредственно переносится из отраслей физики, химии и техники, а некоторая дополнительная информация получается посредством изучения моделей.

Метод моделирования тесно связан с системным подходом, необходимым при исследовании природной среды, поскольку она обладает эмерджентными свойствами. Набор соподчиненных моделей позволяет отобразить сложную иерархическую структуру биосферы. В процессе построения моделей, характеризующих какую-либо сложную природную систему, происходит соединение данных наук о Земле, биологии и ряда других наук.

Если при редуccionистском подходе применяют, как правило, субстанциальные модели (т.е. имеющие тот же вещественный состав, что и оригинал), то при системном подходе используют структурные и функциональные модели, находящиеся с оригиналом в отношении структурного и функционального изоморфизма.

Первое направление, по которому системный подход, вносит свой вклад в синтез знаний о природной среде, основывается на выявлении структурного изоморфизма различных уровней организации материи. При этом объект, находящийся на одном из структурных уровней, рассматривается в качестве модели объекта, находящегося на другом структурном уровне. Такие модели называют предметно-математическими. Предметно-математические модели имеют то преимущество, что дают возможность изучать более легко управляемый процесс и проще получать точные результаты.

Поскольку предметно-математические модели основаны на аналогичности математического аппарата, описывающего протекание разнородных

процессов на модели и оригинале, они требуют в качестве предпосылки логико-математическую модель.

Второе направление системного подхода, связанное с осуществлением комплексных программ исследования сложных природных объектов, также требует, помимо данных различных наук, привлечения универсального языка для обсуждения представителями различных наук общих проблем – языка математики и кибернетики. В настоящее время созданы логико-математические модели, в которых принимается во внимание взаимодействие живых и косных компонентов природной среды. Здесь, прежде всего, следует упомянуть модели биогеоценозов.

Новые необычайные перспективы открывает перед исследованием природной среды моделирование на электронно-вычислительных машинах, для которого характерен функциональный подход к объектам. Моделирование на ЭВМ обладает в плане синтеза знаний ценным свойством – универсальностью. Это позволяет объединить в модели данные, взятые из различных наук, что особенно важно для моделирования подсистем биосферы, включающих вместе гео-, био- и социальные факторы.

Конечно, соединение данных различных наук в компьютерной модели – задача далеко не тривиальная. Появление новых видов моделирования, универсальных для научного познания, не исключает развития специфических видов, таких, как, скажем, натурное моделирование. Необходимость натурального моделирования вытекает из качественной специфики природных систем, для которых характерна эмерджентность – наличие у системы свойств, отсутствующих у составляющих ее элементов. Развитию натурального моделирования, при котором моделью служит какой-либо природный процесс, протекающий в естественных условиях, способствует дальнейшее совершенствование собственно теории подобия, распространение ее на существенно нелинейные системы и выделение интегральной меры подобия на базе разрабатываемой в кибернетике теории распознавания образов. В последние десятилетия наметилась тенденция к применению теории подобия для сопоставления геологических процессов, созданию основ теории геологического подобия [11].

Однако, как бы ни совершенствовались логические основы натурального моделирования, его особенностью остается наличие параметров, соответствие которых установлено интуитивно. Это, несомненно, уменьшает объяснительную силу натурального моделирования, но в то же время усиливает его экстраполяционно-прогностическую функцию. Если процесс на модели протекает идентично процессу в прототипе, то причиной может быть соответствие как явно, так и неявно учитываемых параметров. Поэтому объяс-

нение может показаться ошибочным. Но наличие параметров, присутствующих в неявном виде, полезно для прогноза и обеспечивает преимущество натурального моделирования перед масштабным и компьютерным в выполнении экстраполяционно-прогностической функции.

Натурное моделирование также обеспечивает возможность проверки самого математического выражения, лежащего в основе сходных процессов. Оно может выступать и в роли модельного ретросказания, выполняя ретросказательную функцию в том случае, если делается попытка получить информацию о древних процессах на основании изучения процессов современных.

Итак, метод моделирования открывает путь к гипотезам, к новым экспериментам, подтверждающим и уточняющим данную модель. Моделирование выражает динамизм познания и в то же время фиксирует отдельные этапы на пути к адекватному отражению действительности. Аппроксимационная функция, выражающая общий ход познания от сильно упрощающих структуру процесса моделей ко все более адекватным действительности, для физико-химических моделей, используемых при изучении природной среды, заключается в последовательном создании моделей со все большим числом параметров и экспериментировании с ними в условиях, все более близких к природным. Применительно к натурным моделям снятие аппроксимации заключается в рассмотрении все большего количества параметров модели, что повышает точность моделирования и дает возможность полнее использовать математический аппарат теории подобия. Что касается логико-математических моделей, то для них снятие аппроксимации происходит в том случае, когда математическое выражение не просто изучается в качестве заместителя природного объекта, а выступает как неотъемлемая часть теоретического отражения данного фрагмента объективной реальности.

Таким образом, моделирование дает предварительное объяснение и предсказание поведения природных систем в условиях, когда теоретический уровень исследований природной, среды еще недостаточно высок. Между прочим, в этом аспекте моделирование всегда будет в определенном смысле дополнять имеющиеся теоретические построения (характеризуя тем самым диалектику модели и теории по только в понятийном плане, как об этом говорилось выше, но и в плане содержательном), так как определенный разрыв между практическим воздействием на природу и теоретическим осмыслением последствий такого воздействия сохраняется и все сложные качественно новые варианты перестройки биосферы обязательно должны моделироваться.

1.2. Значение моделирования во взаимоотношениях человека и природы

Единство экологической проблемы определяется важным связующим звеном – качественно новым положением человека по отношению к природной среде. До недавних пор человек по преимуществу приспособлялся к естественным ландшафтам и если изменял природную среду, то преимущественно стихийно. Сейчас воздействие человека на природу в большинстве случаев представляет собой не просто попытки централизации неблагоприятных влияний среды его обитания и ее стихийное изменение, а глобальную реконструкцию природы путем материализации идеальных моделей потребного будущего, превращения их в закономерность.

Человечество перешло своеобразный Рубикон, и такие выражения, как «человечество па переломе», вынесенное М. Месаровичем и Э. Пестелем в заглавие книги по глобальному моделированию, свидетельствуют о том, что отдельные представители и группы общественности осознают свершающийся поворот и ныне происходит перелом в сознании, отражающий действительную ситуацию во взаимоотношении человека с природной средой [106].

Сколь бы громко ни раздавались в этот ответственный и сложный период существования человечества голоса, призывающие к свертыванию воздействия на природу, общество, несомненно, будет стремиться к созданию среды обитания, в наибольшей степени, удовлетворяющей его истинные духовные и материальные потребности. Конечно, в силу неразрывности духа и плоти, человека и природы многие существенные черты нынешней среды обитания, частью которой человек является, сохранятся. Тем не менее, развитие общества требует прогресса и в данной сфере. Человечество будет и в дальнейшем изменять среду обитания, развивая таким путем свою сущность и сущность Универсума.

Здесь сталкиваемся со следующим обстоятельством. Как пишет С. Лем, в условиях быстрого и неожиданного изменения среды преимущество получают животные с центральной нервной системой, действие которой основано на создании пробных моделей ситуации (гомеостатические устройства «второй ступени»). Руководствование этими моделями таит в себе опасность, так как модель может быть ошибочна. Таким образом, «цена преимуществ организмов второго типа – риск». Подобные рассуждения можно распространить и на человека, поскольку для него в большей степени, чем для животных, характерно преобразование действительности на основе создания «моделей поведения» и «моделей потребного будущего».

Конечно, отсюда не следует вывод о фатальной неизбежности гибели человечества, как утверждается в теории катастроф цивилизаций фон Хорнера, согласно которой чем больше время существования цивилизации, тем скорее она должна погибнуть. Однако, как указывалось выше, увеличение масштабов человеческой деятельности в условиях, когда невозможно предвидеть все реакции природной среды на внесенные в нее изменения, влечет за собой увеличение риска необратимых катастрофических изменений экологической ситуации.

Риск увеличивает еще одна причина, тесно связанная с предыдущей. В качестве основного источника экологически кризисной ситуации является то обстоятельство, что в настоящее время исчерпан тот экологический запас, который выручал человечество в случае ошибочных действий, например, обеспечивал возможность перейти на новые земли, если используемые подвергались эрозии. Сейчас такого экологического запаса на нашей планете нет, и это также увеличивает риск во взаимоотношении человека и природной среды и требует наличия определенной экологической выдержки, а также совершенствования науки с целью уменьшения риска человеческой природообразующей деятельности. Поскольку опасность нежелательных последствий изменения природной среды возрастает, постольку методы исследования системы «человек – природная среда» должны совершенствоваться. В качестве приема, который следует развивать в современной науке с целью уменьшения опасности экологически нежелательных последствий, выступает метод моделирования, важный в настоящее время и с теоретической, и с практической стороны. Он является одним из универсальных средств как отражения, так и конструирования действительности, и значение его растет пропорционально увеличению риска в связи с воплощением творческих природообразующих идей человека в жизнь. Моделирование в самом широком смысле представляет собой один из важнейших способов познания и преобразования мира и самого человека, позволяющий представить познавательные и преобразовательные задачи в определенной целостности.

В преобразовательном смысле модель есть то, что А.Ф. Лосев называет порождающей моделью [12], т.е. образец, в соответствии с которым и по которому происходит преобразование. Моделирование представляет собой практическое осуществление идеальных образцов (идей), которые формируются в мозгу человека, формируются свободно, но не волюнтаристски, а как определенный уникальный синтез природы человека и внешней природы, аккумулирующий опыт человеческой природообразовательной деятельности. Моделирование в этом смысле есть инструмент создания и

проверки идеальных моделей, с помощью которых человек стремится преобразовать мир. И совершенствование метода моделирования выступает как залог успешности преобразования мира в соответствии с идеалами человечества.

В плане задачи оптимизации взаимодействия общества с природной средой моделирование как средство познания выполняет важную миссию, так как очевидно, что чем дальше будет углубляться познание, тем с большим знанием дела будет происходить процесс преобразования мира. Но этим роль метода моделирования не исчерпывается. В рамках биосферы и отдельных экосистем моделирование выступает не только как метод познания, но и как средство преобразования биосферы. Отметим, что под моделированием как средством преобразования понимается не только оперирование с моделью для последующего практического преобразования, но и использование самого преобразования действительности в качестве модели для последующей практической деятельности.

Преобразовательная функция не является новой для моделирования. Такую роль играют образцы, проектируемые в промышленности для изготовления впоследствии серийных однотипных изделий, модели различных сооружений и т.д. Своеобразие моделирования сложных систем, включающих природные и социальные подсистемы, видится нам в неразрывной слитности в модели практического и теоретического аспектов. Модель, нацеленная только на преобразование природной среды, обесценивалась бы в связи с незнанием законов ее развития, а модель сугубо познавательного характера могла бы потерять большую долю своей значимости, так как активная деятельность человека параллельно изменяет сам объект познания.

Более того, знание окружающей действительности, даже если предположить его относительную полноту (хотя очевидно, что воздействовать на природную среду приходится в условиях ее слабой изученности), еще не гарантирует успеха практической деятельности, поскольку необходимо знать реакцию на нее объекта. Крепнущее единство познавательной и преобразовательной деятельности человека, вообще характерное для XX в., находит свое отражение и в применении моделирования. Способность его выполнять одновременно гносеологические и практические функции была причиной усиления внедрения моделирования в науки о природной среде по мере уплотнения системы функциональных связей между обществом и природой.

Построение, экспериментирование и экстраполяция данных с модели как средства преобразования существенно отличается от оперирования с моделью как средством познания. Начальные и граничные условия моде-

лирования и характеристики подобия в этом случае определяются спецификой будущей реконструкции природной среды.

Модель как средство преобразования характеризуется не только соответствием с объектом, который должен быть преобразован. Она соотнобразуется с планирующей деятельностью человека, а следовательно, с теми орудиями труда, которыми общество обладает. В модели образуется единство свойств, которые подобны свойствам прототипа, и свойств, выражающих материализацию целевой установки человека. Моделирование в этом случае имеет смысл, потому что прототип и модель рассматриваются как человеческая чувственная деятельность, практика. Поэтому важным для обоснования моделирования будет не только подобие модели прототипу, но и подобие результата модельной деятельности результатам оперирования с прототипом. А.П. Кочергин утверждает, что модели можно разделять на объектные (когда сходство устанавливается между объектом-моделью и объектом-прототипом) и деятельностью (когда сходство устанавливается между видами деятельности, в которые включены модель и прототип) [13].

Например, мы можем использовать в качестве натурной модели при исследовании участка под строительство сооружения участок, на котором уже было осуществлено строительство. Отсутствие подобия модели (в ее окончательной стадии) прототипу не является препятствием для моделирования. Результаты модельной деятельности на каждом отрезке моделирования сопоставляются с результатами оперирования оригиналом при учете, разумеется, конечной цели преобразования прототипа.

Моделирование после задания жесткой целевой установки оправдывало себя до тех пор, пока человечество не начало осуществлять огромные преобразования на больших территориях земного шара. Чем крупнее территория, тем разнообразнее могут быть пути ее изменения. В связи с этим моделирование целесообразно использовать и для выбора целей преобразования огромной территории, не исключая его использования для выбора целей преобразования природной среды в целом. Своеобразие современного периода моделирования и состоит в том, что до недавнего времени цели и средства преобразования, как правило, не зависели от результатов моделирования, а ныне стала учитываться обратная связь от моделирования к целям и средствам преобразования и моделирование предмета преобразования стало рассматриваться в единстве с моделированием целей и средств преобразования. Возможно, это высшее, на что способно моделирование.

Соответственно должны обобщаться, на наш взгляд, и логические основы метода моделирования. Представляется справедливым мнение Б.А. Вороновича о том, что «практика целеполагающего моделирования

выдвигает необходимость создания специальной теории подобия, которая, в свою очередь, могла бы сыграть благотворную роль в обосновании процесса построения и использования модельных целей. Сходство целей может определяться по предметам, средствам и результатам, которые они предполагают».

Между моделированием и непосредственной практической деятельностью человека, как и между моделью и орудием труда, существует глубокая аналогия. Модель так же, как и орудие труда, ставится человеком между собою и предметом труда. Отличие же модели от орудия труда в том, что последнее имеет большее сходство с человеком (являясь зачастую как бы продолжением человеческих органов), чем с предметом труда, в то время как модель имеет большее сходство с предметом исследования. В том случае, однако, когда модель является средством преобразования, намечается тенденция к более глубокому сходству между моделью и орудием труда. В этом случае они оказываются связанными звеньями опосредования от человека к предмету труда, причем между человеком и орудием труда могут стоять еще модели орудий труда. Таким образом, с повышением роли преобразовательной функции моделирования отличие модели от орудия труда имеет тенденцию уменьшаться, и в то же время по мере увеличения технической мощи человека повышается роль самого человека как субъекта моделирования.

Сознательный выбор путей преобразования природы требует применения различных видов моделирования и типов моделей, включая сюда известное разделение моделей на субъективные и объективные. Все виды моделирования, направленные на познание природы, находят применение при преобразовании биосферы. Применение различных типов моделей и видов моделирования способствует, с одной стороны, повышению теоретического статуса науки и синтезу знаний, а с другой – обеспечивает столь необходимую в наше время координацию преобразовательной: и познавательной сторон человеческой деятельности.

Как было отмечено, идеальные модели потребного будущего всегда формируются в мозгу человека. Чем крупнее планы преобразования, тем соответственно многограннее эти модели. Зависимость человека от объективных законов развития природы рождает потребность в материализации идеальных моделей, в построении вещественных моделей поведения и потребного будущего.

В философской литературе принято все модели делить на две большие группы: модели-интерпретации, преобладающие в математических науках, и модели-описания, свойственные эмпирическим наукам. В модели как

средства преобразования природной среды оба эти типа выступают в единстве. Идеальная модель потребного будущего формируется на основе изучения действительности и более абстрактна, чем прототип. Вещественная модель потребного будущего, построенная на основе идеальной, с полным правом может быть отнесена к моделям-интерпретациям, поскольку она конкретнее прототипа.

Масштабная модель необходима, когда хотят определить последствия человеческой деятельности в интервале времени большем, чем продолжительность жизни одного поколения. Масштабное моделирование позволяет в какой-то мере избежать чрезмерного риска при укрупнении масштабов человеческой деятельности.

Той же цели служит натурное моделирование в естественных условиях. Оно может осуществляться с целью изучения какого-либо обособленного процесса, но гораздо продуктивнее комплексные исследования с участием представителей различных естественных, технических и общественных наук, позволяющие моделировать также и связи между процессами, протекающими на данной территории. В этом случае натурная модель может быть использована для оптимизации большой по масштабу территории.

Нельзя не согласиться с Г.Ф. Хильми, который, писал, что «сознательный выбор путей преобразования природы потребует создания теории ее преобразования и, вероятно, опытного моделирования в природных условиях на специальных крупных полигонах».

Интересна концепция подражания человеческой деятельности в определенных аспектах связям, которые существуют в самой природе. В ее рамках выдвигаются требования создания замкнутых технологических циклов, подобных биологическим круговоротам в природе. Большой опыт накоплен бионикой. Предложено создание новой науки – геоники, которую определяют, как науку о подобию организации производства естественному круговороту веществ в природе. Как и бионика, геоника (особенно на современном уровне понимания человеком природных процессов) была бы полезна. В этом случае в роли моделей выступают естественные процессы и явления.

При разработке способов преобразования, сложных природных систем, внутренней причинный механизм функционирования которых не ясен, применимы методы физического, математического и кибернетического моделирования. В этом плане большую роль в развитии моделирования играет ЭВМ. Для оптимизации взаимоотношений общества с природной средой необходим такой вид моделирования, который дал бы возможность учесть огромное количество взаимосвязанных переменных и позволил бы

объединить данные многих дисциплин. К тому же необходимо не просто суммирование отдельных процессов, но и учет взаимодействия между ними. Осуществить это позволяет моделирование на ЭВМ. ЭВМ дает количественный прогноз отдаленных последствий принятия различных альтернативных решений. Изучение поведения машинной модели помогает найти эффективные пути к достижению оптимального результата на оригинале.

К достоинствам моделирования на ЭВМ по сравнению с реальным экспериментом следует отнести его относительно небольшую стоимость и возможность модификации модели и возвращения ее в исходное положение с помощью минимальных усилий. ЭВМ позволяют моделировать процесс во времени и включать в модель элементы истории системы, что особенно важно для моделирования необратимых процессов. Переходить к компьютерному моделированию можно на самых ранних стадиях исследования, и в процессе работы картина на «выходе» машины подсказывает, какие эксперименты необходимо проводить и как именно следует видоизменять модель, чтобы она становилась более адекватной прототипу.

Если модель как средство познания используется для получения прогноза функционирования, изменения и развития какого-либо процесса, то модель как средство преобразования необходима, прежде всего, для управления этим процессом. Прогноз, который в данном случае используется, носит характер нормативного. Соответственно моделирование такого рода может быть названо нормативным. Информация в кибернетических системах, живых организмах, популяциях и человеческом обществе не только воспринимается, но и преобразуется с формированием на ее основе нормативной модели, которая затем воплощается в действительность. Применение в качестве нормативной модели математическо-кибернетической и другого типа моделей в принципе существенно расширяет преобразовательные возможности человека.

Говоря об общем значении компьютерного моделирования для решения проблем взаимоотношения общества с природной средой, следует отметить ускорение поиска наиболее приемлемого решения с помощью быстродействующих электронно-вычислительных машин. Человечество получает возможность в некотором роде как бы «ускорить» свою адаптацию к природе, на которую ему было отведено «всего» несколько миллионов лет. Руководствуясь в своей деятельности единственным, по существу, методом «проб и ошибок» (если: понимать его в самом широком смысле), человечество должно делать много проб на многих моделях, прежде чем совершить одну реальную пробу, так как с ростом технических возможностей растет ущерб от ошибки.

Моделирование на ЭВМ выдвигается в качестве одного из мощных современных модельных средств, дополняющих другие. Однако возможности его не следует и преувеличивать, противопоставляя другим видам моделирования, что свойственно некоторым ученым, и выражено, в частности, в так называемом контринтуитивном принципе Дж. Форрестера, в соответствии, с которым поведение сложных динамических систем противоречит интуиции человека и может быть адекватно описано лишь с помощью формализованных моделей. По мнению Дж. Форрестера, большие системы ведут себя не так, как подсказывает интуиция человеку. В обоснование данной точки зрения он ссылается на то, что структура этих систем образована длинными цепями причинно-следственных связей, причем причина и следствие разделены в пространстве и времени.

Вопрос этот исключительно важен, так как от него в огромной степени зависит общая оценка возможностей компьютерного моделирования. Дж. Форрестер замечает: «Человеческий ум в высшей степени приспособлен к анализу элементарных сил и действий, составляющих систему, и очень эффективен при идентификации структуры сложной ситуации. Но опыт показывает, что наш разум не приспособлен для оценок динамических последствий в тех случаях, когда части системы взаимодействуют друг с другом». Что имеет в виду Дж. Форрестер? Он прав в том случае, если речь идет о рассудочном мышлении, которое не может подняться до целостного осмысления ситуации. Такой разум (увы, слишком распространенный в современную эпоху) действительно не способен предвидеть результаты целостного функционирования системы и в попытке, скажем, предотвратить загрязнение может усилить его (так называемое загрязнение в результате применения средств борьбы с загрязнением). Слаб односторонний, чрезмерно абстрактный и аналитически направленный ум, но такому не очень поможет и ЭВМ. Скорее сделает его своим рабом.

Контринтуитивный принцип поведения сложных динамических систем, провозглашенный Дж. Форрестером, привел к опасности «компьютерного фетишизма», когда ЭВМ рассматривается в виде некоего беспристрастного оракула, свободного от человеческих слабостей и способного безошибочно предвидеть будущее, к опасности овеществления и упрощения мысленных моделей под влиянием машинных, признаваемых идеальными, в то время как компьютерная модель не более чем один из инструментов предвидения будущего, результаты оперирования которым зависят от исходной мысленной модели.

Интуиция всегда была мощным средством познания и предвидения, и, если поведение каких-либо искусственных систем противоречит ей, это

скорее говорит о том, что данные системы нуждаются в определенной корректировке их параметров. Как справедливо отмечают Месарович и Пестель, контринтуитивное поведение не есть следствие сложности системы, а результат беспорядка в ней, который ведет к потере интуитивного понимания связанных частей системы. Формализованные модели не следует противопоставлять интуитивным. Правильней стремиться к их синтезу, с тем чтобы первые могли служить важным подспорьем вторым, без которых познание вообще невозможно.

Одно из направлений современных методологических дискуссий – возможности моделирования вообще и компьютерного моделирования в частности в его отношении к моделированию мысленному. В ответ на принципиальную критику моделирования справедливо отмечают, что в процессе принятия решений люди, часто неосознанно, пользуются моделями, поскольку не обладают абсолютным знанием окружающей действительности. Подчеркивание полезности и неизбежности применения моделирования весьма уместно, поскольку в ходе дискуссии высказывалась негативная оценка моделирования как способа познания и преобразования действительности. Но более важное направление дискуссии касается соотношения полезности компьютерных и мысленных моделей.

Группа Д. Медоуза, основывавшая свою работу на концепции явного предпочтения компьютерного моделирования, акцентируя внимание на позитивных аспектах числовых моделей, подчеркивала, что в них каждое предположение записывается в точной математической форме и доступно всеобщему рассмотрению, а вычислительная машина проводит все операции гораздо быстрее человека и без ошибок. Основное преимущество численной модели над мысленной, интуитивной моделью Медоуз и его соратники видят в том, что результаты работы с такой моделью всегда логически следуют из ее посылок.

Многочисленные критики «Пределов роста», напротив, подчеркивали отрицательные стороны моделирования на ЭВМ. Так, член Сассекской группы, проводившей машинную проверку модели Медоуза, Р. Голуб, высказывает следующие критические соображения относительно возможностей машинного моделирования. Факторы, которые недоступны представлению в количественной форме, пишет он, например социальные изменения, вообще не привлекаются к рассмотрению, а это обстоятельство может привести к тенденциозности моделей. Далее, числовые модели всегда чрезмерно упрощают, приспособляя их к возможности современной вычислительной техники. Некоторые параметры моделей приходится рассматривать как неизменные, что противоречит действительности. Наконец,

моделирование дает только видимость точности количественной оценки отношений между переменными.

Некоторые критики доходят до того, что объявляют использование ЭВМ для анализа глобальных проблем взаимоотношения человека и природы, по существу, попыткой подменить понимание сложных процессов вычислением, однако большинство, сопоставляя положительные и отрицательные стороны моделирования на ЭВМ, считают, что этот метод в принципе является хорошим дополнением к процессу мысленного моделирования. Попытки моделирования сложных систем с помощью ЭВМ, подчеркивает К. Фримен, находятся пока на примитивном уровне, но нужно стремиться к созданию численных моделей, более адекватных действительности. При этом, продолжает он, остается в силе положение, что машинная модель не может быть лучше мысленной модели, на основе которой она создана. Формальные модели дополняют мысленные, отмечает К. Фримен, но, конечно, не могут их заменить. Формальная модель не беспристрастный оракул, а скорее аргумент в политической борьбе, поскольку любая модель социальной системы неизбежно отражает позицию и ценностные установки ее автора.

Н. Фой в противоположность К. Фримену считает, что для того, чтобы быть полезной, модель не обязательно должна обладать достоверностью и, более того, к этому и не следует стремиться. Когда модель усложняют, стремясь к адекватному отражению действительности, это создает, по мнению Н. Фой, дополнительные трудности, так как, во-первых, специалисты различных областей знания, вероятно, никогда не смогут договориться обо всех исходных предположениях, необходимых для построения модели столь сложных масштабов, а во-вторых, когда модели слишком сложны, они становятся неустойчивыми и при некоторых комбинациях переменных дают бессмысленный результат. Таким образом, в противоположность контринтуитивному принципу Дж. Форрестера Фой утверждает, что именно компьютерные модели сложных систем оказываются малоэффективными. По мнению Фой, чем больше размеры моделируемой системы, тем более продолжительное время проходит с момента воздействия на систему до проявления последствий данного воздействия. Иными словами, время запаздывания растет, а время эффективного управления социальными системами сокращается. Последнее обстоятельство в принципе уменьшает эффективность моделирования как такового, хотя без моделей планировать сложные структуры вообще невозможно.

Следует иметь в виду, что моделирование на ЭВМ отнюдь не отменяет (даже применительно к такой сложной системе, как система взаимоотно-

шений общества и природной среды) прежних способов моделирования, которые широко применяются и на которых, собственно, строилось и строится до настоящего времени планирование человеческой деятельности. Моделирование на ЭВМ дополняет другие виды моделирования по тем параметрам, по которым компьютер превосходит человека: по возможностям быстро и логически безупречно просчитать огромное количество вариантов развития системы с фиксированными начальными данными и известными представлениями о его структуре, граничных условиях, законах развития. В этом смысле правильнее говорить не о необходимости замены всех видов моделей машинными при попытке смоделировать развитие сложной динамической системы (именно такова точка зрения Дж. Форрестера и некоторых других сторонников широкого применения моделирования на ЭВМ), а о дополнении традиционных типов моделей компьютерными, в частности о создании комплексных диалоговых систем «человек–машина», моделирующих изучаемый объект.

В широком применении моделирования на ЭВМ для решения проблем познания и преобразования природной среды можно видеть соединение двух тенденций, характерных для современной науки, – кибернетизации и экологизации. ЭВМ в настоящее время применяют для выбора оптимальных вариантов использования различных видов ресурсов, для предсказания последствий загрязнения природной среды различными веществами и т.п. Все большее распространение получают комплексные модели управления биогеоценозами, эколого-экономические модели вплоть до комплексных математических моделей рационального природопользования в пределах целых регионов. Классические результаты использования компьютерного моделирования для управления использованием различных природных ресурсов приведены в работе К. Уатта. В частности, программа управления системой ресурсов большого водного бассейна принимает во внимание такие факторы, как урожай, собранный с орошаемой площади; количество вырабатываемой электроэнергии; ущерб, который могли бы причинить паводки и который удалось предупредить сооружением соответствующих плотин; использование рек и водоемов в целях отдыха и др. Машина моделирует поведение около 250 переменных, подбирая такую специфическую последовательность и комбинацию процессов в системе, которая максимизирует функцию, представленную показателем экономической эффективности многоцелевой системы водных ресурсов, эксплуатируемых в течение нескольких лет.

Следует отметить, что намечается тенденция к тому, чтобы строить модели все более комплексные и все больших по размерам регионов. Дело

в том, что критерий оптимизации системы каких-либо ресурсов зависит от стратегии использования ресурсов вообще и многих других факторов, связанных с природообразовательной деятельностью человека. Поэтому оптимальный вариант использования данного вида ресурса может оказаться неоптимальным в рамках более общей задачи. В этой связи наиболее целесообразным выглядит моделирование не только отдельных фрагментов природной среды, а природной среды в целом, ибо полученные при этом результаты позволяют лучше исследовать модели природных систем, расположенных на более низких структурных уровнях. Поскольку биосфера рассматривается как единое целое, постольку и действия человека по ее познанию и преобразованию (это относится и к моделированию) должны находиться в определенном единстве.

В последнее десятилетие предприняты попытки рассмотрения с помощью моделирования на ЭВМ состояния и тенденций глобального развития системы взаимоотношений общества с природной средой.

2. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК МЕТОД ОЦЕНКИ СОСТОЯНИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

2.1. История развития математического моделирования в экологии

Одной из первых и выдающихся работ в области теоретической экологии была книга Альфреда Джеймса Лотки (1880–1949) «Элементы физической биологии», высокую оценку которой дал Чарльз Кристофер Адаме (1873–1955) — автор первого появившегося в мире руководства по экологии животных. Ещё раньше на работы Лотки обратил внимание один из основателей популяционного направления в экологии Раймонд Перл (1879–1940) [28].

Оценивая труд Лотки с современных позиций, его следует признать классическим. Развивая общие представления об организации, эволюции и динамике биологических систем, Лотка приводит уравнения, описывающие взаимодействие популяций (в частности, связанных отношениями типа «хищник – жертва»).

Помимо А. Лотки в разработке математических моделей взаимодействующих популяций участвовали и его современники Вито Вольтерра (1860–1940) и Владимир Александрович Костицын (1883–1963). Первые публикации А. Лотки, как и работы В. Вольтерра, относятся к двадцатым годам XX в. В 1934 г. выходит двухтомная монография А. Лотки «Аналитическая теория биологических ассоциаций», в ней автор суммирует свои исследования в области динамики популяций. Подходы, принципы построения и анализа моделей были близки к тем, которые развивал В. Вольтерра. В настоящее время уравнения, описывающие взаимодействие популяций, называют уравнениями Лотки – Вольтерра. В основе книг В.А. Костицына (одна из которых – «Математическая биология» – вышла в 1937 г.) лежат исследования В. Вольтерра, который дал высокую оценку не только изложению основных проблем популяционной динамики, но и личному вкладу В. А. Костицына в это новое направление научных исследований.

Таким образом, В. Вольтерра – является «отцом» нового научного направления. Ценность его экологических моделей заключается в том, что они были основой, на которой быстрыми темпами начала развиваться математическая экология. Появилось большое число исследований различных модификаций системы «хищник – жертва», где были построены более общие модели, учитывающие в той или иной степени реальную ситуацию в природе. Такая общая математическая модель, позволяющая учитывать

реальное поведение популяций и вместе с тем проводить качественный анализ ее решений, была предложена в 1936 г. академиком Андреем Николаевичем Колмогоровым (1903–1987).

Задачей о биологических равновесиях, возникающих при изучении эпидемий, занимался Е. Мартини. Он вывел уравнения, описывающие ход болезней при иммунизации, когда как бы устанавливается равновесие между патогенным началом и иммунизирующим действием.

Небольшой набор разных математических моделей, составивший в 20–40-х годах XX в. основу «экологической теории», относился не ко всей экологии, а только к популяционному подходу – распределению организмов в пространстве-времени. Другая традиция в экологии – системный подход, базирующийся на изучении роли организмов в процессах трансформации вещества и энергии в природе. Необходимо отметить публикацию статьи американского исследователя Раймонда Линдемана (1915–1942) «Трофодинамический аспект экологии», получившей широкую известность. Он определил экосистему как «совокупность физико-химико-биологических процессов, протекающих в любых масштабах пространства и времени». В этом кратком определении рассматривается возможность разномасштабного выделения экосистем в зависимости от конкретных особенностей круговорота вещества и энергии, функциональная, а не структурная основа экосистемы, подчеркивается теснейшее взаимодействие физических, химических и биологических процессов. Для работ экосистемного подхода чрезвычайно характерен высокий уровень эмпиризма, в частности, стремление дать всестороннее описание и количественные оценки изучаемых процессов.

Одна из главных задач математической экологии — проблема устойчивости экосистем. Экосистема «устойчива» или «стабильна», если относительная численность представителей различных видов в течение достаточно длительного времени либо остается неизменной, либо регулярно возвращается к одному и тому же соотношению.

Совершенно очевидно, что устойчивость в этом смысле — свойство относительное, а не абсолютное, ни одна экосистема не может сохранять устойчивость в течение бесконечно долгого времени, однако некоторые из них более стабильны, чем другие.

С устойчивостью экосистем тесно связаны вопросы управления этими системами, так как вмешательство человека в функционирование биологических сообществ должно проходить таким образом, чтобы воздействие на экосистему осуществлялось с учетом сохранения устойчивости равновесных состояний системы.

При этом возникает задача управления системой в целях перевода ее из одного устойчивого состояния в другое. Поэтому наряду с вопросами устойчивости в математической экологии рассматривают оптимизационные задачи управления экосистемами.

В XX в. появилось учение замечательного естествоиспытателя и глубокого мыслителя Владимира Ивановича Вернадского (1863–1945). Вернадский разработал теорию, которая вскрывает глубокие взаимосвязи между развитием жизни и эволюцией нашей планеты, заложил основу количественной оценки огромной роли живых организмов в энергетике и геохимии поверхности Земли.

Для людей XXI в. большое значение имеют идеи Вернадского о жизни как явлении космическом, о фазах ее эволюции и о ноосфере.

Ноосфера – новая высшая стадия биосферы – сфера разума, связанная с возникновением человечества на Земле, оказывающего определяющее воздействие на эволюцию Земли. Первой математической работой, относящейся к проблемам ноосферы, была книга В.Л. Костицына – соратника и последователя В.И. Вернадского.

Дальнейшее развитие человеческой цивилизации, которую нельзя отделить от развития самой Земли, и прежде всего ее биосферы должно быть целенаправленным, однако целенаправленное развитие – это развитие управляемое. А любое управление сводится в конечном счете к принятию того или иного решения. Выбор решений в свою очередь основывается на информации о состоянии управляемого объекта и знании его свойств. На современном этапе развития теории ноосферы основная проблема – формирование доктрины, позволяющей придать количественное выражение тем параметрам биосферы, которые необходимо обеспечить. В качестве измерительного комплекса для этих параметров выступают службы мониторинга.

Перевод большинства экологических задач на математический язык достаточно труден. Это объясняется тем, что экологические процессы с точки зрения формализма менее изучены, чем, например, физические и химические. Трудноформализуемые процессы всегда содержат в себе плохо или не полностью известные поведенческие характеристики живых существ. Поэтому к математическим моделям таких процессов нельзя предъявлять требования адекватности и точности, характерные для моделирования проблем естествознания.

Это резко контрастирует с ситуацией в физических науках, где часто даже небольшие различия распознаются конкурирующими теориями. В такой ситуации при экологических исследованиях весьма полезным пред-

ставляется широкое применение методологии математического моделирования и вычислительного эксперимента. «Проигрывание» математической модели исследуемого экологического процесса на компьютере часто позволяет предвидеть характер изменения этого процесса в условиях, когда прямой эксперимент над ним трудно воспроизводим или экономически невыгоден. Вычислительный эксперимент дает материал для дальнейшей корректировки математической модели исследуемого экологического процесса [66, 73].

2.2. Классификация моделей

В зависимости от особенностей оригинала и задач исследования применяются самые разнообразные модели (рис. 1).



Рис. 1- Классификация моделей
(по В. Д. Федорову и Т. Г. Гильманову, 1980)

Реальные (натурные, аналоговые) модели, если таковые удастся создать, отражают самые существенные черты оригинала. Например, аквариум может служить моделью естественного водоема. Однако создание реальных моделей сопряжено с большими техническими трудностями, так как пока еще не удается достичь точного воспроизведения оригинала. Знаковая модель представляет собой условное отображение оригинала с помощью математических выражений или подробного описания. Наибольшее распространение в современных экологических исследованиях получили концептуальные и математические модели и их многочисленные разновидности. Разновидности концептуальных моделей характеризуются подробным описанием системы (научный текст, схема системы, таблицы, графики и т.д.). Математические модели являются более эффективным методом изучения экологических систем, особенно при определении количественных показателей. Математические символы, например, позволяют сжато описать сложные экологические системы, а уравнения дают возможность формально определить взаимодействия различных их компонентов.

Процесс перевода физических или биологических представлений о любой экологической системе в ряд математических зависимостей и операции над ними называются системным анализом, а сама математическая система – моделью. Следует отметить, что математические модели являются неполным абстрактным отображением реального мира.

По типу реализации различаются *реальные* и *знаковые* модели. Реальная модель отражает существенные черты оригинала уже по самой природе своей физической реализации. Например, аквариум с его растительностью, животным и микробным населением воспроизводит некоторые черты обитаемых природных водоемов уже потому, что он сам является населенным водоемом, хотя и значительно меньших размеров. Одна из наиболее сложных проблем, с которой приходится сталкиваться при работе с реальными (натурными) моделями, заключается в трудности установления степени адекватности модели оригиналу и, следовательно, в обосновании возможности применения результатов моделирования к исходной системе-оригиналу. В отличие, например, от аэро- или гидродинамики, где разработаны количественные критерии адекватности моделей (критерий Рейнольдса и т.п.), в результате чего стало возможным успешное применение натурных моделей для решения широкого круга научных и конструкторских задач в указанных областях, при натурном моделировании экосистем вопросы обоснования адекватности еще очень далеки от удовлетворительного решения. Кроме того, создание и использование натурных моделей

экосистем связано с известными трудностями технического характера, преодоление которых, из-за отсутствия гарантий адекватности, отнюдь не всегда приводит к решению поставленной задачи.

В отличие от реальной, знаковая модель представляет собой условное описание системы-оригинала с помощью данного алфавита символов и операций над символами, и результате чего получаются слова и предложения некоторого языка, которые с помощью определенного кода интерпретируются как образы некоторых свойств элементов системы-оригинала и связей между ними. Как отмечает И. А. Полетаев (1966), знаковые модели несравненно богаче возможностями, чем реальные, ибо они почти не связаны ограничениями физической реализации.

Наибольшее значение для экологии имеют две разновидности знаковых моделей: это, во-первых, так называемые *концептуальные* и, во-вторых, *математические* модели.

Концептуальная модель представляет собой несколько более формализованный и систематизированный вариант традиционного естественнонаучного описания изучаемой экосистемы, состоящей из научного текста, сопровождаемого блок-схемой системы, таблицами, графиками и прочим иллюстративным материалом. Несколько тавтологичный, но широко применяемый термин «концептуальная модель» подчеркивает, что назначение этой модели – служить ясным, обобщенным и в то же время достаточно полным выражением знаний и представлений исследователя об изучаемой системе в рамках и средствами определенной научной концепции. Например, в рамках «энергетической» или «биогеохимической» концепции соответствующие концептуальные модели принимают форму блок-схем трофических связей или потоков вещества в экосистеме, которые сопровождаются поясняющим текстовым, табличным и графическим материалом, раскрывающим состав, структуру и некоторые аспекты функционирования экосистемы.

В то же время наряду с такими общеизвестными достоинствами концептуальных моделей, как универсальность, гибкость, богатство средств выражения и др., благодаря которым этот метод применяется к самым разным системам, ему свойственны и недостатки, как, например, высокая неоднозначность интерпретации и известная статичность, затрудняющая описание динамических систем.

Другая классификация моделей в экологии может быть представлена следующим образом (рис 2).

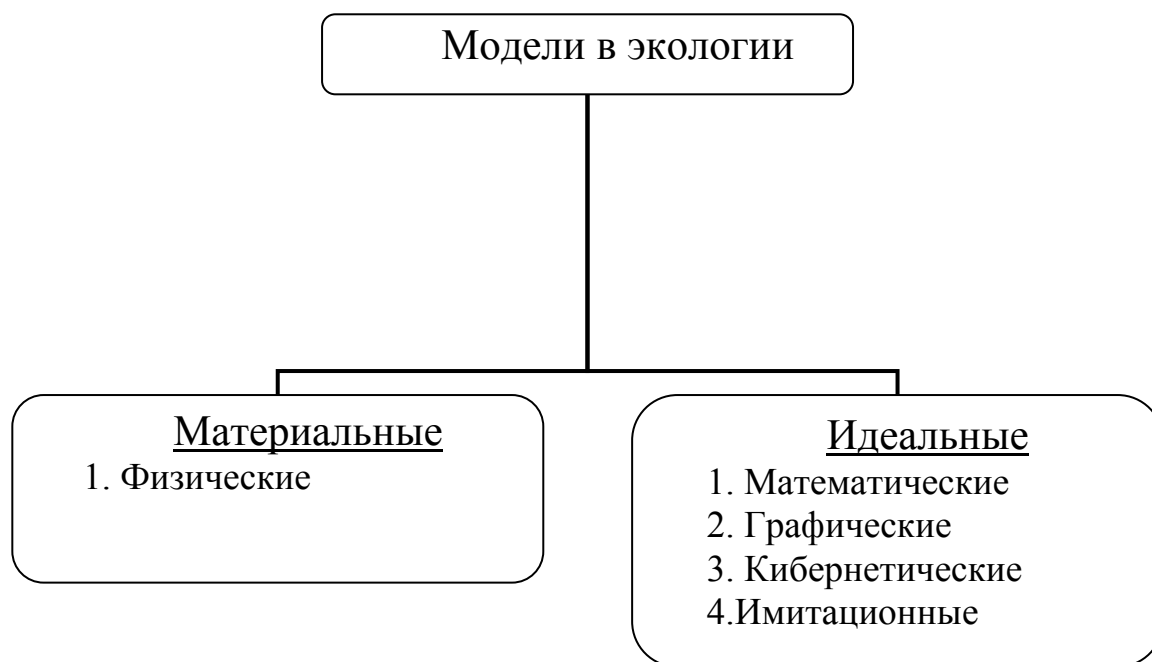


Рис. 2. Классификация моделей в экологии

Из материальных моделей часто используются в природопользовании физические модели. Например, при создании крупных проектов, таких, как строительство ГЭС, АЭС и т.п., связанных с изменениями окружающей природной среды. С помощью физических моделей строятся уменьшенные модели устройств, сооружений и делаются выводы о возможном влиянии прототипа на окружающую среду.

Во второй половине XX в. среди видов моделей в экологии все большее значение приобретают идеальные: математические, кибернетические, имитационные, графические модели. Математические модели строятся с помощью математической символики, кибернетические модели – с применением вычислительной техники, графические модели – с помощью блоковых схем, а суть имитационных моделей заключается в том, что существует возможность проведения модельных экспериментов.

Еще одна классификация моделей основана на исследовании в рамках мониторинга. Все используемые в этих целях модели можно разделить на две группы:

- а) модели переноса и превращения загрязнений в окружающей среде (геофизические модели);
- б) модели экологических систем (разных масштабов), используемые для оценки антропогенного влияния.

Предлагаемая классификация, разумеется, не абсолютна. Модели экологических систем являются комплексными моделями, имеющими блочную структуру. Обычно в них входит подмодель распространения загряз-

нителей, влияние которых исследуется. Это хорошо видно в моделях водных экологических систем, предназначенных для оценки влияния антропогенного поступления биогенных элементов. Данные модели распространения загрязняющих веществ, грубы и носят узкоцелевой характер.

Модели в экологии можно также классифицировать в зависимости от пространственного (и связанного с ним временного) масштаба антропогенного влияния. Можно выделить следующие типы моделей:

- а) локальные,
- б) региональные,
- в) глобальные.

Локальные геофизические модели используются в случаях, когда масштабы распространения загрязнений составляют величину порядка нескольких километров. Обычно они применяются с целью определения "зоны влияния" отдельных источников загрязнения. Типичные величины концентраций загрязняющих веществ в данных моделях достаточно велики и представляют опасность, в частности, для здоровья людей. Поэтому при оценке опасности загрязнения в локальных масштабах используют подход, основанный на концепции предельно допустимой концентрации (ПДК).

Региональный масштаб – это пространственный масштаб порядка десятков и сотен километров, а глобальный масштаб оценивается величиной порядка от нескольких тысяч километров до масштабов всей планеты.

Классификация моделей, учитывающая подход к их построению и решаемые с их помощью задачи:

- а) статистические,
- б) аналитические,
- в) имитационные,
- г) оптимизационные.

При создании региональной модели, должна иметься достаточная информация об уровне и структуре хозяйственной деятельности в регионе, чтобы произвести перепись (инвентаризацию) всех потенциально важных антропогенных факторов и, в частности, определить список источников загрязнения.

Основой модели являются инвентаризационный и функциональный модули.

1. Инвентаризация (перепись) источников загрязнения атмосферы водных потоков, почвы в рамках модели межотраслевого баланса. Приведение инвентаризации к «стандартной» форме.

2. Модуль распространения загрязнений в атмосфере. По данным об источниках, метеоданным о поле ветра и осадках производится расчет про-

странственно-временного распределения загрязнителей в атмосфере, оценка темпа выведения загрязнителей из атмосферы на подстилающую поверхность и рассчитывается пространственно-временная картина плотности распределения потоков загрязнителей на подстилающей поверхности.

3. Модуль выведения загрязнений из подстилающей поверхности в соседние водотоки, атмосферу: возможно поглощение биотой. По данным о пространственно-временном распределении загрязнителей на подстилающей поверхности (в почве) рассчитывается их переход в водные потоки, а также оценивается обратный переход в атмосферу и поглощение сухопутными биогеоценозами.

4. Перенос загрязнений водными потоками. Имея информацию об источниках выбросов в водотоки и зная поступление загрязнений в водотоки с соответствующих участков водосбора, рассчитывается пространственно-временная картина распределения загрязнителей в речных потоках и оценивается поступление загрязнений.

5. Оценка зон «влияния» крупных источников и построение полей загрязнения. По данным о первичных источниках и поступлению загрязнений с речными потоками, а также с использованием информации о выведении загрязнителей из атмосферы на поверхность оцениваются зоны влияния крупных источников, и рассчитывается пространственно-временная картина полей загрязнения.

6. Прогнозирование состояния природных экосистем. По результатам расчета полей загрязнения в атмосфере, в водной среде и почве оцениваются и прогнозируются возможные изменения в функционировании сухопутных и водных биогеоценозов.

7. Модуль оценки ущерба от загрязнений и оптимизация использования ресурсов экосистем региона. Рассматриваются четыре основных количественных составляющих вектора ущерба:

- ущерб промыслу;
- загрязнение больших масс воды (в данном случае вода рассматривается как промышленный ресурс);
- рекреационный ущерб, связанный с потерей или снижением доходов от деятельности санаториев, пансионатов и т.п.;
- обеднение генофонда.

Когда человек воздействует на крупномасштабные природные процессы, то в этом случае хозяйственная деятельность в одном районе может повлиять на природные условия в других районах, удаленных на большие расстояния. Нахождение форм, методов и механизмов регулирования взаимодействия деятельности человека с окружающей средой в глобаль-

ном плане представляет чрезвычайно сложную задачу, подходы к решению которой в настоящее время активно обсуждаются. Таким образом, задачей глобальных моделей является обнаружение и прогнозирование этих изменений.

Изучение глобальных циклов различных загрязнителей обычно преследует цель оценки глобального влияния антропогенных источников загрязнения на окружающую среду при учете взаимодействия различных сред между собой. Модели глобальных циклов представляют собой совокупность камер или резервуаров, между которыми может происходить обмен. Каждый резервуар характеризуется количеством содержащегося в нем вещества.

Глобальные циркуляционные модели представляют собой, как правило, систему линейных дифференциальных уравнений, что позволяет легко их исследовать.

2.3. Математическое моделирование – основные понятия

При качественном и количественном изучении экосистем гораздо наиболее эффективны методы математического моделирования. Что же представляет собой математическая модель? [104].

Математическая модель есть приближенное описание какого-либо класса явлений внешнего мира с помощью математической символики. Математические модели реальных исследуемых процессов сложны и включают системы нелинейных функционально-дифференциальных уравнений. Ядро математической модели – дифференциальные уравнения в частных производных. Изучение математических моделей производится на основе методов вычислительной математики, основу которых составляют разностные методы решения задач математической физики. Современный этап прикладной математики характеризуется исследованием математических моделей с широким использованием вычислительных средств.

Использование моделей всегда и неизбежно связано с упрощением, идеализацией моделируемого объекта. Сама модель не охватывает объекта во всей полноте его свойств, а отражает лишь некоторые его исследуемые характеристики. Самое важное, модель более удобна, более доступна для исследования, чем моделируемый объект [11].

Предварительное исследование математической задачи состоит в выделении модельных (упрощенных) задач и их всестороннем исследовании, так как полная математическая модель обычно слишком сложна. Модель-

ные математические задачи в цикле вычислительного эксперимента строятся для следующих различных целей: во-первых, для качественного исследования полной задачи, во-вторых – для проверки, тестирования вычислительных алгоритмов приближенного решения полной задачи. При качественном исследовании модельных задач изучаются вопросы множественности решения, его устойчивости и т.д. Большое значение имеют также точные частные решения существенно нелинейных задач, асимптотические решения.

На следующем этапе вычислительного эксперимента строится дискретная задача и численный метод решения этой дискретной задачи. Сама математическая модель включает в себя, как правило, уравнения с частными производными, системы дифференциальных и алгебраических уравнений. Построение вычислительных алгоритмов и их исследование является основной задачей вычислительной математики. Здесь можно выделить две тенденции научных исследований. В первой тенденции в традициях чистой математики одни исследователи изучают дискретные модели и численные методы их исследования вне связи их с прикладным математическим моделированием, реализацией на ЭВМ в контексте решения прикладной проблемы. Проводятся строгие доказательства существования решения дискретной задачи, получают теоретические оценки погрешности приближенного решения, сходимости итерационного процесса. Представители же прикладного направления в вычислительной математике работают на несколько другом («физическом») уровне строгости, для которого характерны такие нестрогие понятия, как «практическая сходимость», «реальные сетки» и т.д. Безусловное требование полной строгости при прикладном математическом моделировании обычно ни к чему хорошему не приводит.

Вычислительный эксперимент характеризуется двумя особенностями, которые необходимо учитывать при создании адекватного ему программного обеспечения. Это, во-первых, многовариантность расчетов в рамках фиксированной математической модели и, во-вторых, многомодельность. Здесь уже нельзя обойтись одной программой на ЭВМ, нужно иметь возможность легко менять ее для решения близких задач (задач для набора моделей). В едином цикле вычислительного эксперимента работают и теоретик, и экспериментатор, и прикладной математик, и программист.

Если сравнить вычислительный и натуральный эксперименты, то можно отметить особенности и преимущества вычислительного над натурным экспериментом. Во-первых, вычислительный эксперимент проводится даже тогда, когда натуральный невозможен. Такая ситуация имеет место с крупномасштабными экологическими экспериментами (например, моделирование гло-

бальных климатических изменений при использовании атомного оружия). Во-вторых, при использовании вычислительного эксперимента резко снижается стоимость разработки и экономится время.

Таким образом, математическое моделирование экологических процессов представляет собой мощный инструмент для количественной и качественной оценок изменений характеристик окружающей среды под воздействием различных факторов. Если математическая модель достаточно точно имитирует действительность, сохраняя существенную структуру реального явления, то появляются неограниченные возможности для экспериментирования: в эту модель можно вводить новые факторы или возмущения, чтобы выяснить их влияние на систему.

Ценность математического моделирования очевидна в том случае, когда для практических целей изучают конкретную крупномасштабную экологическую проблему. Вводя необходимые сведения в математическую модель, можно предсказывать результаты тех или иных воздействий человека на исследуемый экологический процесс, получать нужные характеристики при изменении параметров модели.

Преимущества математических моделей заключаются в том, что они позволяют делать предсказания, которые можно сравнить с реальными данными, поставив эксперимент или проведя необходимые наблюдения. Следует помнить, что любая математическая модель учитывает лишь некоторые стороны реальности, но отнюдь не все. Поэтому проверка опытом или наблюдениями – необходимый и решающий этап для утверждения любого теоретического открытия так же, как и наличие убедительного теоретического объяснения – важный аргумент в пользу достоверности экспериментальных открытий. Таким образом, математическое моделирование – это лишь один из этапов исследования.

Математика и математические модели могут быть полезны для экологических наук, однако их применение ограничено и не является панацеей. Если окончательная цель заключается в том, чтобы внести вклад в экологическое исследование, то математику необходимо самостоятельно изучать экологию, прежде чем конструировать модель или теорию. За очень небольшим исключением для экологии практически бесполезен анализ абстрактных гипотетических моделей, как бы они ни были интересны математически.

Таким образом, все сказанное выше позволяет сделать следующие выводы:

1. Математические модели являются хорошим, полезным средством обобщения информации, поставляемой системой мониторинга.

2. Математические модели позволяют определить «белые пятна» в существующей системе наблюдений и дать практические рекомендации по ее совершенствованию.

3. Верифицированные модели позволяют сделать оценки антропогенных эффектов в глобальном масштабе за практически приемлемый период наблюдений (чего нельзя сделать, опираясь только на данные наблюдений).

Рассмотренные примеры позволяют сделать вывод о большой роли методов математического моделирования в научном обосновании систем мониторинга, в анализе и обобщении информации, поставляемой системами мониторинга. Математические модели, даже весьма грубые, являются хорошим стимулом проведения исследований, помогают установить «белые пятна» в понимании функционирования систем окружающей природной среды и, таким образом, дать рекомендации системе наблюдений относительно типа, количества и качества недостающей информации.

2.4. Классификация математических моделей в экологии

Все математические модели можно разделить по следующим признакам [21, 28, 53, 66]:

1. Структурные и функциональные модели.

В структурных моделях показывается структура изучаемой экосистемы и взаимосвязь элементов этой системы между собой, т.е. описывают структуру элементов. Функциональные модели дают количественную оценку отклика экосистемы на внешнее воздействие, т.е. описывают процессы, происходящие в экосистеме. В большинстве случаев структурные и функциональные модели могут сочетаться, тем самым образовывать «гибрид», что позволяет изучать экосистему в целом.

2. Дискретные и непрерывные модели.

В дискретном случае описание моделей ведется на языке сумм и конечных разностей, тогда как в непрерывных моделях используется язык интегралов и бесконечно-малых приращений.

3. Линейные и нелинейные модели.

В линейных моделях используется линейная зависимость между переменными, которая и описывает будущую модель. В нелинейных моделях используются связи между элементами, которые описываются нелинейными функциями. Линейными моделями описывают простые системы, а нелинейными можно описать и систему, и ее динамику.

4. Статистические и динамические модели.

Данная классификация основана на зависимости от временного периода. Статистические модели описывают экосистему в определенный момент времени с помощью алгебраических уравнений, это так называемые краткосрочные модели. Динамические модели учитывают разновременные показатели, при этом используются дифференциальные уравнения.

5. Детерминированные и недетерминированные модели.

Детерминированная математическая модель экосистемы, учитывает не случайные, а закономерные, определяемые известными изменениями вынуждающие функции и параметры экосистемы. Недетерминированные модели можно разделить на следующие:

- стохастические модели, используют методы математической статистики и теории вероятностей;
- нестохастические модели применяются для описания систем, функционирование которых не носит вероятностный характер, например, единственный случай с системой.

6. Аналитические и алгоритмические модели.

Аналитические модели строятся на аналитическом исследовании, учитывающее все траектории развития системы. Алгоритмические модели позволяют исследовать более широкий спектр задач и применяются при решении сетевого планирования, построение моделей случайного поиска и стохастической аппроксимации, а также при имитационном моделировании сложных экосистем.

2.5. Этапы моделирования в экологии и биологии

Для того чтобы создать полноценную математическую модель нужно соблюдать определенную последовательность действий. Проанализировав множество литературных источников можно выделить следующие этапы [11, 21, 28, 66, 100]:

1. Сбор новой или анализ существующей информации об исследуемом объекте.

Реальные явления, которые нужно смоделировать, должны быть тщательно изучены: выявлены главные компоненты и установлены законы, определяющие характер взаимодействия между ними. Если не установлено, как взаимосвязаны между собой реальные исследуемые объекты, построение полноценной математической модели невозможно. Прежде чем строить математическую модель природного явления, нужно иметь гипотезу о его течении.

2. Определение и уточнение целей и задач моделирования.

Первые два этапа взаимосвязаны. Первоначально сформулированные цели могут меняться под влиянием качества и количества доступной информации об объекте моделирования и свойств самого объекта. Информация может собираться различными способами, основным из которых при экологическом моделировании природных систем является экспериментальный (чаще всего, экспедиционный) сбор данных. Данный процесс включает и мониторинг среды, является дорогостоящим и поэтому труднодоступным. В любом случае он осуществляется специалистами в соответствующей области знаний. Математик-модельер взаимодействует с этими специалистами и может соучаствовать в планировании работ по сбору информации и при уточнении целей моделирования.

3. Организация ввода и хранение полученных данных в компьютере. Как правило, экологическая информация качественно многообразна и требует тщательного структурного анализа. По результатам такого анализа разрабатывается базы данных, под нее подстраивается система управления данными, в частности, подсистемы ввода, представления, структурирования и вывода данных.

4. Следующий этап – анализ и обработка полученных данных. Зачастую его выполняют параллельно с вводом данных. С точки зрения качества (полноты) данных анализ осуществляется методами математической статистики. Для получения различного рода зависимостей и характеристик набора данных используются статистические методы и нестатистические методы интерполяции, экстраполяции, аппроксимации данных. Выбор методов обработки результатов зависит от количественных и качественных характеристик данных, а также от целей обработки. Многие исследователи завершают свою работу вводом данных в компьютер и их подробным анализом. Действительно, в ряде исследований можно на этом и остановиться, если достигаются поставленные в начале цели. Но необходимо сознавать при этом, что к собственно математическому моделированию мы в таком случае и не приступаем. Указанные выше четыре этапа являются подготовительными этапами.

5. Выбор метода и средств моделирования. На данном этапе в зависимости от поставленных целей следует выбрать адекватные методы и средства моделирования.

Математическая модель может быть исследована различными методами – аналитическими или имитационными. В некоторых случаях наличие имитационной модели делает возможным применение математических методов оптимизации. Для использования аналитических методов необходи-

мо математическую модель преобразовать к виду явных аналитических зависимостей между характеристиками и параметрами системы и внешних воздействий. Однако это удастся лишь для сравнительно простых систем и при наличии хорошо разработанной теории исследуемых объектов.

При имитационном моделировании динамические процессы системы – оригинала подменяются процессами, имитируемыми в абстрактной модели, но с соблюдением таких же соотношением длительностей и временных последовательностей отдельных операций. Поэтому метод имитационного моделирования мог бы называться алгоритмическим или операционным. Методы имитационного моделирования различаются в зависимости от класса исследуемых систем, способа продвижения модельного времени и вида количественных переменных параметров системы и внешних воздействий. Методы моделирования разрабатываются для дискретных, непрерывных и смешанных дискретно – непрерывных систем [17].

В зависимости от способа продвижения модельного времени методы моделирования подразделяются на методы с приращением временного интервала и методы с продвижением времени до особых состояний. В первом случае модельное время продвигается на некоторую величину Δt . Далее определяются изменения состояний элементов и выходных воздействий системы, которые произошли за это время. После этого модельное время снова продвигается на величину Δt , и процедура повторяется. Так продолжается до конца периода моделирования T_m . Этот метод моделирования называют «принципом Δt ».

Во втором случае в текущий момент модельного времени t сначала анализируются те будущие особые состояния – поступление дискретного входного воздействия, завершение обслуживания и т.п., для которых определены моменты их наступления $t_i > t$. Выбирается наиболее раннее особое состояние, и модельное время продвигается до момента наступления этого состояния. Затем анализируется реакция системы на выбранное особое состояние. В частности, в ходе анализа определяется момент наступления нового особого случая. Затем анализируются будущие особые состояния, и модельное время продвигается до ближайшего. Так продолжается до завершения периода моделирования T_m .

Наиболее распространенное средство моделирования экологических систем и процессов, происходящих в них является использование компьютера. Современные ЭВМ позволяют моделировать сложные распределенные динамические системы. Фактор распределенности играет важную роль и предполагает построение многопроцессорных вычислительных систем на

основе локальных вычислительных сетей. Поэтому для моделирования таких систем перспективным представляется использование распределенных многопроцессорных вычислительных систем.

6. Построение математических моделей функционирования объекта и анализ свойств моделей составляет содержание следующего этапа. В соответствии с целями исследования решаются различные математические задачи, проверяется адекватность моделей объекту исследования. С помощью моделей мы можем изучить закономерности динамики основных параметров объекта, провести численные эксперименты на компьютере с целью выяснения рациональных способов воздействия на объект и т.п. Модели могут совершенствоваться по мере накопления новой информации об исследуемом объекте.

6. Последний этап является постмодельным. На основе модельного анализа свойств объекта подводятся итоги, дается оценка состояния объекта и при необходимости принимаются решения по управлению объектом (если управление возможно и необходимо). Этот этап называется постмодельным потому, что его реализуют управленцы, – как говорят в теории управления – «лица, принимающие решения». Во внимание принимаются модельные расчеты, собственные знания и информация из немодельных источников. Происходит переход от модельных представлений к реальному управлению и анализу поведения исследуемого объекта. Результаты модельных исследований играют здесь роль информации для принятия решений. Наряду с этой информацией используются немодельные данные, содержательный опыт управленцев и различные неформальные обстоятельства. От результатов моделирования, качества и количества немодельной информации и многих привходящих обстоятельств зависит значимость модельных разработок в принятии решений. Значимость может меняться в пределах от статуса советующей до статуса решающей со всеми промежуточными вариантами. В зависимости от необходимого способа использования результатов моделирования может быть проведена корректировка самого процесса моделирования.

Таким образом, для построения достаточно правдоподобной модели следует соблюдать несколько основных принципов:

1. Должна быть предусмотрена возможность учета и использования результатов различных естественнонаучных исследований.

2. Должен быть предусмотрен вероятностный характер многих параметров.

3. Модель должна быть обеспечена математическим аппаратом, дающим возможность исследовать задачи, представляющие практический интерес и актуальность.

4. Добавление новой информации об экологической системе должно легко осуществляться и учитываться в рамках уже построенной модели.

5. Модель должна быть построена по модульному принципу, причем каждый модуль верифицируется до его включения в общую модель.

6. По возможности использование компьютера для ускорения процесса расчетов и возможности дальнейшего прогнозирования.

2.6. Обзор существующих математических моделей В ЭКОЛОГИИ

Подходы к моделированию экологических систем многочисленны. В данном разделе мы рассмотрим наиболее часто встречающиеся и проведем анализ возможных моделей в различных частях биосферы.

2.6.1. Методы моделирования

Проведя анализ литературных источников мы пришли к выводу, что большинство математических моделей построены по основным, уже ранее известным принципам.

Качественное моделирование

Качественное моделирование наименее требовательно к наличию информации. Для его использования необходимо лишь ввести переменные и решить, является ли отношение между ними положительным (увеличение А влечет увеличение В), отрицательным (увеличение А влечет уменьшение В) или нейтральным (увеличение А непосредственно не влияет на В). Можно усовершенствовать этот метод, введя данные об амплитуде эффектов взаимодействия (удвоение величины А влечет уменьшение вдвое величины В и т.д.).

Метод допускает также существование факторов различной важности и возможность того, что находясь, например, вблизи максимума, факторы будут действовать сильнее, чем вблизи минимума. Метод можно использовать для учета большого числа количественных деталей, однако тогда он будет скорее имитационным, чем качественным.

Достоинство этого метода заключается в том, что он позволяет проследить связь между динамикой системы, с одной стороны, и характером

взаимодействия между переменными – с другой, когда информация недостаточна для построения имитационной модели.

Модель этого типа может дать лишь грубое качественное описание тенденций в динамике переменных и непригодна для повседневно встречающихся случаев, чувствительных к точному количественному балансу между переменными.

Матрица Леопольда

Матрица Леопольда и многие ее варианты представляют собой таблицу воздействий, включающую в себя по вертикали список возможных действий (отвод воды, строительство дорог и т.д.), а по горизонтали – множество потенциальных индикаторов воздействия.

| | <i>a</i> | <i>b</i> | <i>c</i> | <i>d</i> | <i>e</i> |
|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| <i>a</i> | | 2/1 | | | 8/5 |
| <i>b</i> | | 7/2 | 8/3 | 3/1 | 9/7 |

Рис. 1.1. Фрагмент матрицы Леопольда

В первоначальном ее варианте по горизонтали были перечислены 100 действий, способных повлиять на окружающую среду, а по вертикали – 88 характеристик окружающей среды.

Воздействие, соответствующее пересечению каждого действия и каждого фактора, описывается через его амплитуду и важность.

Амплитуда – это мера общего уровня. Например, постройка дорог изменит или вредно повлияет на существующую систему водостока и, таким образом, может оказать большое воздействие на сток.

Важность – это мера значимости отдельного действия человека в каждом конкретном случае. Важность влияния конкретной дороги на сток может быть незначительной вследствие малой длины дороги или потому, что именно в данном конкретном случае дорога не сильно препятствует стоку. Если каждое взаимодействие оценивать двумя числами, то удастся отделить фактические данные, которые легче получить путем измерения амплитуд, от более субъективных оценок важности, выраженных в баллах.

Леопольд предложил инструкцию по использованию этой матрицы:

- изучить все действия (расположенные в верхней части матрицы), входящие в предполагаемый проект;

- под каждым из действий, способных оказать воздействие, на пересечении с соответствующей строкой матрицы сделать разрез;

- в верхнем левом углу каждой клетки с разрезом поместить число от 1 до 10, определяющее амплитуду возможного воздействия; 10 соответству-

ет наибольшей амплитуде, 1 – наименьшей (ненулевой); перед каждым числом поставить «+», если воздействие выгодно для человека; в нижнем правом углу клетки поместить число от 1 до 10, определяющее важность возможного воздействия;

– в прилагаемом к матрице тексте должно содержаться обсуждение наиболее важных воздействий, а также тех строчек и столбцов, которые содержат ячейки с наибольшими числами.

Основная проблема, возникающая в связи с использованием матриц воздействия, состоит в том, что схема «действие – единичный эффект» нереалистична. Возникают трудности определения последовательности воздействий и вызывающих их причин. Кроме того, наличие 8800 ячеек делает матрицу Леопольда громоздкой для вычислений.

Такие матрицы длительное время являлись общепринятым методом оценки воздействия на окружающую среду в Северной Америке. Существуют усовершенствованные вариации этого метода, в которых устранены отдельные недостатки, однако общая структура их не изменилась.

Статистические модели

Статистические модели строят на допущении, о том, что моделируемый процесс случаен по своей природе. Для исследования применяют статистические методы, в частности методы Монте-Карло. В основе их лежит использование случайных чисел. Имеется точка зрения, согласно которой закономерности функционирования сложных систем (объекты биосферы и геосистемы) «существенно вероятностны». Таким образом, можно предположить, что методы Монте-Карло будут высокоэффективными методами компьютерного моделирования в экологии.

Кроме того, статистические модели успешно применяют при неполной информации о моделируемых объектах. Исследование этими методами, как правило, дает лишь вероятностные оценки поведения экосистемы, что не всегда приемлемо. Статистические модели, хотя и не являются основными методами моделирования, могут применяться в качестве составных частей более сложных моделей, внося в них элемент случайности.

Модели типа «хищник – жертва»

Модели типа «хищник – жертва» или «паразит – хозяин» — классические модели биоэкологии, их применяют для изучения частных случаев взаимодействия популяций нескольких видов.

Модель типа «хищник – жертва» – одна из первых моделей теоретической экологии (или теоретической биологии). Однако взаимодействием двух-трех и даже более видов, которые реализуются в таких моделях, не исчерпывается динамика объектов окружающей среды, поэтому данные

модели не являются универсальными и имеют прикладное значение. В частности, модели этого типа получили широкое распространение в микробиологии.

Экологические процессы включают в себя рост, воспроизведение, конкуренцию, хищничество и естественный отбор.

Хищничество — один из процессов, наиболее подробно описанных документально. Существуют уравнения пищевой конкуренции и роста численности популяции и т.д. В основе их лежат уравнения Вольтерра – Лотки, предложенные для модели «хищник – жертва».

Имитационные модели

Имитационные модели применяют в тех случаях, когда можно воспользоваться большим количеством теоретических и экспериментальных работ в исследуемой области и обосновать функциональное представление соотношений между переменными, используемыми при моделировании. В большинстве случаев соотношения между этими переменными есть результат изучения статистических зависимостей между ними.

Суть имитационного моделирования заключается в попытке формализации с помощью компьютера любых эмпирических знаний о рассматриваемом объекте. Имитационная модель представляет собой полное формализованное описание изучаемого явления «на грани нашего понимания». Слова «на грани нашего понимания» означают понимание причинно-следственных связей между событиями.

Для создания качественной модели требуется точная схема причинно-следственных связей. Однако стремление к реализму в модели не должно приводить к излишней детализации. Выход заключается в том, чтобы ограничиться минимумом учитываемых факторов, при котором модель остается точным и работоспособным представлением ключевых эффектов. В этих условиях математический аппарат будет второстепенным. Большого внимания требует содержательная часть моделирования.

При моделировании сложные системы разбивают на подсистемы, поэтому модель предстает как некий комплекс подмоделей. Последние строят, используя в каждой из них различный математический аппарат. О характере некоторых процессов известно из источников, о других — практически ничего неизвестно; некоторые взаимосвязи можно адекватно описать с помощью простых функций, анализ других требует сложного математического аппарата. Именно это обстоятельство приводит к использованию имитационного моделирования как метода анализа.

Благодаря имитационным моделям можно манипулировать функциями и отношениями и полнее использовать имеющиеся знания.

Метод Монте-Карло

В природе часто встречаются системы, в распределении которых нет видимых закономерностей. Это относится, например, к расположению деревьев на однородном участке леса. Случайными по времени можно считать внешние воздействия на исследуемую систему, такие, например, как метеорологические факторы, а случайными флуктуациями — передвижение микроорганизмов в окружающей их среде. Если какие-либо факторы подчиняются определенным закономерностям, то при некоторых условиях их можно моделировать случайными процессами. Например, при изучении развития популяции микроорганизмов исследователя не интересует появление или гибель отдельной бактерии. При больших количествах микроорганизмов рождаемость, смертность и питание подчиняются строгим статистическим закономерностям. Если известно, что в течение какого-то периода погибает некоторая часть популяции, то неважно, какие именно особи исчезнут, можно считать, что этот процесс случаен.

Метод Монте-Карло заключается в использовании случайных чисел для моделирования различных объектов, ситуаций и физических явлений, реализации игр и др.

Существует многочисленное количество и других методов моделирования состояния окружающей среды, которые также являются основой для построения математических моделей.

2.6.2. Основные типы математических моделей различных экосистем

В разделе рассмотрены наиболее известные и часто используемые математические модели различных экологических систем.

Водные экосистемы

Математические модели водных экологических систем в зависимости от объекта или процесса исследования условно подразделяются:

1. Гидрофизические модели (динамика водных масс, режимы температуры/солености, ветрового перемешивания и т.п.).

Гидрофизические показатели воды включают в себя, в первую очередь, следующие показатели: температура, прозрачность. И некоторые показатели, определяющиеся с помощью органолептического метода: мутность, запах, вкус и привкус.

В качестве примера можно привести работу И.А. Суторихина, В.И. Букатый, О.Б. Акуловой, У.И. Залаевой «Сезонная динамика гидрофизических характеристик в озерах Алтайского края в период 2011 – 2013 гг.», в

которой рассмотрено моделирование сезонной динамики спектральной прозрачности и температуры воды, а также содержание хлорофилла «а» на различных глубинах озер

2. Биологические модели (разного уровня от популяционных до трофических цепей и сетей).

Рассматриваемое моделирование связано с живыми компонентами экосистемы. Неживые компоненты рассматриваются постольку, поскольку это необходимо для моделирования динамики основных параметров живых компонент. В основе моделирования сообщества лежит трофическая структура. В основе моделей лежит характеристика потоков вещества (энергии) между выделенными блоками водной экосистемы.

В качестве примера можно привести моделирование первичной продукции, динамики фитопланктона водных экосистем.

3. Динамические модели водных экосистем (интегрирование биологических и гидрофизических моделей в модель водной экосистемы).

Чаще всего динамические модели используют для описания антропогенных воздействий на водную экосистему. Антропогенное воздействие на водную экосистему можно рассматривать как управление. Управление для водной экосистемы или ее подсистем состоит или в сборе урожая (промысле), или в искусственном управлении системой, или же в управляющем воздействии на параметры внешней среды. Важным видом управления последнего типа является загрязнение водной среды.

Одной из важных задач прогнозирования состояния окружающей среды является прогноз распределения концентраций загрязняющих веществ в пространстве и его изменение со временем. Решение данной задачи предполагает моделирование процессов распространения загрязняющих веществ в различных средах.

Для моделирования антропогенного воздействия на водные экосистемы зачастую используют математическое выражение законов Фика, уравнение диффузии в неподвижной и движущейся среде. При составлении подобных моделей учитывается множество параметров основные из которых – начальное и основное разбавление сточных вод, кратность разбавления и т.п.

Примером может служить такие работы как моделирование процесса переноса тяжелых металлов в поверхностных водах, прогнозирование динамики концентрации загрязняющих веществ в воде и т.д.

Атмосфера

В математические модели атмосферного воздуха могут учитывать не только природные явления, происходящие в атмосфере, но и антропоген-

ное влияние и предназначены для прогнозирования той или экологической ситуации.

В качестве примера можно привести модель верхних слоев атмосферы. Модель вычисляет физические параметры верхней атмосферы путем численного интегрирования уравнений, формулирующих основные физические законы для околоземной среды; рассчитывает вариации глобальных распределений параметров верхней атмосферы Земли на высотах от 60 до 100000 км в зависимости от гелио-геофизических условий (времени суток, сезона, уровней солнечной и магнитной активности и т.п.).

Модель рассчитывает следующие параметры верхней атмосферы Земли:

- концентрации основных нейтральных (O , O_2 , N_2 , H) и заряженных (O^{2+} , NO^+ , O^+ , H^+ , электроны) компонент верхней атмосферы Земли;
- температуру нейтрального газа, ионов и электронов;
- компоненты векторов скоростей нейтральных и заряженных частиц;
- потенциал и компоненты вектора электрического поля.

Кроме вышеуказанной модели были выполнены следующие: модели аэродинамики атмосферы над сложной подстилающей поверхностью, моделирование турбулентности в атмосфере, моделирование микрофизических процессов, моделирование климата, математическое моделирование вихреобразовательных процессов и т.д.

Оценка загрязнения атмосферы и подстилающей поверхности пассивными и активными примесями осуществляется с помощью математических моделей, построенных на основе уравнений аэродинамики в частных производных, и также их конечно-разностных аппроксимаций.

К моделям, учитывающим антропогенное влияние загрязняющих веществ можно отнести: математические модели прогнозирования качества атмосферного воздуха промышленных городов, математические модели загрязнения атмосферного воздуха от конкретной промышленности (нефтяной, пищевой, автомобильного транспорта и т.п.), модели формирования токсичного выброса, модели распространения токсической опасности, модели прогноза аварийного риска и т.д.

Наземные экосистемы

Основной частью моделей наземных экосистем является блок продукционного процесса растений. Наряду с этим направлением развивается направление создания математических моделей, отражающих антропогенное воздействие на наземные экосистемы. На сегодняшний момент известно большое количество математических моделей, описывающих наземные экосистемы. К ним относятся работы по следующим направлениям: мате-

математическое моделирование поведения радионуклидов в наземных экосистемах, описанное в работе Мамихина С.В. «Международная кооперация в области математического моделирования поведения радионуклидов в наземных экосистемах»; математическое моделирование круговорота углерода в наземных и водных экосистемах Красноярского края на основе экспериментальных, полевых и спутниковых данных руководителем, которой является член.-корр. РАН, директор ИБФ СО РАН А. Г. Дегерменджи; модели развития фитоценоза, годичной продукции растений; математическая модель демографического фактора т.д.

Таким образом, проанализировав достаточно большое количество литературных источников можно сделать следующий вывод, что все математические модели условно подразделяются на модели описывающие биотические и антропогенные процессы, происходящие в экосистемах. Но в связи с тем, что на сегодняшний момент наиболее актуально направление, которое рассматривает проблему «человек – окружающая среда» наибольший приоритет приобретают последние.

2.7. Компьютерная реализация моделей. Краткий обзор

Если говорить об общем значении компьютерного моделирования для решения проблем взаимоотношения общества с природой, следует отметить ускорение поиска наиболее приемлемого решения с помощью вычислительной техники (ВТ). Моделирование с помощью ВТ выдвигается в качестве одного из мощных современных модельных средств, дополняющих другие. Однако возможности его не следует преувеличивать.

Нельзя говорить о моделировании на ЭВМ как о в своем роде «оракуле», который решит все проблемы. Многочисленные критики подчеркивали отрицательные стороны моделирования на ЭВМ. Попытки моделирования сложных систем с помощью ЭВМ находятся пока на примитивном уровне, но нужно стремиться к созданию численных моделей, более адекватных действительности.

Таким образом, суть компьютерного моделирования должна в основном заключаться в получении количественных и качественных результатов по имеющейся модели.

В широком применении моделирования на ЭВМ для решения проблем познания и преобразования природной среды можно видеть соединение

двух тенденций, характерных для современной науки, – кибернетизация и экологизация.

Для исследования объекта в процессе моделирования необходимо создать модель и конкретизировать цели моделирования. Процесс создания моделей проходит несколько этапов. Сначала обследуется объект реальной действительности, его внутренняя структура и содержание взаимосвязей между его элементами, включая внешние воздействия, а затем разрабатывается модель.

Почему-то под моделированием на компьютере зачастую понимается только имитационное моделирование. Но благодаря развитию графического интерфейса и графических пакетов стало возможно осуществление компьютерного, структурно-функционального моделирования и использование компьютера при концептуальном моделировании.

В настоящее время под компьютерной моделью понимают:

1. Условный образ объекта или некоторой системы объектов, описанный с помощью взаимосвязанных электронных таблиц, блок-схем, диаграмм, графиков, рисунков, анимационных фрагментов и т.д. и отображающих структуру и взаимосвязи между элементами данного объекта. Компьютерные модели такого типа принято называть структурно-функциональными.

2. Отдельную программу, совокупность программ, программный комплекс, позволяющий с помощью последовательных вычислений и графического изображения их результатов воспроизводить процессы функционирования объекта, системы объектов при условии воздействия на объект различных, случайных факторов. Такие модели называют имитационными моделями.

В экологии более широкое применение находит имитационное моделирование, главной функцией которого является воспроизведение с заданной степенью точности прогнозируемых параметров функционирования объекта, представляющих исследовательский интерес. Как объект, так и его модель должны обладать системными признаками. Функционирование объекта должно характеризоваться значительным числом параметров, среди которых особое место занимает временной фактор. Каждое сочетание параметров, соответствующих принятому интервалу времени, называют характеристиками состояния системы. Для описания могут быть использованы следующие средства преобразования количественных характеристик: дифференциальное и интегральное исчисления, теория множеств, игр, вероятностные функции, случайные числа и т.д.

Имитационное моделирование предполагает наличие следующих этапов:

- разработка концептуальной модели;
- выделение существенных свойств объекта;
- выбор средств моделирования;
- разработка программной модели;
- проверка адекватности и корректировка модели;
- планирование машинных экспериментов;
- собственно моделирование;
- анализ результатов моделирования и принятия решения.

Для одной и той же системы можно составить множество моделей. Они будут отличаться степенью детализации и учета тех или иных особенностей и режимов функционирования, способностью отражать определенную грань сущности системы, ориентироваться на исследование определенных ее свойств.

Для описания имитационного процесса очень важен вопрос выбора языка программирования. Теоретически возможно описать модель на любом распространенном программном языке: Фортране, PL.1, Паскале, С++, но опыт развития теории и практики имитационного моделирования показывает, что наиболее эффективным средством являются специальные имитационные языки. Наиболее известные из них: GPSS, GASP, SIMSCRIPT, STELLA, DYNAMO, VENSIM, POWERSIM, ИМИТАК, реализующие различные подходы к моделированию.

Выбор языка моделирования зависит от гибкости и мощности изобразительных средств языка, ресурсов, предоставляемых пользователю.

Для моделирования на ЭВМ сложной системы нужен аппарат программирования, предусматривающий:

- способы организации данных, обеспечивающие простое и эффективное моделирование;
- удобные средства формализации и воспроизведения динамических свойств моделируемой системы;
- возможности имитации стохастических систем, т.е. процедуры генерирования и анализа случайных величин и временных рядов.

Реализация требований к имитационным моделям в рамках универсального языка программирования приводит к громоздким и неудобным для практического использования программам. В большинстве таких программ могут разобраться только их авторы, а любое изменение в постановке задач требует переработки значительной части программы.

Кроме того, при создании специализированных языков имитационного моделирования в зависимости от направленности их авторов можно выделить следующие основные направления:

- доработка универсального языка группой операторов, реализующих некоторые необходимые функции. Существует достаточно много подобных языков, незначительно отличающихся друг от друга. Наиболее распространение в этом классе получил язык GASP, который может быть реализован на любой вычислительной системе, имеющей в программной среде компилятор FORTRAN-IV. Существенным недостатком является отсутствие концептуальной выразительности и средств для проверки логики имитационной модели;

- ориентация на системы дифференциальных уравнений, удобная для реализации группы исследовательских моделей, породила класс языков, ярким представителем которого является DYNAMO и распространенный в России его диалект ИМИТАК;

- в языке GPSS, ориентированном на процессы, моделирование системы производится путем движения транзактов через блоки действий. Решения принимаются в результате воспроизведения логики функционирования моделируемой системы, которая представляется в виде блоков.

Подводя итоги можно сделать следующий вывод, что для реализации математических моделей используется большое количество программных языков. Все они позволяют ускорить процесс подсчета данных, а также дают возможность прогнозировать состояние окружающей среды на определенный временной промежуток.

3. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СОСТОЯНИЯ РЕКИ СУРА И ПЕНЗЕНСКОГО ВОДОХРАНИЛИЩА

3.1. Моделирование процесса миграции никеля, кадмия и цинка на примере реки Сура

3.1.1. Моделирование – современный метод прогнозирования миграционной способности никеля, кадмия и цинка в поверхностных водах и динамики изменения их концентрационных уровней

Изучение процессов загрязнения и самоочищения рек, а также возможность получения количественных характеристик загрязнения, необходимых для целей прогнозирования, управления и оптимизации качества воды, требует специального инструмента исследования – математической модели, т.е. такой абстрактной системы, которая воспроизводила бы изучаемое явление или определенные его стороны [107]. В настоящее время общепризнано представление о том, что нормирование антропогенных нагрузок на водные экосистемы должно основываться на глубоком анализе большого числа всевозможных факторов, процессов, показателей т.п., все-сторонне характеризующих качественные изменения, наступающие в рассматриваемых экосистемах под влиянием нормируемых воздействий. При построении математической модели загрязнения реки возникают затруднения, связанные с различием физико-географических условий конкретного водотока, с большим количеством источников загрязнения и самих загрязняющих веществ, их различием по физическим, химическим и биологическим свойствам, изменчивостью метеорологических параметров и гидрологического режима. Это не позволяет построить пригодную для всех случаев универсальную модель загрязнения реки.

Выбор конкретной модели загрязнения в значительной степени обусловлен целями, которые преследует такого рода моделирование.

Следует отметить, что с точки зрения самой цели прогнозирования, т.е. необходимости опережающего отражения действительности, прогностические модели загрязнения речной воды должны также удовлетворять определенным критериям оправдываемости результатов.

Математические модели, описывающие процессы загрязнения и самоочищения рек, развиваются в двух направлениях – построение статистиче-

ских или аналитических моделей. Статистические модели основываются на накопленном опыте с использованием информации о предшествующих состояниях системы, в частности, длинных рядов наблюдений основных показателей качества воды на исследуемом участке реки. Статистический анализ временных рядов допускает два возможных подхода – частотный (спектральный) и временной, каждый из которых имеет свои преимущества. Так, в частотном методе временные ряды разлагаются на спектральные компоненты и идентифицируются частоты, с которыми могут быть связаны конкретные факторы влияния на качество воды. Этот метод позволяет оценить изменения, соответствующие определенным факторам, а также оценить частоты появления определенных значений концентраций тяжелых металлов в воде.

Временной подход позволяет построить модель процесса, выражая временные ряды как выход линейного фильтра, имеющего случайный вход и состоящего из ряда передаточных функций [108]. Случайным входом являются ряды наблюдений, при этом будущее значение какой-либо величины выражается через совокупность предшествующих значений, например, с помощью регрессионных уравнений. Характерной особенностью анализируемых временных рядов должна быть статистическая зависимость результатов наблюдений. Отсюда – прогностическая направленность используемого метода.

Данный подход предполагает выбор подходящей параметрической модели для исследуемого временного ряда и оценку ее параметров. Для описания процессов используются модели авторегрессии, скользящего среднего, смешанная модель процесса авторегрессии – скользящего среднего, а для нестационарных процессов – модель авторегрессии – проинтегрированного скользящего среднего.

Развитые в работе [108] параметрические методы являются более экономными по сравнению с обычным спектральным анализом, так как в модели при этом используется сравнительно небольшое число параметров. Предложенный класс параметрических моделей является довольно широким и помимо рассматриваемых обычно стационарных процессов, включает некоторые нестационарные процессы, в частности, связанные с сезонными изменениями и содержащие периодические компоненты известной частоты. В этом важное преимущество временного подхода по сравнению с частотным, который требует стационарности данных. Во втором случае нестационарные процессы могут быть преобразованы в стационарные при помощи полиномов, но это представляется весьма искусственным.

Моделирование качества воды с помощью временного подхода Бокса – Дженкинса часто используется. Процедура построения моделей заключается в установлении соответствия выбранного класса статистических моделей и имеющихся данных. При идентификации требуемого класса моделей временному ряду используются автокорреляционные и частные автокорреляционные функции. Затем производится подгонка модели, которая приводит к оценкам правдоподобия параметров модели, после чего проводится диагностическая проверка. Если таким образом выявляется неадекватность модели, то могут быть проведены итеративные циклы идентификации, подгонки и диагностической проверки. Затем статистическая модель может быть использована для прогнозирования.

Статистические модели загрязнения речной воды тяжелыми металлами позволяют с хорошей точностью получать сведения о показателях качества воды. Следует иметь в виду, что статистические методы множественной корреляции, регрессионного и дисперсионного анализа могут с успехом применяться для прогноза качества воды лишь в случае сравнительно простых водных экологических систем.

Перспективными методами прогнозирования качества воды являются методы, основанные на принципе самоорганизации математических моделей. Сущность метода заключается в опробовании математических моделей при постепенном их усложнении и выборе единственной модели оптимальной сложности, соответствующей минимуму заданного критерия селекции [109]. Известны применения указанного принципа с помощью алгоритмов метода группового учета аргументов (МГУА) для прогноза качества воды, причем в ряде случаев на основании ограниченного количества экспериментальных данных.

Таким образом, статистические модели могут оказаться весьма удобными, особенно для прогнозирования загрязнения речной воды тяжелыми металлами. Однако все они обладают тем существенным недостатком, что не позволяют предвидеть случай резкого увеличения количества сбрасываемых загрязнителей (аварийные сбросы).

Другое направление в математическом моделировании загрязнения воды тяжелыми металлами – построение аналитических моделей, основанных на учете всевозможных физических, химических и биологических особенностей процессов загрязнения и самоочищения, происходящих в реке. В отличие от рассмотренных статистических методов, где моделируется поведение системы на основе информации о ее предшествующих состояниях, здесь моделируются сами происходящие процессы загрязнения

на основе известных закономерностей. Это и есть в собственном смысле имитационное моделирование загрязнения речной воды.

При формировании типа аналитической модели, прежде всего, учитывается характер загрязнения, т.е. является оно консервативным или нет. Под неконсервативным загрязнением, как правило, понимается загрязнение органическими веществами, которые трансформируются в потоке, разлагаясь, окисляясь и выпадая в осадок. Изучение поведения консервативного загрязнения, в нашем случае тяжелыми металлами, заменяется исследованием гидравлического типа.

Детерминистические модели ориентированы на получение строго определенных значений показателей качества воды. В противовес таким моделям возможно построить стохастические модели, которые могут дать распределение вероятностей для соответствующих показателей качества воды в любой точке потока.

Рассмотренные модели загрязнения речной воды можно использовать для прогнозирования показателей качества воды. Статистические модели могут использоваться при составлении прогнозов любой заблаговременности (краткосрочных и долгосрочных). Важно, однако, чтобы частота экспериментальных данных, на которых основаны статистические методы прогноза, находилась в соответствии с периодом заблаговременности прогноза. Для краткосрочных прогнозов применение статистических методов требует непрерывного наблюдения над показателями качества воды. При этом ожидаемые значения получаются в виде статистически обоснованных усредненных показателей.

Статистические методы непригодны в случаях резкого изменения концентраций тяжелых металлов в воде, например, при «залповых» сбросах загрязнения. В таких случаях краткосрочных прогноз распространения загрязнения ниже места сброса целесообразно производить на основе изложенных аналитических имитационных моделей. При этом прогнозируемые значения концентраций загрязняющих веществ вблизи от места сброса можно рассчитать на основе двумерных или трехмерных моделей загрязнения при соответствующих начальных и граничных условиях. Прогноз дальнейшего распространения загрязнения по длине водотока с учетом пространственного распределения проводить не целесообразно, так как определение коэффициентов турбулентной диффузии является сложной задачей, особенно для крупных рек. При наличии в потоке струй, не смешивающихся на значительном расстоянии, расчет распространения загрязнения следует производить с учетом гидравлической картины течения для конкретного водотока.

3.1.2. Гидрологический режим реки Суры, ее основные органолептические и физико-химические показатели [64]

Река Сура является сложным объектом для прогноза уровней загрязнения поверхностных вод тяжелыми металлами. Это обусловлено множеством источников загрязнения, режим которых не всегда поддается учету.

Бассейн Суры и ее притоков расположен в правобережье Средней Волги. Площадь водосбора 67500 кв. км. Густота речной сети – 0,47; озерность и заболоченность – менее 1 %, лишь в верховье местами заболоченность составляет 2 %. Сура берет начало на Приволжской возвышенности в юго-западной части Ульяновской области и течет по ней сначала на запад, затем от г. Пензы в основном на север, почти в меридиональном направлении и впадает в Волгу у г. Васильсурска.

Длина Суры 841 км. Исток реки Суры в виде ручья глубиной 20–30 см и шириной 1,2–2,0 м начинается несколько ниже Филиппова Ключа при слиянии речек Черная и Кармала. Фактически Сура начинает формироваться у с. Явлейки, где стоит плотина, образовавшая маленькое водохранилище.

На протяжении 70 км, протекая между увалами Ульяновской, затем Пензенской области, река в меженный период имеет среднюю глубину 50–60 см и ширину 3–4 м. В мае, после спада весеннего паводка, в районе г. Сосновоборска река имеет ширину около 10–15 м, глубину до 1 м, да и то только по узкому желобу. На протяжении 20 км она постоянно прерывается перекатами с глубиной, не превышающей 20 см.

Лишь при впадении р. Тешнярь, и особенно лесной Кадады, Сура становится более полноводной.

Устьем Узы заканчивается верхний участок Суры. Его длина 170 км. Он резко отличается от нижележащих тем, что долина узкая – 150–170 м и имеет горный характер. В 5 км ниже Узы Сура выходит из коренных пород, и ширина долины увеличивается до 3–12 км. Пойма приобретает однообразную ровную поверхность.

К устью правого притока Айва, сура имеет ширину 50–60 м и глубину на плесах 3–4 м. Протекает хорошо выраженной долине от 3 до 5 км.

На расстоянии примерно 200 км от Пензы в районе села Большие Березники ширина реки и глубины на плесах увеличиваются, соответственно 60–120 м и 4–5 м. Скорость течения сильно меняется, достигая на некоторых поворотах 2 м/с при средней скорости 0,8 м/с.

Выше с. Барыш по правому берегу в Суру впадает река Барыш. Устье Барыша является нижней границей среднего участка Суры. Длина этого участка – от Узы до Барыша – примерно 360 км.

От реки Алатыря начинается нижний участок Суры. Река становится шире, привольнее, но глубокие участки все еще прерываются мелководьями. В нижнем течении Суры произошли существенные изменения в связи с постройкой на Волге Чебоксарского водохранилища.

Загрязнение реки Суры в основном связано с промышленными, сельскохозяйственными и коммунальными стоками г. Пензы и Пензенской области. При этом наибольшее количество загрязненных стоков дает Пенза, что обуславливает ухудшение качества воды в черте города и ниже его.

В общем объеме сбрасываемых сточных вод сегодня порядка 45 % составляют сбросы предприятий промышленности и порядка 46 % – сбросы жилищно-коммунального хозяйства.

В целом влияние города на экологическое состояние реки можно наблюдать на створе при ее выходе из города (около с. Бессоновка), где в воде увеличивается содержание макро – и микроэлементов. Например, среднегодовая концентрация цинка в отдельных случаях превышает ПДК в 3 раза. Индекс загрязнения воды (ИЗВ) на этом участке реки – 2,53, что соответствует 4 классу опасности – вода загрязненная. Как видим, город вносит «существенный вклад» в загрязнение Суры, которая входит в группу 16 самых загрязненных рек бассейна Волги.

Всего в городе более 200 больших и малых предприятий. Коллекторная система в городе одна: здесь и сточные воды предприятия, и хозяйственно – бытовые стоки. Поэтому и канализационная сеть, и очистные сооружения перегружены. Иногда происходят выбросы в реки без очистки. Имеют место и аварийные выбросы сточных вод на предприятиях. Очистные сооружения производят очистку сточных вод по 13 ингредиентам. Эффективность очистки каждого ингредиента различна и колеблется от 30 до 90 %.

Наиболее загрязненными из обследованных являются артскважины ОАО «Биосинтез», ОАО «ЗИФ» и т.д.

Река Сура – это равнинная река. По площади водосбора (5,0–50,0 тыс. км²) она относится к средней. Характерный средний годовой расход воды составляет от 25–50 до 250–500 м³/с. Перемешивание в реке умеренное. В основе грунта гравий, песок и ил. Продольный уклон, непосредственно влияющий на скорость течения, составляет 0,06–1,2 ‰. Коэффициент Шези равен 30–60 м^{1/2}/с.

Воды Суры относятся к гидрокарбонатному классу. Согласно данным СЭС 2003–2005 года эти воды характеризуются многообразием химических ингредиентов, определяющих микроэлементный и макроэлементный состав реки Суры (табл. 1–19).

Т а б л и ц а 1

Микроэлементный и макроэлементный состав реки Суры

| № п/п | Названия | ПДК | 2005 |
|-------|-----------------------------|---------|-------|
| 1 | рН | 6,5–8,5 | 7,1 |
| 2 | Взвешенные вещества, мг/л | 20 | 32 |
| 3 | Сухой остаток, мг/л | 1000 | 181 |
| 4 | Растворенный кислород, мг/л | 6 | 8,2 |
| 5 | Азот аммонийный, мг/л | 0,4 | 0,3 |
| 6 | Азот нитритов, мг/л | 0,02 | 0,06 |
| 7 | Азот нитратов, мг/л | 9,1 | 1,1 |
| 8 | Фосфаты, мг/л | 0,6 | 0,2 |
| 9 | Хлориды, мг/л | 300 | 4 |
| 10 | Сульфаты, мг/л | 100 | 18 |
| 11 | Фториды, мг/л | 0,75 | 0,3 |
| 12 | Щелочность, мг/л | | 80 |
| 13 | Калий, мг/л | 50 | 5,5 |
| 14 | Натрий, мг/л | 120 | 8,7 |
| 15 | Кальций, мг/л | 180 | 34 |
| 16 | Магний, мг/л | 40 | 12,8 |
| 17 | Жесткость, мг-экв/л | | 2,7 |
| 18 | Нефтепродукты, мг/л | 0,05 | 0,07 |
| 19 | СПАВ, мг/л | 0,5 | 0,13 |
| 20 | Фенолы, мг/л | 0,001 | 0,004 |
| 21 | Активность по Cs-137, Бк/л | | 12,27 |

Т а б л и ц а 2

Органолептические и физико-химические показатели водных образцов, отобранных из реки Суры в районе ТЭЦ-1, 12 марта 2003 г.

| Определяемые показатели | Результаты исследований | Допустимые уровни | Погрешность |
|------------------------------|-------------------------|-------------------|-------------|
| 1 | 2 | 3 | 4 |
| 1. Цветность (в градусах) | 35 | Не более 35 | 2,5 |
| 2. Запах (в баллах) | 0 | Не более 2 | |

Окончание табл. 2

| 1 | 2 | 3 | 4 |
|----------------------------|---------|-----------|--------|
| 3. Fe, мг/л (суммарно) | 0,87 | 0,3 мг/л | ±0,174 |
| 4. Mn, мг/л | 0,521 | 0,1 мг/л | ±0,14 |
| 5. Mo, мг/л | <0,0025 | 0,25 мг/л | |
| 6. As, мг/л | <0,005 | 0,05 мг/л | |
| 7. Pb, мг/л | 0,006 | 0,03 мг/л | ±0,004 |
| 8. Cr ⁺⁶ , мг/л | <0,01 | 0,05 мг/л | |
| 9. Cr ⁺³ , мг/л | <0,01 | 0,5 мг/л | |

Таблица 3

Органолептические и физико-химические показатели водных образцов, отобранных из реки Суры в районе ТЭЦ-1, 5 июля 2003 г.

| Определяемые показатели | Результаты исследований | Допустимые уровни | Погрешность |
|------------------------------|-------------------------|-------------------|-------------|
| 1. Цветность (в градусах) | 15 | Не более 35 | 2,0 |
| 2. Запах (в баллах) | 0 | Не более 2 | |
| 3. Fe, мг/л (суммарно) | 0,76 | 0,3 мг/л | 0,186 |
| 4. Mn, мг/л | 0,19 | 0,1 мг/л | 0,014 |
| 5. Mo, мг/л | <0,0025 | 0,25 мг/л | |
| 6. As, мг/л | <0,005 | 0,05 мг/л | |
| 7. Pb, мг/л | 0,007 | 0,03 мг/л | 0,005 |
| 8. Cr ⁺⁶ , мг/л | <0,01 | 0,05 мг/л | |
| 9. Cr ⁺³ , мг/л | <0,01 | 0,5 мг/л | |

Таблица 4

Органолептические и физико-химические показатели водных образцов, отобранных из реки Суры в районе ТЭЦ-1, 18 сентября 2003 г.

| Определяемые показатели | Результаты исследований | Допустимые уровни | Погрешность |
|------------------------------|-------------------------|-------------------|-------------|
| 1 | 2 | 3 | 4 |
| 1. Цветность (в градусах) | 20,0 | Не более 35 | 2,0 |
| 2. Запах (в баллах) | 0 | Не более 2 | |

Окончание табл. 4

| 1 | 2 | 3 | 4 |
|----------------------------|---------|-----------|-------|
| 3. Fe, мг/л (суммарно) | 0,93 | 0,3 мг/л | 0,186 |
| 4. Mn, мг/л | 0,046 | 0,1 мг/л | 0,014 |
| 5. Mo, мг/л | <0,0025 | 0,25 мг/л | |
| 6. As, мг/л | <0,005 | 0,05 мг/л | |
| 7. Pb, мг/л | 0,009 | 0,03 мг/л | 0,005 |
| 8. Cr ⁺⁶ , мг/л | <0,01 | 0,05 мг/л | |
| 9. Cr ⁺³ , мг/л | <0,01 | 0,5 мг/л | |

Таблица 5

Органолептические и физико-химические показатели водных образцов, отобранных из реки Суры в районе ТЭЦ-1, 13 марта 2004 г.

| Определяемые показатели | Результаты исследований | Допустимые уровни | Погрешность |
|------------------------------|-------------------------|-------------------|-------------|
| 1. Цветность (в градусах) | 35 | Не более 35 | 2,0 |
| 2. Запах (в баллах) | 0 | Не более 2 | |
| 3. Fe, мг/л (суммарно) | 0,9 | 0,3 мг/л | 0,186 |
| 4. Mn, мг/л | 0,54 | 0,1 мг/л | 0,014 |
| 5. Mo, мг/л | <0,0025 | 0,25 мг/л | |
| 6. As, мг/л | <0,005 | 0,05 мг/л | |
| 7. Pb, мг/л | 0,007 | 0,03 мг/л | 0,005 |
| 8. Cr ⁺⁶ , мг/л | <0,01 | 0,05 мг/л | |
| 9. Cr ⁺³ , мг/л | <0,01 | 0,5 мг/л | |

Таблица 6

Органолептические и физико-химические показатели водных образцов, отобранных из реки Суры в районе ТЭЦ-1, 6 июля 2004 г.

| Определяемые показатели | Результаты исследований | Допустимые уровни | Погрешность |
|------------------------------|-------------------------|-------------------|-------------|
| 1 | 2 | 3 | 4 |
| 1. Цветность (в градусах) | 20 | Не более 35 | 2,0 |
| 2. Запах (в баллах) | 0 | Не более 2 | |

Окончание табл. 6

| 1 | 2 | 3 | 4 |
|----------------------------|---------|-----------|-------|
| 3. Fe, мг/л (суммарно) | 0,79 | 0,3 мг/л | 0,186 |
| 4. Mn, мг/л | 0,22 | 0,1 мг/л | 0,014 |
| 5. Mo, мг/л | <0,0025 | 0,25 мг/л | |
| 6. As, мг/л | <0,005 | 0,05 мг/л | |
| 7. Pb, мг/л | 0,009 | 0,03 мг/л | 0,005 |
| 8. Cr ⁺⁶ , мг/л | <0,01 | 0,05 мг/л | |
| 9. Cr ⁺³ , мг/л | <0,01 | 0,5 мг/л | |

Таблица 7

Органолептические и физико-химические показатели водных образцов,
отобранных из реки Суры в районе ТЭЦ-1, 20 сентября 2004 г.

| Определяемые показатели | Результаты исследований | Допустимые уровни | Погрешность |
|------------------------------|----------------------------|----------------------|-------------|
| 1. Цветность (в градусах) | 25 | Не более 35 | 2,0 |
| 2. Запах (в баллах) | 0 | Не более 2 | |
| 3. Fe, мг/л (суммарно) | 0,93 | 0,3 мг/л | 0,186 |
| 4. Mn, мг/л | 0,05 | 0,1 мг/л | 0,014 |
| 5. Mo, мг/л | <0,0025 | 0,25 мг/л | |
| 6. As, мг/л | <0,005 | 0,05 мг/л | |
| 7. Pb, мг/л | 0,01 | 0,03 мг/л | 0,005 |
| 8. Cr ⁺⁶ , мг/л | <0,01 | 0,05 мг/л | |
| 9. Cr ⁺³ , мг/л | <0,01 | 0,5 мг/л | |

Таблица 8

Органолептические и физико-химические показатели водных образцов,
отобранных из реки Суры в районе ТЭЦ-1, 12 марта 2005 г.

| Определяемые показатели | Результаты исследований | Допустимые уровни | Погрешность |
|------------------------------|----------------------------|----------------------|-------------|
| 1 | 2 | 3 | 4 |
| 1. Цветность (в градусах) | 35 | Не более 35 | 2,0 |
| 2. Запах (в баллах) | 0 | Не более 2 | |

Окончание табл. 8

| 1 | 2 | 3 | 4 |
|----------------------------|---------|-----------|-------|
| 3. Fe, мг/л (суммарно) | 0,9 | 0,3 мг/л | 0,186 |
| 4. Mn, мг/л | 0,571 | 0,1 мг/л | 0,014 |
| 5. Mo, мг/л | <0,0025 | 0,25 мг/л | |
| 6. As, мг/л | <0,005 | 0,05 мг/л | |
| 7. Pb, мг/л | 0,008 | 0,03 мг/л | 0,005 |
| 8. Cr ⁺⁶ , мг/л | <0,01 | 0,05 мг/л | |
| 9. Cr ⁺³ , мг/л | <0,01 | 0,5 мг/л | |

Таблица 9

Органолептические и физико-химические показатели водных образцов,
отобранных из реки Суры в районе ТЭЦ-1, 7 июля 2005 г.

| Определяемые показатели | Результаты исследований | Допустимые уровни | Погрешность |
|------------------------------|----------------------------|----------------------|-------------|
| 1. Цветность (в градусах) | 20 | Не более 35 | 2,0 |
| 2. Запах (в баллах) | 0 | Не более 2 | |
| 3. Fe, мг/л (суммарно) | 0,8 | 0,3 мг/л | 0,186 |
| 4. Mn, мг/л | 0,23 | 0,1 мг/л | 0,014 |
| 5. Mo, мг/л | <0,0025 | 0,25 мг/л | |
| 6. As, мг/л | <0,005 | 0,05 мг/л | |
| 7. Pb, мг/л | 0,009 | 0,03 мг/л | 0,005 |
| 8. Cr ⁺⁶ , мг/л | <0,01 | 0,05 мг/л | |
| 9. Cr ⁺³ , мг/л | <0,01 | 0,5 мг/л | |

Таблица 10

Органолептические и физико-химические показатели водных образцов,
отобранных из реки Суры в районе ТЭЦ-1, 22 сентября 2005 г.

| Определяемые показатели | Результаты исследований | Допустимые уровни | Погрешность |
|------------------------------|----------------------------|----------------------|-------------|
| 1 | 2 | 3 | 4 |
| 1. Цветность (в градусах) | 25 | Не более 35 | 2,0 |

Окончание табл. 10

| 1 | 2 | 3 | 4 |
|----------------------------|---------|------------|-------|
| 2. Запах (в баллах) | 0 | Не более 2 | |
| 3. Fe, мг/л (суммарно) | 0,95 | 0,3 мг/л | 0,186 |
| 4. Mn, мг/л | 0,056 | 0,1 мг/л | 0,014 |
| 5. Mo, мг/л | <0,0025 | 0,25 мг/л | |
| 6. As, мг/л | <0,005 | 0,05 мг/л | |
| 7. Pb, мг/л | 0,01 | 0,03 мг/л | 0,005 |
| 8. Cr ⁺⁶ , мг/л | <0,01 | 0,05 мг/л | |
| 9. Cr ⁺³ , мг/л | <0,01 | 0,5 мг/л | |

Таблица 11

Органолептические и физико-химические показатели водных образцов, отобранных из реки Суры в районе Шуистского моста, 12 марта 2003 г.

| Определяемые показатели | Результаты исследований | Допустимые уровни | Погрешность |
|------------------------------|-------------------------|-------------------|-------------|
| 1. Цветность (в градусах) | 30 | Не более 35 | 2,0 |
| 2. Запах (в баллах) | 0 | Не более 2 | |
| 3. Fe, мг/л (суммарно) | 0,89 | 0,3 мг/л | 0,186 |
| 4. Mn, мг/л | 0,6 | 0,1 мг/л | 0,014 |
| 5. Mo, мг/л | <0,0025 | 0,25 мг/л | |
| 6. As, мг/л | <0,005 | 0,05 мг/л | |
| 7. Pb, мг/л | 0,003 | 0,03 мг/л | 0,005 |
| 8. Cr ⁺⁶ , мг/л | <0,01 | 0,05 мг/л | |
| 9. Cr ⁺³ , мг/л | <0,01 | 0,5 мг/л | |

Т а б л и ц а 1 2

Органолептические и физико-химические показатели водных образцов, отобранных из реки Суры в районе Шуистского моста, 6 июля 2003 г.

| Определяемые показатели | Результаты исследований | Допустимые уровни | Погрешность |
|----------------------------|-------------------------|-------------------|-------------|
| 1. Цветность (в градусах) | 20 | Не более 35 | 2,0 |
| 2. Запах (в баллах) | 0 | Не более 2 | |
| 3. Fe, мг/л (суммарно) | 0,82 | 0,3 мг/л | 0,186 |
| 4. Mn, мг/л | 0,312 | 0,1 мг/л | 0,014 |
| 5. Mo, мг/л | <0,0025 | 0,25 мг/л | |
| 6. As, мг/л | <0,005 | 0,05 мг/л | |
| 7. Pb, мг/л | 0,0020 | 0,03 мг/л | 0,005 |
| 8. Cr ⁺⁶ , мг/л | <0,01 | 0,05 мг/л | |
| 9. Cr ⁺³ , мг/л | <0,01 | 0,5 мг/л | |

Т а б л и ц а 1 3

Органолептические и физико-химические показатели водных образцов, отобранных из реки Суры в районе Шуистского моста, 18 сентября 2003 г.

| Определяемые показатели | Результаты исследований | Допустимые уровни | Погрешность |
|----------------------------|-------------------------|-------------------|-------------|
| 1. Цветность (в градусах) | 20 | Не более 35 | 2,0 |
| 2. Запах (в баллах) | 0 | Не более 2 | |
| 3. Fe, мг/л (суммарно) | 0,89 | 0,3 мг/л | 0,186 |
| 4. Mn, мг/л | 0,049 | 0,1 мг/л | 0,014 |
| 5. Mo, мг/л | <0,0025 | 0,25 мг/л | |
| 6. As, мг/л | <0,005 | 0,05 мг/л | |
| 7. Pb, мг/л | < 0,0001 | 0,03 мг/л | 0,005 |
| 8. Cr ⁺⁶ , мг/л | <0,01 | 0,05 мг/л | |
| 9. Cr ⁺³ , мг/л | <0,01 | 0,5 мг/л | |

Т а б л и ц а 14

Органолептические и физико-химические показатели водных образцов, отобранных из реки Суры в районе Шуистского моста, 13 марта 2004 г.

| Определяемые показатели | Результаты исследований | Допустимые уровни | Погрешность |
|----------------------------|-------------------------|-------------------|-------------|
| 1. Цветность (в градусах) | 35 | Не более 35 | 2,0 |
| 2. Запах (в баллах) | 0 | Не более 2 | |
| 3. Fe, мг/л (суммарно) | 0,9 | 0,3 мг/л | 0,186 |
| 4. Mn, мг/л | 0,62 | 0,1 мг/л | 0,014 |
| 5. Mo, мг/л | <0,0025 | 0,25 мг/л | |
| 6. As, мг/л | <0,005 | 0,05 мг/л | |
| 7. Pb, мг/л | 0,0038 | 0,03 мг/л | 0,005 |
| 8. Cr ⁺⁶ , мг/л | <0,01 | 0,05 мг/л | |
| 9. Cr ⁺³ , мг/л | <0,01 | 0,5 мг/л | |

Т а б л и ц а 15

Органолептические и физико-химические показатели водных образцов, отобранных из реки Суры в районе Шуистского моста, 6 июля 2004 г.

| Определяемые показатели | Результаты исследований | Допустимые уровни | Погрешность |
|----------------------------|-------------------------|-------------------|-------------|
| 1. Цветность (в градусах) | 20 | Не более 35 | 2,0 |
| 2. Запах (в баллах) | 0 | Не более 2 | |
| 3. Fe, мг/л (суммарно) | 0,83 | 0,3 мг/л | 0,186 |
| 4. Mn, мг/л | 0,377 | 0,1 мг/л | 0,014 |
| 5. Mo, мг/л | <0,0025 | 0,25 мг/л | |
| 6. As, мг/л | <0,005 | 0,05 мг/л | |
| 7. Pb, мг/л | 0,0028 | 0,03 мг/л | 0,005 |
| 8. Cr ⁺⁶ , мг/л | <0,01 | 0,05 мг/л | |
| 9. Cr ⁺³ , мг/л | <0,01 | 0,5 мг/л | |

Т а б л и ц а 1 6

Органолептические и физико-химические показатели водных образцов, отобранных из реки Суры в районе Шуистского моста, 20 сентября 2004 г.

| Определяемые показатели | Результаты исследований | Допустимые уровни | Погрешность |
|----------------------------|-------------------------|-------------------|-------------|
| 1. Цветность (в градусах) | 25 | Не более 35 | 2,0 |
| 2. Запах (в баллах) | 0 | Не более 2 | |
| 3. Fe, мг/л (суммарно) | 0,91 | 0,3 мг/л | 0,186 |
| 4. Mn, мг/л | 0,05 | 0,1 мг/л | 0,014 |
| 5. Mo, мг/л | <0,0025 | 0,25 мг/л | |
| 6. As, мг/л | <0,005 | 0,05 мг/л | |
| 7. Pb, мг/л | <0,0002 | 0,03 мг/л | 0,005 |
| 8. Cr ⁺⁶ , мг/л | <0,01 | 0,05 мг/л | |
| 9. Cr ⁺³ , мг/л | <0,01 | 0,5 мг/л | |

Т а б л и ц а 1 7

Органолептические и физико-химические показатели водных образцов, отобранных из реки Суры в районе Шуистского моста, 14 марта 2005 г.

| Определяемые показатели | Результаты исследований | Допустимые уровни | Погрешность |
|----------------------------|-------------------------|-------------------|-------------|
| 1. Цветность (в градусах) | 40 | Не более 35 | 2,0 |
| 2. Запах (в баллах) | 0 | Не более 2 | |
| 3. Fe, мг/л (суммарно) | 0,96 | 0,3 мг/л | 0,186 |
| 4. Mn, мг/л | 0,631 | 0,1 мг/л | 0,014 |
| 5. Mo, мг/л | <0,0025 | 0,25 мг/л | |
| 6. As, мг/л | <0,005 | 0,05 мг/л | |
| 7. Pb, мг/л | 0,004 | 0,03 мг/л | 0,005 |
| 8. Cr ⁺⁶ , мг/л | <0,01 | 0,05 мг/л | |
| 9. Cr ⁺³ , мг/л | <0,01 | 0,5 мг/л | |

Т а б л и ц а 18

Органолептические и физико-химические показатели водных образцов, отобранных из реки Суры в районе Шуистского моста, 8 июля 2005 г.

| Определяемые показатели | Результаты исследований | Допустимые уровни | Погрешность |
|----------------------------|-------------------------|-------------------|-------------|
| 1. Цветность (в градусах) | 20 | Не более 35 | 2,0 |
| 2. Запах (в баллах) | 0 | Не более 2 | |
| 3. Fe, мг/л (суммарно) | 0,85 | 0,3 мг/л | 0,186 |
| 4. Mn, мг/л | 0,377 | 0,1 мг/л | 0,014 |
| 5. Mo, мг/л | <0,0025 | 0,25 мг/л | |
| 6. As, мг/л | <0,005 | 0,05 мг/л | |
| 7. Pb, мг/л | 0,0028 | 0,03 мг/л | 0,005 |
| 8. Cr ⁺⁶ , мг/л | <0,01 | 0,05 мг/л | |
| 9. Cr ⁺³ , мг/л | <0,01 | 0,5 мг/л | |

Т а б л и ц а 19

Органолептические и физико-химические показатели водных образцов, отобранных из реки Суры в районе Шуистского моста, 24 сентября 2005 г.

| Определяемые показатели | Результаты исследований | Допустимые уровни | Погрешность |
|----------------------------|-------------------------|-------------------|-------------|
| 1. Цветность (в градусах) | 25 | Не более 35 | 2,0 |
| 2. Запах (в баллах) | 0 | Не более 2 | |
| 3. Fe, мг/л (суммарно) | 0,96 | 0,3 мг/л | 0,186 |
| 4. Mn, мг/л | 0,051 | 0,1 мг/л | 0,014 |
| 5. Mo, мг/л | <0,0025 | 0,25 мг/л | |
| 6. As, мг/л | <0,005 | 0,05 мг/л | |
| 7. Pb, мг/л | <0,0002 | 0,03 мг/л | 0,005 |
| 8. Cr ⁺⁶ , мг/л | <0,01 | 0,05 мг/л | |
| 9. Cr ⁺³ , мг/л | <0,01 | 0,5 мг/л | |

Значение рН водных образцов, отобранных из реки Суры в течение 2003–2005 года изменялось в пределах от 6,5 до 8,2, не выходя за пределы нормы. Среднее значение величины рН составило 7,5.

Содержание растворенных веществ по сухому остатку в среднем за год составило 225 мг/л.

Содержание органических соединений по БПК-5 колебалось от 0,24–0,28 (в сентябре), до 3,6–4,2 мг/л (в июле), составляя в среднем 2 мг/л (1 ПДК).

Концентрация аммонийного азота изменялась в пределах от 0,08–0,084 мг/л (в марте) до 0,72–0,74 мг/л (1,8 ПДК) в сентябре. В среднем за год она составила 0,31 мг/л (0,8 ПДК).

Концентрация нитритного азота колебалась в пределах от 0,012–0,013 мг/л (в марте) до 0,14–0,16 мг/л (7 ПДК) в июле, составляя в среднем 0,04 мг/л (2 ПДК); нитратного азота – от 0,35 мг/л в августе до 1,72 мг/л в марте. Среднегодовая концентрация его была равна 0,88 мг/л, что составило 0,1 ПДК.

Концентрация фосфатов изменялась от 0,09–0,1 мг/л (в марте) до 0,7–0,8 мг/л (1,2 ПДК) в сентябре, в среднем за год составляя 0,26–0,28 мг/л (0,4 ПДК).

Содержание фенолов в течение всего года превышало предельно-допустимую концентрацию в 2,5–12 раз. Минимальная концентрация наблюдалась в холодное время года (с ноября по март). Максимум (12 ПДК) наблюдался в июле. Высокое содержание фенолов в этот период связано с процессом «цветения» воды в реке Сура. Средняя концентрация фенолов составила 0,004 мг/л (4 ПДК).

3.1.3. Определение никеля, кадмия и цинка в водных образцах реки Суры

Пробоотбор водных образцов из реки Суры осуществлялся в двух местах: вблизи Шуистского моста и ТЭЦ-1. Заборы были произведены в течение 2003–2005 года. Пробы воды (объем не менее 250 см³) помещались в стеклянные или полиэтиленовые бутылки, предварительно ополоснутые отбираемой водой. Объем пробы воды при определении форм металлов для облегчения перемешивания не превышал 2/3 объема бутылки для хранения пробы.

Для определения валового содержания никеля, кадмия и цинка и их лабильных форм мы отбирали по 5 параллельных проб воды (1 резервная). Мы попытались также оценить динамику сезонных изменений концентра-

ции этих элементов, осуществляя пробоотбор в периоды весеннего половодья, летней межени и осеннего паводка в течение 2003–2005 гг.

В качестве базовых методов определения кадмия, никеля и цинка в реке Суре были выбраны вольтамперометрический и пламенный атомно-абсорбционный методы [25, 26].

При определении валового содержания кадмия и цинка вольтамперометрическим методом диапазоны определяемых концентраций ионов составили:

кадмия 0,1–500 мкг/л;

цинка 10–1000 мкг/л

Концентрирование тяжелых металлов для последующего их определения вольтамперометрическим методом осуществлялось минерализацией пробы воды.

Положение пиков на вольтамперограмме соответствовала определенному металлу.

Высоты пиков пропорциональны массовой концентрации ионов металлов в водных растворах.

Определению концентраций кадмия и цинка не мешают 1000-кратные избытки ионов щелочных и щелочноземельных металлов, ионы железа, кобальта, никеля и некоторых элементов. Определению концентраций ионов цинка мешает десяти кратный избыток ионов меди.

Методика выполнения измерений обеспечивало выполнение измерений с погрешностью не превышающей значений, приведенных в табл. 20.

Нормы погрешности измерений представлены в табл. в относительной форме выражения для всего диапазона измеряемых значений показателя и соответствуют вероятности $P = 0,95$.

Т а б л и ц а 2 0

Нормы погрешностей определений.

| Наименование нормируемых элементов | Поддиапазоны измеряемых массовых концентраций ионов, мкг/дм ³ | Нормы погрешности, % |
|------------------------------------|--|----------------------|
| Кадмий | от 0,1 до 1,0 включ. | 50 |
| | св. 1,0 до 500 включ. | 25 |
| Цинк | св. 10,0 до 100 включ. | 25 |
| | св. 100 | 15 |

При выполнении измерений соблюдались следующие условия:

- температура окружающего воздуха (25 ± 10) °С;
- питание – от сети переменного тока напряжением (220_{-33}^{+22}) В;
- атмосферное давление 84106,7 кПа;
- частотой (50 ± 1) Гц.

Выполнение анализа образцов начинали проводить от меньших концентраций к большим. Пипеткой вместимостью 20 мл отбирали 20 мл стандартного раствора соответствующего иона с минимальной массовой концентрацией и помещали в электрохимическую ячейку.

Стеклографитовую чашку закрепляли с помощью фторопластовой гайки. После установки на полярографе положения кнопок согласно табл. 21, включали датчик.

Т а б л и ц а 2 1

| | |
|----------------------------------|--|
| Диапазон тока | 5–250 |
| Компенсация | Отключена |
| Синхронизация | Отключена |
| Датчик | Отключен |
| Вид полярографии | 3-электродная переменного тока с квадратно-волновой модуляцией |
| Демпфирование | 0,1 |
| Амплитуда переменного напряжения | –30 мВ (возможно варьирование) (–20) |
| Скорость развертки | 30–100 мВ/с → 50 мВ/с |
| Режим работы | Накопление |
| Задержка | 110 с (возможно варьирование) |
| Начальное напряжение | –1,4 В –0,95 В |
| Направление развертки | Плюс |
| Амплитуда развертки | 1,5 В; 1,05 В |
| Режим | Непр. |
| Масштаб X | 200 мВ/см |
| Масштаб Y | 100 мВ/см (возможно варьирование) |
| Очистка электрода при потенциале | 0,3–0,7 В; +0,4 В |
| Мешалка | Вкл/авт |
| Перо | Включено |

Для цинка, кадмия потенциал накопления – 1,4 В, амплитуда развертки 1,5 В. После истечения времени электронакопления и успокоения раствора,

начиналась стадия анодной развертки потенциала, при завершении которой выключали датчик.

Устанавливали потенциал очистки электрода 0,4 В и включали датчик. В течение 40–100 с проводилась очистка поверхности стеклоуглеродного электрода при его вращении. Затем повторяли анализ.

За результат анализа принимали среднее арифметическое результатов двух параллельных определений. Исследуемый раствор затем сливали в приемный стакан, обращая внимание на то, чтобы датчик обязательно был отключен. Последовательно пипеткой вместимостью 20 мл помещали в электрохимическую ячейку растворы соответствующего иона большей концентрации.

Для каждого стандартного раствора снимали не менее двух вольтамперограмм.

Концентрация исследуемого компонента определялась высотой пика. Высота пика отсчитывалась от минимума анодного тока со стороны потенциалов, отрицательных по отношению к измеряемому пику, до максимума тока.

По полученным данным построили градуировочные графики в координатах: высота пика (мм) – концентрация металла (мкг/л), приведенные к единому масштабу по оси ординат с учетом диапазона измерений тока.

Ежедневно градуировочные графики проверялись по двум контрольным растворам.

Метод пламенной атомно-абсорбционной спектрометрии был основан на кислотной обработке воды (минерализации) с последующим атомно-абсорбционным определением концентраций никеля, кадмия и цинка в минерализаторе.

Погрешность результатов анализа с доверительной вероятностью $P = 0,95$, не превышало значений, рассчитанных по соотношениям табл. 22.

Т а б л и ц а 2 2

Диапазоны и показатели погрешностей результатов анализа при $P = 0,95$

| Металл | Диапазон определяемых концентраций, мг/дм ³ | Предел возможных значений погрешности результатов анализа, Δ, мг/дм ³ | Допускаемое расхождение двух параллельных определений, d^2 , мг/дм ³ | Допускаемое расхождение двух результатов анализа, D_2 мг/дм ³ |
|---|--|--|---|--|
| Кадмий | 0,01–1,0 | 0,18С–0,003 | 0,25С–0,004 | 0,30С ÷ 0,005 |
| Никель | 0,02–5,0 | 0,08С–0,008 | 0,10С–0,010 | 0,13 ÷ 0,012 |
| Цинк | 0,01–1,0 | 0,16С–0,002 | 0,22С–0,003 | 0,26С ÷ 0,004 |
| С – среднее арифметическое двух результатов анализа | | | | |

При выполнении измерений соблюдались следующие условия:

– температура окружающего воздуха (20 ± 5) °С;

– относительная влажность (80 ± 5) %;

– атмосферное давление 84–106 кПа;

– частота переменного тока (50 ± 1) Гц.

Т а б л и ц а 23

Аналитические условия определения металлов методом
пламенной атомно-абсорбционной спектрометрии.

(Спектральная ширина щели – 0,25 нм, постоянная времени – 5 с)

| Металл | Аналитическая линия, нм | Рабочий ток лампы, мА | Высота рабочей зоны пламени, мм |
|--------|-------------------------|-----------------------|---------------------------------|
| Кадмий | 228,8 | 3,1–3,5 | 7–8 |
| Никель | 232,0 | 4,3–4,7 | 7–8 |
| Цинк | 213,9 | 3,1–3,5 | 7–8 |

Для определения концентрации суммы форм металлов пробу воды перемешивали в течение 5 мин в бутылки, затем быстро (1–2 мин) отбирали 50 мл пробы мерным цилиндром, переносили в стакан вместимостью 150 мл, добавляли 3 мл концентрированной азотной кислоты, полученный раствор упаривали на плитке, не допуская разбрызгивания, до влажных солей.

В случае большого содержания органических соединений к остатку добавляли еще 3 мл азотной кислоты и снова упаривали до влажных солей. Повторную обработку проводили до полного разрушения органических соединений, что контролировали по цвету остатка. (Остаток становился светлым). В стакан с влажным остатком приливали 20–30 мл 0,1 М азотной кислоты и полученный раствор количественно переносили в мерную колбу, которую также добавляли в мерную колбу. Раствор доводили до метки 0,1 М азотной кислотой и перемешивали.

При необходимости концентрирования пробы остаток после кислотной обработки переносили в колбу меньшего объема (25 мл). Настраивали прибор на режим измерения абсорбции одного из металлов согласно табл. 23, распыляли дистиллированную воду, устанавливали нулевое показание прибора по 0,1 М раствору азотной кислоты.

Одновременно с обработкой пробы проводили «холостой опыт», заменяя анализируемую пробу 50 мл дистиллированной воды.

Для определения концентрации растворенных форм металлов, оставшуюся после выполнения первой процедуры часть исходной пробы отфильтровывали через бумажный фильтр. Отбирали мерным цилиндром 50 мл отфильтрованной пробы и далее поступали как в первой процедуре.

Для измерения концентрации одного металла достаточно 3–5 мл пробы, всех трех металлов – 50 мл.

Операции повторяли для каждого из определяемых металлов.

Результаты вольтамперометрического определения кадмия и цинка в реке Суре представлены в табл. 24–25.

Т а б л и ц а 24

Результаты определения кадмия и цинка в реке Суре
вольтамперометрическим методом.

($n = 5$; $P = 0,95$, место пробоотбора Шуистский мост.)

| Определяемый элемент | Содержание элементов, мг/л | | |
|----------------------|----------------------------|-------|------|
| | 2003 | 2004 | 2005 |
| Цинк | 0,03 | 0,03 | 0,06 |
| Кадмий | 0,008 | 0,009 | 0,02 |

Т а б л и ц а 25

Результаты определения кадмия и цинка в реке Суре
вольтамперометрическим методом.

($n = 5$; $P = 0,95$, место пробоотбора – ТЭЦ-1)

| Определяемый элемент | Содержание элементов, мг/л | | |
|----------------------|----------------------------|-------|-------|
| | 2003 | 2004 | 2005 |
| Цинк | 0,01 | 0,03 | 0,03 |
| Кадмий | 0,002 | 0,006 | 0,006 |

При определении никеля, кадмия и цинка методом пламенной атомно-абсорбционной спектроскопии нижней предел их определения составил для никеля и цинка – 50 мкг/л, а для кадмия – 10 мкг/л. Диапазон определяемых концентраций для цинка и никеля составил 50–500 мкг/л, а для кадмия – 10–100 мкг/л.

Результаты определения этих элементов в реке Суре методом пламенной атомно-абсорбционной спектроскопии представлены в табл. 26–27.

Т а б л и ц а 2 6

Результаты определения цинка, никеля и кадмия в реке Сура методом пламенной атомно-абсорбционной спектрометрии.

($n = 5$; $P = 0,95$, место пробоотбора – Шуистский мост)

| Определяемый элемент | Содержание элементов, мг/л | | |
|----------------------|----------------------------|-------|------|
| | 2003 | 2004 | 2005 |
| Цинк | 0,05 | 0,03 | 0,08 |
| Кадмий | 0,005 | 0,006 | 0,01 |
| Никель | 0,02 | 0,05 | 0,05 |

Т а б л и ц а 2 7

Результаты определения цинка, никеля и кадмия в реке Сура методом пламенной атомно-абсорбционной спектрометрии.

($n = 5$, $P = 0,95$; место пробоотбора – ТЭЦ-1)

| Определяемый элемент | Содержание элементов, мг/л | | |
|----------------------|----------------------------|-------|-------|
| | 2003 | 2004 | 2005 |
| Цинк | 0,01 | 0,01 | 0,04 |
| Кадмий | 0,002 | 0,005 | 0,006 |
| Никель | 0,01 | 0,03 | 0,03 |

3.1.4. Составление баланса распределения химических форм никеля, кадмия и цинка в реке Сура

Данные полученные нами вследствие анализа водных образцов, отобранных из реки Суры, показывают, что никель, кадмий, цинк находятся в растворенной, взвешенной и сорбированной формах.

Растворенная форма этих элементов представлена преимущественно неорганическими соединениями и растворенными соединениями, сорбированными поверхностью донных отложений непосредственно из воды; взвешенная форма – преимущественно органическими соединениями. Доминирующей миграционной формой никеля, кадмия и цинка в реке Сура является органическая форма. Наряду с этим нельзя исключать возможности существования этих металлов в сорбированной и аккумулятивной фитопланктоном форме и адсорбированной минеральной взвесью.

Введем для расчета следующие обозначения:

$v(\text{Ni})_B, v(\text{Cd})_B, v(\text{Zn})_B$ – количество никеля, кадмия и цинка остающееся в воде в растворенной форме.

$v(\text{Ni})_B, v(\text{Cd})_B, v(\text{Zn})_B$ – количество никеля, кадмия и цинка сорбированных и аккумулялированных форм фитопланктоном (всеми гидробионтами в более общем случае).

$v(\text{Ni})_D, v(\text{Cd})_D, v(\text{Zn})_D$ – количество мигрировавших в донные отложения форм никеля, кадмия, цинка в процессе седиментации взвешенного органического и минерального материала.

$v(\text{Ni})_{AD}, v(\text{Cd})_{AD}, v(\text{Zn})_{AD}$ – количество растворенных, сорбированных поверхностью донных отложений форм никеля, кадмия, цинка непосредственно из воды.

$v(\text{Ni})_{AB}, v(\text{Cd})_{AB}, v(\text{Zn})_{AB}$ – количество форм никеля, кадмия, цинка адсорбированные минеральной взвесью и содержащейся в ней.

Отсюда, мы можем записать уравнение материального баланса никеля, кадмия, цинка соответственно следующим образом:

$$\begin{aligned} v(\text{Ni}) &= v(\text{Ni})_B + v(\text{Ni})_{AD} + v(\text{Ni})_{AB} + v(\text{Ni})_B + v(\text{Ni})_D \\ v(\text{Cd}) &= v(\text{Cd})_B + v(\text{Cd})_{AD} + v(\text{Cd})_{AB} + v(\text{Cd})_B + v(\text{Cd})_D \quad (1) \\ v(\text{Zn}) &= v(\text{Zn})_B + v(\text{Zn})_{AD} + v(\text{Zn})_{AB} + v(\text{Zn})_B + v(\text{Zn})_D. \end{aligned}$$

Количество никеля, кадмия, цинка, адсорбированных донными наносами в общем виде оно пропорционально концентрациям металлов в реке C_{MB}

$$v(\text{Ni})_{AD} = \alpha' C_{MB} = \alpha' v(\text{Ni})_B / V$$

или

$$v(\text{Ni})_{AD} / V = (\alpha' / V) (v(\text{Ni})_B / V) = \alpha v(\text{Ni})_B / V.$$

Отсюда

$$v(\text{Ni})_{AD} = \alpha v(\text{Ni})_B;$$

$$v(\text{Cd})_{AD} = \alpha' C_{CM} = \alpha' v(\text{Cd})_B / V$$

или

$$v(\text{Cd})_{\text{Ад}} / V = (\alpha' / V)(v(\text{Cd})_{\text{В}} / V) = \alpha v(\text{Cd})_{\text{В}} / V .$$

Отсюда

$$v(\text{Cd})_{\text{Ад}} = \alpha v(\text{Cd})_{\text{В}} ;$$

$$v(\text{Zn})_{\text{Ад}} = \alpha' C_{\text{СМ}} = \alpha' v(\text{Zn})_{\text{В}} / V$$

или

$$v(\text{Zn})_{\text{Ад}} / V = (\alpha' / V)(v(\text{Zn})_{\text{В}} / V) = \alpha v(\text{Zn})_{\text{В}} / V .$$

Отсюда

$$v(\text{Cd})_{\text{Ад}} = \alpha v(\text{Cd})_{\text{В}} .$$

В первом приближении концентрации адсорбированного на взвеси металла пропорционально количеству взвеси и концентрации металла в воде $M_{\text{В}}/V$. Однако, учитывая физико-географические и геологические особенности, а также характер реки Суры, содержание взвеси можно принять за величину, мало меняющуюся на протяжении года (хотя в период межсезонья содержание взвеси в воде тем не менее увеличивается). Равенство, определяющее концентрации никеля, кадмия и цинка, адсорбированное на минеральной взвеси в единицах объема воды, будет выглядеть следующим образом:

$$v(\text{Ni})_{\text{АВ}} / V = \gamma v(\text{Ni})_{\text{В}} / V \text{ или } v(\text{Ni})_{\text{АВ}} = \gamma v(\text{Ni})_{\text{В}} ;$$

$$v(\text{Cd})_{\text{АВ}} / V = \gamma v(\text{Cd})_{\text{В}} / V \text{ или } v(\text{Cd})_{\text{АВ}} = \gamma v(\text{Cd})_{\text{В}} ; \quad (2)$$

$$v(\text{Zn})_{\text{АВ}} / V = \gamma v(\text{Zn})_{\text{В}} / V \text{ или } v(\text{Zn})_{\text{АВ}} = \gamma v(\text{Zn})_{\text{В}} .$$

где γ – коэффициент пропорциональности.

Переходим к концентрации никеля, кадмия и цинка на единицу объема воды:

$$C(\text{Ni}) = v(\text{Ni}) / V ; C(\text{Ni})_{\text{В}} = v(\text{Ni})_{\text{В}} / V ;$$

$$C(\text{Cd}) = v(\text{Cd}) / V ; C(\text{Cd})_{\text{В}} = v(\text{Cd})_{\text{В}} / V ;$$

$$C(\text{Zn}) = v(\text{Zn}) / V ; C(\text{Zn})_{\text{В}} = v(\text{Zn})_{\text{В}} / V .$$

Из большого количества факторов, влияющих на распределение и поведение тяжелых металлов в реке Суре, мы решили остановиться на следующих:

- комплексообразующая способность;
- взаимодействие с донными отложениями;
- осаждение на взвешенных частицах.

Скорости трех конкурирующих параллельных процессов в виде системы дифференциальных уравнений первого порядка:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{M[\text{ров}]} }{\partial t} &= k_1 C_{\text{ров}} C_M; \\ \frac{\partial C_{M[\text{до}]} }{\partial t} &= k_2 C_{\text{до}} C_M; \\ \frac{\partial C_{M[\text{вч}]} }{\partial t} &= k_3 C_{\text{вч}} C_M, \end{aligned} \quad (3)$$

где k_1, k_2, k_3 – константы скоростей конкурирующих процессов.

В рамках данной модели для отрезков времени, сопоставимых с временем поступления залпового сброса тяжелых металлов в исследуемый водный объект, концентрации рассматриваемых компонентов экосистемы принимаются неизменными. Поэтому значения $k_1 C_{\text{ров}}$; $k_2 C_{\text{до}}$; $k_3 C_{\text{вч}}$ являются постоянными и обозначаются знаками $K_{\text{ров}}$; $K_{\text{до}}$; $K_{\text{вч}}$. Для определения текущей концентрации тяжелых металлов в растворе C_M мы вводим значение $C_{M\Sigma}$, представляющее собой концентрацию, соответствующую суммарному содержанию связанных форм металлов. Данная концентрация равна изменению содержания связанных форм металлов в отдельных компонентах экосистемы.

$$C_{M\Sigma} = (C_{M[\text{ров}]} - C_{M[\text{ров}]}^0) + (C_{M[\text{до}]} - C_{M[\text{до}]}^0) + (C_{M[\text{вч}]} - C_{M[\text{вч}]}^0), \quad (4)$$

где $C_{M[\text{ров}]}^0$, $C_{M[\text{до}]}^0$, $C_{M[\text{вч}]}^0$ – концентрация связанных форм металла (мкг/л) в соответствующих компонентах экосистемы в единице объема воды в начальный момент времени. Тогда значение C_M мы выражаем следующим уравнением:

$$C_M = C_M^0 - C_{M\Sigma}, \quad (5)$$

где C_M^0 – исходная концентрация металла, поступающего в экосистему.

В результате система уравнений приобретает вид

$$\begin{aligned}\partial C_{M[\text{ров}]} / \partial t &= K_{\text{ров}} (C_M^0 - C_{M\Sigma}); \\ \partial C_{M[\text{до}]} / \partial t &= K_{\text{до}} (C_M^0 - C_{M\Sigma}); \\ \partial C_{M[\text{вч}]} / \partial t &= K_{\text{вч}} (C_M^0 - C_{M\Sigma}).\end{aligned}\quad (6)$$

При сложении уравнений системы с учетом (4) получаем дифференциальное уравнение для скорости изменения суммарного количества связанных форм металла

$$\partial C_{M\Sigma} / \partial t = (K_{\text{ров}} + K_{\text{до}} + K_{\text{вч}}) (C_M^0 - C_{M\Sigma}). \quad (7)$$

Вводя обозначения

$$K_{\Sigma} = K_{\text{ров}} + K_{\text{до}} + K_{\text{вч}}, \quad (8)$$

мы получаем решение уравнения (7) в виде

$$C_{M\Sigma} = C_M^0 (1 - e^{-K_{\Sigma} t}). \quad (9)$$

Разделив последовательно друг на друга уравнения системы (6) и проинтегрировав получившиеся соотношения от начала процесса до текущего момента, получим

$$(C_{M[\text{ров}]} - C_{M[\text{ров}]}^0) / K_{\text{ров}} = (C_{M[\text{до}]} - C_{M[\text{до}]}^0) / K_{\text{до}} = (C_{M[\text{вч}]} - C_{M[\text{вч}]}^0) / K_{\text{вч}} \quad (10)$$

Из равенств (10) выразим $C_{M[\text{ров}]}$ и $C_{M[\text{вч}]}$ через $C_{M[\text{до}]}$ и подставим их в (3). В результате данной операции получаем соотношение концентраций металла, связанного с донными отложениями и суммарной концентрацией связанных форм металла:

$$C_{M[\text{до}]} - C_{M[\text{до}]}^0 = C_{M\Sigma} K_{\text{до}} / K_{\Sigma}.$$

Аналогично мы имеем:

$$C_{M[\text{ров}]} - C_{M[\text{ров}]}^0 = C_{M\Sigma} K_{\text{ров}} / K_{\Sigma}; \quad (11)$$

$$C_{M[\text{вч}]} - C_{M[\text{вч}]}^0 = C_{M\Sigma} K_{\text{вч}} / K_{\Sigma}.$$

Полученные соотношения с учетом выражения (9) и начальных концентраций металла в соответствующих компонентах экосистемы $C_{M[\text{ров}]}^0$,

$C_{M[\text{до}]}^0$, $C_{M[\text{вч}]}^0$ делают решение системы (3), т.е. зависимости концентрации связанных форм тяжелых металлов от времени.

$$\begin{aligned} C_{M[\text{ров}]} &= C_{M[\text{ров}]}^0 + C_{M[\text{до}]}^0 K_{\text{до}} (1 - e^{-K_{\Sigma} t}) / K_{\Sigma}; \\ C_{M[\text{до}]} &= C_{M[\text{до}]}^0 + C_{M[\text{до}]}^0 K_{\text{до}} (1 - e^{-K_{\Sigma} t}) / K_{\Sigma}; \\ C_{M[\text{вч}]} &= C_{M[\text{вч}]}^0 + C_{M[\text{до}]}^0 K_{\text{до}} (1 - e^{-K_{\Sigma} t}) / K_{\Sigma}. \end{aligned} \quad (12)$$

Система уравнений (12) представляет собой простейшую математическую модель поведения тяжелых металлов в водной экосистеме.

3.1.5. Расчет концентрации взвешенных веществ

В речном потоке нами была выделена загрязненная струя, для которой были вычислены изменения концентраций взвешенных веществ в направлении продольной оси от начального до заданного створа. Уравнение распределения концентрации взвешенных веществ по длине потока x выглядело следующим образом:

$$C_{xi} = C_{\text{ТР}i} + (C_{\text{нач}i} - C_{\text{ТР}i}) e^{-\frac{B_{\text{д}}(u_i + k_i)}{Q_{\text{д}}} x}. \quad (13)$$

где $C_{\text{нач}i}$ – концентрация взвешенных загрязняющих частиц, относящихся к i -й фракции, в начальном поперечнике загрязненной струи при $x = 0$;

u_i – средняя гидравлическая крупность взвешенных загрязняющих частиц (расчетная крупность);

x – длина участка, в конце которого вычислялась C_{xi} ;

$C_{\text{ТР}i}$ – концентрация частиц расчетной крупности, соответствующая транспортирующей способности потока на рассматриваемом участке струи.

Коэффициент k_i определялся в зависимости от гидравлической крупности частиц и гидромеханического параметра Γ_i для i -й фракции

$$k_i = \frac{u_i \Gamma_i}{1 - \Gamma_i}. \quad (14)$$

Гидромеханический параметр Γ_i являющийся функцией коэффициента Шези S и безразмерной величины $G_i = \frac{u_i}{v_{\text{ср}}}$ (где $v_{\text{ср}}$ – средняя скорость течения), представлен в табл. 28.

Таблица функции $\Gamma(C, G)$

| G | C | | | | | | | | | | | | | | |
|--------|-------|-------|-------|--------|---------|---------|---------|--------|---------|---------|---------|---------|--|--|--|
| | 10 | 15 | 20 | 25 | 30 | 35 | 40 | 45 | 50 | 55 | 60 | 65 | | | |
| 0,0001 | 0,998 | 0,998 | 0,997 | 0,995 | 0,995 | 0,992 | 0,990 | 0,988 | 0,986 | 0,983 | 0,980 | 0,977 | | | |
| 0,0030 | 0,950 | 0,924 | 0,894 | 0,859 | 0,819 | 0,778 | 0,735 | 0,690 | 0,645 | 0,601 | 0,558 | 0,519 | | | |
| 0,0040 | 0,935 | 0,899 | 0,861 | 0,815 | 0,766 | 0,714 | 0,665 | 0,612 | 0,560 | 0,512 | 0,465 | 0,422 | | | |
| 0,0050 | 0,920 | 0,876 | 0,827 | 0,774 | 0,716 | 0,655 | 0,601 | 0,543 | 0,486 | 0,435 | 0,387 | 0,344 | | | |
| 0,0060 | 0,904 | 0,854 | 0,797 | 0,736 | 0,673 | 0,607 | 0,550 | 0,484 | 0,428 | 0,375 | 0,329 | 0,288 | | | |
| 0,0070 | 0,890 | 0,833 | 0,767 | 0,701 | 0,630 | 0,562 | 0,496 | 0,433 | 0,375 | 0,326 | 0,281 | 0,243 | | | |
| 0,0080 | 0,875 | 0,812 | 0,741 | 0,667 | 0,591 | 0,518 | 0,450 | 0,388 | 0,331 | 0,283 | 0,240 | 0,205 | | | |
| 0,0090 | 0,860 | 0,790 | 0,713 | 0,633 | 0,554 | 0,478 | 0,410 | 0,348 | 0,292 | 0,246 | 0,205 | 0,174 | | | |
| 0,0100 | 0,845 | 0,770 | 0,687 | 0,604 | 0,520 | 0,444 | 0,373 | 0,312 | 0,259 | 0,214 | 0,177 | 0,149 | | | |
| 0,020 | 0,718 | 0,599 | 0,479 | 0,377 | 0,290 | 0,219 | 0,169 | 0,129 | 0,099 | 0,079 | 0,066 | 0,057 | | | |
| 0,030 | 0,608 | 0,464 | 0,337 | 0,241 | 0,168 | 0,122 | 0,084 | 0,061 | 0,044 | 0,033 | 0,026 | 0,021 | | | |
| 0,040 | 0,517 | 0,368 | 0,254 | 0,168 | 0,110 | 0,077 | 0,052 | 0,036 | 0,026 | 0,020 | 0,015 | 0,011 | | | |
| 0,050 | 0,436 | 0,289 | 0,185 | 0,110 | 0,069 | 0,044 | 0,028 | 0,019 | 0,014 | 0,0101 | 0,0075 | 0,0062 | | | |
| 0,060 | 0,376 | 0,236 | 0,141 | 0,082 | 0,049 | 0,029 | 0,0188 | 0,0132 | 0,0089 | 0,0062 | 0,0045 | 0,0034 | | | |
| 0,070 | 0,323 | 0,188 | 0,106 | 0,056 | 0,032 | 0,0201 | 0,0124 | 0,0084 | 0,0052 | 0,0035 | 0,0027 | 0,0021 | | | |
| 0,080 | 0,280 | 0,152 | 0,079 | 0,041 | 0,0231 | 0,0136 | 0,0084 | 0,0052 | 0,0033 | 0,0023 | 0,0015 | 0,00120 | | | |
| 0,090 | 0,241 | 0,124 | 0,061 | 0,031 | 0,0175 | 0,0097 | 0,0058 | 0,0035 | 0,0022 | 0,00140 | 0,00094 | 0,00066 | | | |
| 0,10 | 0,207 | 0,100 | 0,044 | 0,023 | 0,0123 | 0,0061 | 0,0038 | 0,0024 | 0,00143 | 0,00090 | 0,00056 | 0,00041 | | | |
| 0,20 | 0,060 | 0,017 | 0,006 | 0,0020 | 0,00077 | 0,00033 | 0,00014 | | | | | | | | |

Через величину B_d выражалась средняя ширина загрязненной струи (области распространения сточных вод) на расчетном участке (действующую ширину). Практически она определялась как ширина струи, ограниченной изолинией концентрации, составляющей 0,1 от максимальной концентрации в этой струе. Через Q_d обозначали расход воды в области распространения сточных вод; эту величину мы обозначали как действующий расход. В связи с расширением струи Q_d изменялась по ее длине x . Значение Q_d определялось по формуле:

$$Q_d = B_d H v_{cp}, \quad (15)$$

где H – средняя глубина потока в пределах загрязненной струи на участке от 0 до x ;

B_d – величина, рассчитываемая вычисляется как средняя ширина на том же участке струи;

v_{cp} – средняя скорость потока в той же области.

Действующий расход представляет полный расход сточных вод и некоторую часть расхода реки. Если сточные воды распространяются по всему сечению реки, Q_d определяется равенством

$$Q_d = Q_{CT} + Q_e,$$

где Q_e – полный расход воды в реке.

В качестве начальной концентрации $C_{начi}$ принималась средняя концентрация взвешенного загрязняющего вещества в начальном створе загрязненной струи, т.е. при $x = 0$. Она рассчитывалась по формуле

$$C_{начi} = \frac{Q_{CT} C_{CTi}}{v_{cp} H B_d} \quad (16)$$

При расчете необходимо учитывать гидравлическую крупность загрязняющих взвешенных частиц. Ее определяли в лаборатории на фракциометре или методом пипетки. Вычисления концентрации (мутности), отвечающей транспортирующей способности потока C_{TP} , велись по гранулометрическому составу взвешенных частиц, включающему как естественные взвешенные речные наносы, так и сбрасываемые со сточными водами загрязняющие частицы.

Для упрощения вычисления расчет вели по двум фракциям i и $i+1$, на которые делились все транспортируемые рекой естественные взвешенные наносы. Деление на эти фракции мы осуществляли таким образом, чтобы средняя гидравлическая крупность более мелкой i -й фракции совпадала бы со средней гидравлической крупностью взвешенных частиц, сбрасываемых

со сточными водами. Предполагалось при этом, что фракция $i+1$ будет объединять все остальные крупные частицы естественных наносов, транспортируемых рекой во взвешенном состоянии.

С учетом добавления к речным наносам загрязняющих взвешенных веществ известной гидравлической крупности рассчитывался измененный состав транспортируемых потоком частиц. Это позволяло вычислить в дальнейшем частное значение $C_{ТP_i}$ для частиц i -й фракции. Измененный состав транспортируемых потоком взвешенных веществ вычисляли, исходя из средних условий на рассматриваемом участке разбавления от 0 до x . Далее вычислялись значения частных естественных расходов наносов двух фракций i и $(i+1)$, на которые разделены, как было указано выше, взвешенные наносы. Общая естественная мутность составлялась из суммы

$$S_e = S_{ei} + S_{e,i+1}, \quad (17)$$

где S_{ei} и $S_{e,i+1}$ – частные значения мутности соответственно мелкой (i) и крупной ($i+1$) фракций. Расходы естественных взвешенных наносов рассчитывались для рассматриваемой струи распространения сточных вод по формулам:

$$P_{seiД} = S_{ei} Q_{Д};$$

$$P_{se,i+1,Д} = S_{e,i+1} Q_{Д}. \quad (18)$$

Расход взвешенных частиц, выносимых со сточными водами, рассчитывался по формуле

$$P_{siCT} = S_{iCT} Q_{CT}. \quad (19)$$

Действующие расходы наносов $P_{siД}$, $P_{s,i+1,Д}$ и P_{siCT} суммировались, при этом получался полный действующий измененный расход наносов $P_{sД,изм}$ в области распространения сточных вод, т.е.

$$P_{sД,изм} = P_{siД} + P_{siCT} + P_{s,i+1,Д};$$

$$P_{sД,изм} = P_{sДе} + P_{siCT}, \quad (20)$$

где $P_{sДе} = P_{siД} + P_{s,i+1,Д}$

$P_{sДе}$ – величина, представляющая собой полный естественный действующий расход наносов.

Далее вычислялась доля (в %) расхода i -й и $i+1$ фракции в полном расходе наносов $P_{сд}$ в области распространения сточных вод. Полученное для этой области процентное содержание i -й фракции, т.е. $\alpha_{i,изм}$, в суммарном расходе наносов и загрязняющих частиц принималось как расчетное. За счет добавления фракции i изменению подвергалось также и процентное содержание $i+1$ фракции, которое уменьшалось относительно суммарного процентного содержания фракций, т.е. относительно 100.

Измененное процентное содержание фракций i и $i+1$ (соответственно $\alpha_{i,изм}$ и $\alpha_{i+1,изм}$) в полном действующем расходе взвешенных частиц $P_{сд}$ определялось по формулам

$$\alpha_{i,изм} = (\alpha_{ie} + \alpha_{iCT}) \Psi; \quad (21)$$

$$\alpha_{i+1,изм} = \alpha_{i+1} \Psi,$$

где

$$\Psi = \frac{\alpha_{ie} + \alpha_{i+1,e}}{\alpha_{ie} + \alpha_{i+1,e} + \alpha_{iCT}}.$$

Далее рассчитывалась общая мутность (концентрация), соответствующая транспортирующей способности потока $C_{тр}$ в области распространения загрязненных вод

$$C_{тр} = a C_{взм} \Gamma, \quad (22)$$

где a – корректирующий множитель, необходимый при использовании данных натуральных наблюдений; при отсутствии последних принимали $a = 1$;

$C_{взм}$ – мутность взмыва;

Γ – полное значение гидромеханического параметра наносов, который в рассматриваемом случае деления частиц на две фракции вычислялся по формуле

$$\Gamma = \frac{1}{\frac{\alpha_{i,изм}}{100\Gamma_i} + \frac{\alpha_{i+1,изм}}{100\Gamma_{i+1}}}; \quad (23)$$

здесь Γ_i и Γ_{i+1} – частные значения гидромеханического параметра наносов, находимые по табл. в зависимости от коэффициента Шези S для потока и безразмерных величин

$$G_i = \frac{u_i}{v_{ср}} \text{ и } G_{i+1} = \frac{u_{i+1}}{v_{ср}}.$$

Для расчета общей мутности взмыва, кг/м^3 , была использована формула

$$C_{\text{взм}} = bNFr, \quad (24)$$

где N – безразмерное характеристическое число турбулентного потока;

$$Fr = \frac{v^2}{gH} \text{ – число Фрунда;}$$

b – коэффициент, принимающий следующие значения: $b = 0,65$ при $20 < C \leq 80$, $b = 0,45$ при $10 \leq C \leq 20$.

Для вычисления корректирующего множителя a использовалось значение полного действующего естественного расхода наносов $P_{s \text{ Де}}$. Для тех же условий вычисляли $C_{\text{ТР}}$, принимая в ней $a = 1$ и ведя вычисления по тем же двум фракциям (i и $i+1$), которые использовались при расчете переноса взвешенных загрязняющих веществ. Полученное значение $C_{\text{ТР}}$ без множителя a обозначали через $C_{\text{ТР}*}$, в дальнейшем умножая его значение на действующий расход воды:

$$a = \frac{P_{s \text{ Де}}}{C_{\text{ТР}*} Q_{\text{Д}}}. \quad (25)$$

Вычислив $C_{\text{ТР}}$, определяли частное значение мутности i -й фракции, т.е. $C_{\text{ТР}i}$, по формуле

$$C_{\text{ТР}i} = a_{\text{изм}} C_{\text{ТР}}. \quad (26)$$

Таким образом, вычислялись все величины, входящие в уравнение. Это уравнение позволило получить значения концентрации как в конце изучаемого участка струи распространения сточных вод, так и на любом расстоянии от начального створа в рассматриваемой области потока. Далее по данным этих расчетов можно было определить осаждение частиц i -й фракции на любом расстоянии от начального створа и затем найти количество осаждающих загрязняющих веществ, имеющих гидравлическую крупность u_i .

Для расчета осаждения взвешенных частиц вся область загрязненной струи по ее длине x делилась на 4–5 одинаковых участков длиной Δx . Построив по данным расчета график распределения C_i вдоль x , находили значения $C_{\text{нач}}$ и $C_{\text{кон}}$, т.е. концентрацию расчетной фракции в начале и конце каждого из таких участков. Эти данные использовались для определения

слоя отложений или размыва отложений (наносов) Δh_i расчетной i -й фракции за время Δt на участке длиной Δx

$$\Delta h_i = \frac{(C_{i\text{нач}} - C_{i\text{кон}}) Q_{\text{д}} \Delta t}{B_{\text{д}} \Delta x \rho_{\text{отл}} g}, \quad (27)$$

где $\rho_{\text{отл}}$ – плотность грунта, кг/м³;

Δt – расчетный интервал времени, с.

Величина Δh_i характеризовала приращение за время Δt слоя h отложений (м), сформированных за счет частиц расчетной фракции.

Для определения доли загрязняющих взвешенных частиц в общем осадке, сформировавшем слой толщиной Δh_i использовали равенство

$$\Delta h_{i\text{заг}} = \frac{\Delta h_i}{1 + n}, \quad (28)$$

в котором n – коэффициент, вычисляемый из условия, что относительное содержание загрязняющих частиц в общем объеме осадка на любом расстоянии от места сброса такое же, как и отношение расхода загрязняющих частиц i -й фракции в начальном створе $P_{si\text{СТ}}$ к общему расходу этих частиц в начальном створе $P_{si\text{Д}} + P_{si\text{СТ}}$

$$\frac{P_{si\text{СТ}}}{P_{si\text{Д}} + P_{si\text{СТ}}} = n. \quad (29)$$

Если в процессе расчета $C_{i\text{нач}}$ получалось значение мало отличающееся от $C_{i\text{нач.е}}$, то уменьшали длину расчетного участка x , что соответственно приводило к уменьшению $B_{\text{д}}$.

При расчете процесса осаждения органических взвешенных веществ необходимо учитывать их распад, который приводил к уменьшению интенсивности осадконакопления.

3.1.6. Осаждение взвешенных веществ и вторичное загрязнение

Для вычисления осаждения взвешенных частиц, а также вторичного загрязнения водных масс за счет взмыва с поверхности дна осевших загрязненных частиц применялась зависимость, которая была выведена при использовании уравнения турбулентной диффузии, выражения транспорти-

рующей способности потока, а также уравнения баланса взвешенных частиц на участке речного потока. Уравнение баланса взвешенных частиц в общем виде приняло следующий вид:

$$P_{\text{снач}} + P_{\text{сбп}} + P_{\text{сверт}} - P_{\text{скон}} = 0, \quad (30)$$

где $P_{\text{снач}}$ и $P_{\text{скон}}$ – секундные расходы взвешенных веществ (наносов) в начальном и конечном створах контрольного участка потока, соответственно;

$P_{\text{сбп}}$ – суммарный расход наносов всех боковых притоков (сточных вод, ручьев и рек на контрольном участке);

$P_{\text{сверт}}$ – величина, показывающая, результирующее секундное количество наносов, отлагающихся в пределах участка или поступающих в поток от размыва русла и поймы.

Величина $P_{\text{сверт}}$ являлась результирующим вертикальным расходом наносов, определяющим деформацию русла. Он был представлен как алгебраическая сумма частных размывов $P_{\text{иразм}}$ и отложений $P_{\text{иотл}}$, т.е. в виде

$$P_{\text{сверт}} = \sum P_{\text{иразм}} + \sum P_{\text{иотл}}. \quad (31)$$

Для расчетов распределения мутности по длине потока использовалось уравнение баланса взвешенных веществ, составленное по схеме предыдущего уравнения для участка с одинаковой направленностью процесса (размыв или отложение) при отсутствии бокового притока. Оно приняло следующий вид:

$$QdC + q_s B dx = 0; \quad (32)$$

где Q и B – расход воды и ширина реки, принимаемые постоянными в пределах рассматриваемого участка, соответственно;

dC – изменение по длине потока средней по сечению мутности, отвечающей содержанию взвешенных загрязняющих частиц на участке протяженностью dx ;

q_s – величина выражающая средний на участке вертикальный расход взвешенных веществ, переносимых через единицу поверхности русла (единичный вертикальный расход).

$q_s B dx$ – полный вертикальный расход взвеси на участке.

Единичный расход q_s вычислялся по формуле

$$q_s = (u_i + k_{0i})C_i - k_{0i} C_{\text{взми}}, \quad (33)$$

где u_i – средняя гидравлическая крупность загрязняющих взвешенных частиц;

$C_{\text{взми}}$ – частная мутность взмыва, образуемая загрязняющими взвешенными частицами.

$C_{\text{взми}}$ вычислялась по следующей формуле

$$C_{\text{взми}} = \frac{\alpha_{\text{взми}}}{100} C_{\text{взм}}, \quad (34)$$

где $\alpha_{\text{взми}}$ – процентное содержание загрязняющих взвешенных частиц в составе донных отложений;

$C_{\text{взм}}$ – общая мутность взмыва, которая определялась по формуле

$$C_{\text{взм}} = bNFr. \quad (35)$$

Размерность мутности – г/м³.

где $Fr = \frac{v^2}{gH}$ – число Фруда для речного потока;

N – безразмерный параметр, зависящий от коэффициента Шези C .

В выражении числа Фруда входят средние значения скорости и глубины речного потока (v и H), а также ускорение свободного падения g .

Формула для вычисления N :

$$N = \frac{MC}{g}, \quad (36)$$

где C – коэффициент Шези;

M – коэффициент, зависящий от C .

При условии $10 < C < 60$ получалась зависимость $M = 0,7C + 6$, при $C \geq 60$ параметр $M = 48 = \text{const}$. Произведение MC имеет размерность м/с².

b – коэффициент, численное значение которого мы назначали в зависимости от коэффициента Шези C . Для равнинных рек, коэффициент Шези которых заключен в пределах 20–80, коэффициент $b = 650$.

Если в расчетах оказывалось, что вычисляемое по формуле (36) значение $C_{взм}$ больше $\rho_{отл}$, т.е. плотности отложений взвеси на дне, что физически невозможно, то мы приняли $C_{взм} = \rho_{отл}$.

Содержащийся в формуле (33) коэффициент k_{0i} определялся из условия динамического равновесия русла, при котором результирующий расход $q_s = 0$.

На основе уравнения баланса (32) и при учете выражения (33) мы вывели следующее уравнение распределения концентрации взвешенных загрязняющих частиц по длине потока:

$$C_i = C_{три} + (C_{начi} - C_{три}) e^{-\frac{B(u_i + \kappa_{0i})}{Q} x}, \quad (37)$$

где $C_{начi}$ – мутность при $x = 0$;

C_i – мутность в сечении x ;

$x_{триi}$ – мутность, отвечающая транспортирующей способности потока. Эта величина находится по формуле

$$C_{триi} = \Gamma_i C_{взмi}, \quad (38)$$

в которой Γ_i – гидромеханический параметр взвешенных загрязняющих частиц, определяющий условие их транспорта в толще турбулентного потока.

Значение Γ_i находилось по специальной табл. в зависимости от коэффициента Шези потока S и от отношения гидравлической крупности загрязняющих частиц u_i к средней скорости потока $v_{ср}$; т.е. от

$$G_i = \frac{u_i}{v_{ср}}. \quad (39)$$

Если $C_{начi} > C_{три}$, то в уравнении (36) численное значение концентрации взвешенных частиц по длине потока уменьшалось – заиление, при $C_{начi} < C_{три}$ – концентрации взвешенных частиц увеличивалось – размыв.

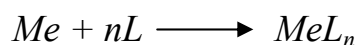
Указанное уравнение в полном виде или с соответствующими упрощениями явилось основой при расчетах осаждения взвешенных частиц и вторичного загрязнения в речных потоках.

3.1.7. Расчет комплексообразующей способности никеля, кадмия и цинка

В условиях природных вод, где суммарная концентрация лигандов (C_L) во много раз превышает концентрацию тяжелых металлов, скорость комплексообразования подчиняется уравнению реакции первого порядка, т.к. $C_L = \text{const}$. В соответствии с теорией кинетики химических реакций нами была выявлена взаимосвязь между исходной концентрацией реагирующего вещества C_0 , его концентрация C_τ к моменту времени τ после начала реакции и константой скорости реакции k (при $t = \text{const}$):

$$k = \frac{1}{\tau} \ln \frac{C_0}{C_\tau}. \quad (40)$$

Применительно к процессам комплексообразования в речном потоке это уравнение мы отнесли к реакции



при $C_L = \text{const}$.

Такую константу назвали коэффициентом скорости комплексообразования, т. к. она относилась к взаимодействию ионов металла с суммой комплексообразующих веществ природной воды и изменялась при изменении их состава и концентрации. Такие коэффициенты нами использовались при расчете времени, необходимого для практически полного связывания ионов никеля, кадмия и цинка в комплексы.

Для определения комплексообразующей способности природной воды к одинаковым ее порциям добавлялись возрастающие количества соли исследуемых тяжелых металлов, выдерживали до достижения равновесия и определяли одним из наиболее подходящих методов концентрацию незакомплексованных ионов или общую концентрацию всех комплексных форм. Комплексообразующая способность никеля, кадмия и цинка была численно равна количеству добавленного металла (моль/дм³), при которой в растворе начиналось возрастание концентрации незакомплексованных ионов или количество закомплексованных форм достигало постоянной величины [90].

3.1.8. Расчет концентраций никеля, кадмия и цинка в поверхностном микрослое

В поверхностном микрослое интенсивно накапливаются тяжелые металлы, входящие в состав взвешенных веществ и растворенных органических соединений, тогда как неорганические растворенные формы имеют примерно те же концентрации, что и в объемной фазе. Это обстоятельство позволило нам оценить влияние адсорбции растворенных органических веществ на общую концентрацию растворенных никеля, кадмия и цинка в поверхностном микрослое.

При выявлении закономерностей химического состава поверхностного микрослоя нами учитывалось не столько абсолютные концентрации компонентов, сколько их относительные величины по сравнению с нижележащим слоем подповерхностной воды, показывающие степень различий поверхностной и объемной фаз раствора. Для этой цели мы использовали: коэффициент накопления (K_n), фактор обогащения (F), коэффициент фракционирования (α) и фактор фракционирования (E). Первые два параметра были связаны с концентрациями компонентов в поверхностном микрослое (\bar{C}) и подповерхностной воде (C) соотношениями:

$$K_n = \bar{C} / C; \quad (41)$$

$$F = \frac{\bar{C} - C}{C} \cdot 100 \%. \quad (42)$$

Коэффициент и фактор фракционирования отражали относительную способность двух компонентов i и j обогащать или обеднять поверхностный микрослой:

$$\alpha_{i,j} = \left(\frac{\bar{C}_i}{\bar{C}_j} \right) / \left(\frac{C_i}{C_j} \right); \quad (43)$$

$$E_{i,j} = \left[\left(\frac{\bar{C}_i}{\bar{C}_j} \right) / \left(\frac{C_i}{C_j} \right) - 1 \right]. \quad (44)$$

При определении α и E в качестве второго компонента мы выбирали вещества, которые либо показывают индифферентное поведение в поверхностном микрослое ($K_n \approx 1$), либо преимущественно связаны с какой-нибудь фазой или носителем (взвесью, органическим веществом и т.п.). В первом случае использование α и E позволяло элиминировать эффекты изменения концентраций, возникающие в процессе отбора проб поверхностного микрослоя из-за испарения воды, во втором – получить сведения о связи первого компонента с той или иной фазой или веществом-носителем.

K_n органических комплексов никеля, кадмия и цинка равны K_n для растворенного углерода, обозначили через $\alpha_{i(\text{POB})}$ долю растворенных органических форм данных тяжелых металлов i в объемной фазе раствора. Тогда, принимая для растворенных неорганических форм никеля, кадмия и цинка, $K_n = 1$ мы получили выражение для K_n , относящегося к сумме растворенных форм этих элементов:

$$K_{n(i)} = \frac{\bar{C}_i}{C_i} = \frac{\alpha_{i(\text{POB})} C_i K_{n(\text{POB})} + (1 - \alpha_{i(\text{POB})}) C_i}{C_i} = \quad (45)$$

$$= 1 + \alpha_{i(\text{POB})} (K_{n(\text{POB})} - 1).$$

где $K_{n(\text{POB})}$ – коэффициент накопления растворенного органического углерода;

\bar{C}_i и C_i – концентрация растворенных форм тяжелых металлов (органических и неорганических) в поверхностном микрослое и подповерхностной воде соответственно.

Т а б л и ц а 29

Расчетные значения K_n растворенных форм никеля, кадмия и цинка в поверхностном микрослое

| Элемент | $\alpha_{i(\text{POB})}$ | $K_{n(i),p}$ | | | $K_{n(i),n}$ |
|---------|--------------------------|-------------------------|-------------------------|--------------------------|--------------|
| | | $K_{n(\text{POB})} = 2$ | $K_{n(\text{POB})} = 5$ | $K_{n(\text{POB})} = 10$ | |
| Никель | 0,23 | 1,2 | 1,9 | 3,1 | 2,1–6,4 |
| Цинк | 0,37 | 1,4 | 2,5 | 4,3 | 2,2 |
| Кадмий | 0,30 | 1,5 | 2,2 | 4,2 | 2,5 |

Из табл. 29 видно, что расчетные значения K_n растворенных форм никеля, кадмия и цинка в поверхностном микрослое в целом укладывались в диапазон K_n , определенных в природных условиях, хотя отмечалось, что наилучшее согласие достигалось при $K_{n(POB)} = 5 \dots 10$, которое представлялось несколько завышенным, в свете имеющихся данных об интенсивности накопления растворенного органического вещества. Возможной причиной этого является то, что при фильтрации не задерживаются наиболее мелкие частицы водной взвеси, которые при взаимодействии с хлороформом, используемым для экстракции органических форм никеля, кадмия и цинка, могли служить дополнительным источником химических элементов, не связанных на самом деле с растворенными формами. Кроме того, $K_{n(POB)}$ определялось для суммы растворенных органических веществ, включающей соединения с разной поверхностной активностью, а аналитические методики выделения органических комплексов никеля, кадмия и цинка (использование смолы ХАД2, экстракции хлороформом) относились преимущественно к гидрофобным органическим веществам, которые имеют значительно большие K_n по сравнению с суммарным растворенным органическим веществом.

Нами было выявлено, что одним из возможных факторов, влияющих на химический состав водного поверхностного микрослоя, являлось испарение воды с поверхности водотока, приводящее к концентрированию нелетучих веществ.

В этом процессе граница раздела воды – воздух выступало в качестве перегородки, проницаемой для воды и непроницаемой для растворенных веществ, причем концентрация последних вблизи границы раздела контролируется двумя противоположно направленными процессами: концентрированием солей за счет удаления растворителя и снижением концентрации в результате диффузии солей в нижние слои раствора. Математическая формулировка процесса испарительно-диффузионного концентрирования солей соответствует известной задаче о распределении примеси в полупространстве, на верхней границе которого расположен источник с постоянной мощностью. Такая формулировка нам показалась не полностью адекватной реальному процессу, так как при постоянной скорости испарения воды и увеличении концентрации растворенного вещества вблизи поверхности раздела мощность источника должна увеличиваться во времени. Однако, с нашей точки зрения, повышение концентрации нелетучих веществ невелико и погрешности, возникающие за счет пренебрежения непостоян-

ством мощности источника, пренебрежимо малы, поэтому решение данной задачи приняло вид:

$$C(z, \tau) = C_0 + Pf(z, \tau, D), \quad (46)$$

где

$$f(z, \tau, D) = 2\sqrt{\frac{\tau}{D}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{4D\tau}\right) - \frac{z}{2\sqrt{D\tau}} \left[1 - \Phi\left(\frac{z}{\sqrt{2D\tau}}\right) \right] \right\},$$

C_0 и $C(z, \tau)$ – исходная концентрация никеля, кадмия и цинка и концентрация на глубине z в момент времени τ ;

D – коэффициент диффузии;

Φ – интеграл вероятности;

P – мощность источника растворенного вещества.

Анализ уравнения (46) нам показал, что при $\tau \rightarrow \infty$ концентрация примеси неограниченно возрастала, однако такая ситуация была возможна только в случае полностью неподвижного раствора. В естественных условиях явления поверхностной микроконвекции ограничивались увеличением концентрации, что позволяло определить максимальное при данных гидрометеорологических параметрах среды время протекания элементарного акта испарительно-диффузионного концентрирования веществ и вычислить максимальную концентрацию никеля, кадмия и цинка в поверхностном микрослое, обусловленную рассматриваемым процессом.

Согласно сделанному предположению о неизменности мощности источника, $P = \nu C_0$, в соответствии с чем из уравнения (46) нами было получено выражение для коэффициента накопления $K_n(z, \tau)$, зависящего от времени и глубины:

$$K_n(z, \tau) = 1 + \nu f(z, \tau, D). \quad (47)$$

Расчеты, приведенные по уравнению (47) с учетом ограниченной длительности существования поверхностного микрослоя в ненарушенном состоянии, показали (рис. 3), что при заданных коэффициентах диффузии растворенного вещества максимальные значения K_n наблюдалось при минимальных скоростях ветра, а с уменьшением коэффициентов диффузии интенсивность осолонения поверхностного микрослоя увеличивалось.

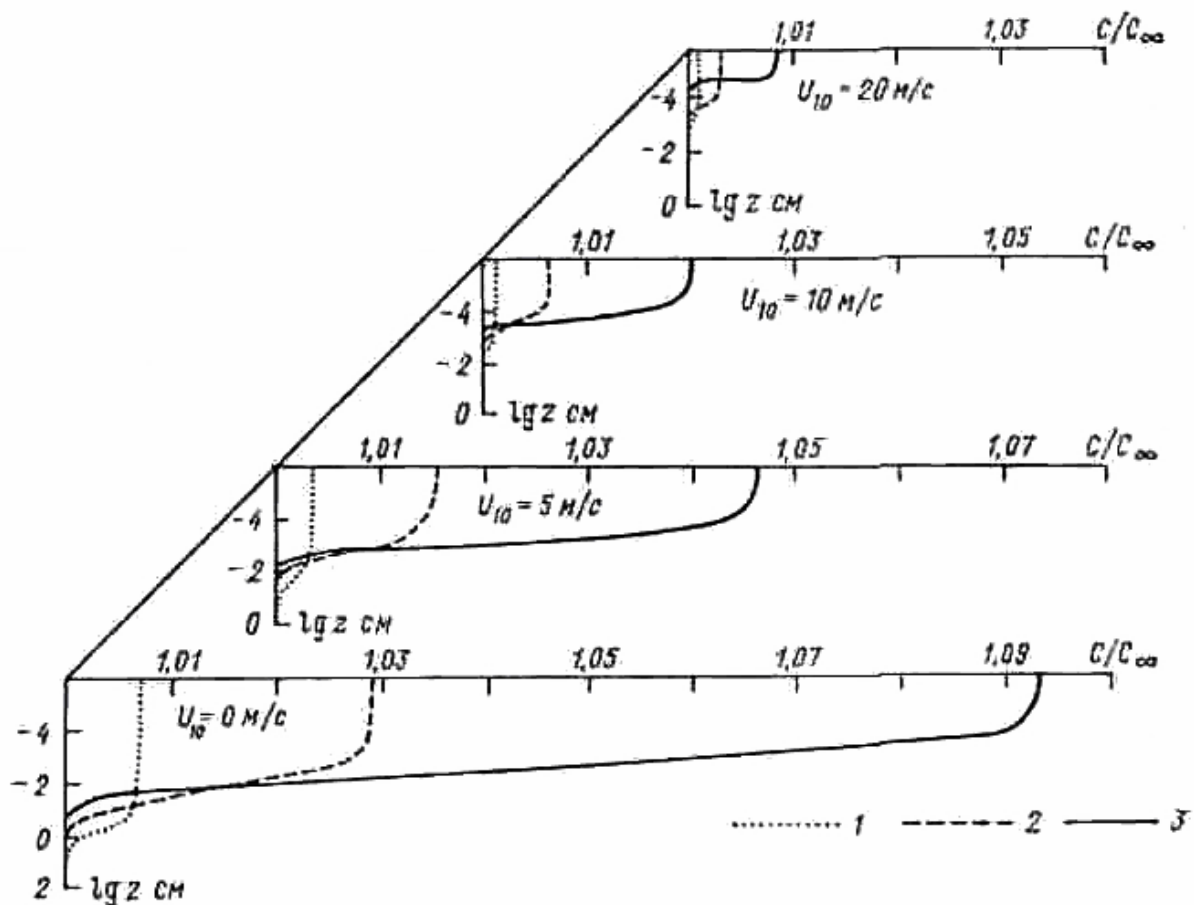


Рис. 3. Вертикальные профили концентраций растворенных веществ в ПМС при разной скорости ветра:

1 – $D = 1,64 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2 / \text{с}$; 2 – $D = 1 \cdot 10^{-6} \text{ см}^2 / \text{с}$; 3 – $D = 1 \cdot 10^{-7} \text{ см}^2 / \text{с}$

3.2. Математическое моделирование как метод прогнозирования изменения состояния водных экосистем на примере Пензенского водохранилища

В настоящее время в научных и производственных кругах осознана ограниченность концепции нормирования сбросов загрязняющих веществ в водные объекты, которая основана на системе предельно допустимых концентраций. Санитарно-гигиенические нормативы обеспечивают защиту здоровья человека, тогда как контроль с помощью предельно-допустимых концентраций (ПДК) не защищает экосистемы от различных видов загрязнения. Система критериев оценки качества окружающей среды на основе ПДК имеет много недостатков, например она не учитывает взаимодействие различных загрязняющих веществ между собой, аккумуляцию в организмах, взаимодействие с донными отложениями и т.д.

Несмотря на то, что ускорены темпы нормирования загрязняющих веществ в окружающей среде, на сегодняшний день нормативы все еще не могут в полной мере отвечать требованиям.

Трудности нормирования заключаются в том, что для большинства загрязняющих веществ, ПДК которых установлены, нет надежных аналитических методов контроля; часто нормируются одни формы веществ, а в водных объектах присутствуют другие, с иными ПДК. Например, токсичность загрязняющих веществ зависит от конкретных гидрохимических, гидробиологических ситуаций, на фоне которых она проявляется; процессы трансформации загрязняющих веществ в водных экосистемах включают в себя целый ряд стадий, причем часто промежуточные продукты оказываются более токсичными, чем исходные загрязняющие вещества и т.д. Кроме того, важно учитывать, какую функцию выполняет исследуемый водный объект, и, в зависимости от этого, предъявлять те или иные требования к качеству воды.

Одним из важнейших факторов, оказывающих отрицательное воздействие на здоровье человека и среду его обитания, является загрязнение воды, поскольку она является не только средой распространения вредных сбросов, но и непосредственным источником поступления загрязняющих веществ, содержащихся в сбросах промышленных предприятий и автотранспорта, в организм человека.

Так как опасность нежелательных последствий изменения водной среды возрастает ежегодно, методы исследования системы «человек – природная среда» должны совершенствоваться. Одним из наиболее часто применяемых в современной науке является метод математического моделирования.

Математическое моделирование предполагает последовательное выполнение следующих этапов: построение математической модели исследуемого процесса, разработка алгоритма вычисления и программы реализации его на компьютере.

Математическая модель есть приближенное описание какого-либо класса явлений внешнего мира с помощью математической символики. Математические модели реальных исследуемых процессов сложны и включают системы нелинейных функционально-дифференциальных уравнений. Ядро математической модели – дифференциальные уравнения в частных производных. Изучение математических моделей производится на основе методов вычислительной математики, основу которых составляют разностные методы решения задач математической физики. Современный

этап прикладной математики характеризуется исследованием математических моделей с широким использованием вычислительных средств [4].

3.2.1. Материалы и методы, применяемые в исследовании

Пензенское водохранилище является источником питьевого водоснабжения г. Пензы и г. Заречного. Учитывая столь стратегически важное значение, мы провели анализ гидрологических параметров, таких как геологическое строение и свойства грунтов; гидрохимических, гидробиологических показателей и состояния ихтиофауны Пензенского водохранилища за 2008–2010 годы. Нами была проведена оценка качества воды с помощью методических указаний, разработанных Гидрохимическим институтом (ГХИ) Федеральной службы России по гидрометеорологии и мониторингу окружающей среды (Росгидромет), «Метод комплексной оценки степени загрязненности поверхностных вод по гидрохимическим показателям» [113]. Изучены основные источники загрязнения поверхностных вод Пензенского водохранилища. В качестве исследуемых веществ были выбраны тяжелые металлы: никель, кадмий, цинк, ртуть, – в связи с тем, что в последние годы наметился рост их концентрации в водной среде. Кроме того, для прогнозирования дальнейшего состояния Пензенского водохранилища важно знать скорость распространения тяжелых металлов в водной среде.

Для постановки задачи были проанализированы возможные пути их попадания в исследуемый водный объект, начальные концентрации тяжелых металлов.

Загрязнение воды в Пензенском водохранилище возможно в результате как непосредственного разлива жидких загрязняющих веществ (ЗВ) в водоём, так и разлива ЗВ на грунт с последующим смешиванием с грунтовыми водами и выносом их в водохранилище посредством ручьев, рек.

Нами были рассмотрены диффузионный, конвективный и диффузионно-конвективный механизмы распространения загрязняющих веществ в воде.

Диффузионный механизм распространения ЗВ используется при описании процессов в водоемах со стоячей или слаботекущей водой (водохранилищ, прудов, озер, каналов, трубопроводов и т.п.). В основе построения математической модели преимущественно диффузионного переноса вещества лежит уравнение диффузии.

Интенсивность попадания и перемешивания ЗВ в водных массивах зависит от климатических условий, рельефа, особенностей ландшафта, почвы местности и т.п.

Рассмотрим одномерную задачу диффузии применительно к узкому протяженному водоему со стоячей водой: малой речке, ручью, трубе или каналу, в который попадает ограниченный объем загрязнителя. В этой экологической ситуации задачу можно считать одномерной, т.е. шириной и глубиной водоема пренебречь, поскольку они незначительны по сравнению с длиной, рассматривать диффузию только в одном направлении – по длине водоема.

Для математического моделирования процессов диффузии [56-58] в одномерных случаях используются дифференциальные уравнения параболического типа, поскольку физические процессы могут быть охарактеризованы функциями двух независимых переменных: одной пространственной координаты и времени.

Задача одномерной диффузии с начальными условиями имеет вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \quad (48)$$

$$C(0, t) = C_0; \quad C(x, 0) = 0,$$

где C – концентрация вещества;

C_0 – начальная концентрация;

t – время распространения;

x – длина исследуемого участка.

Математическая постановка задачи диффузии в этом случае совпадает с математической постановкой задачи теплопроводности для расчета распределения тепла в полубесконечном стержне.

Используя представление решения в виде интеграла Пуассона

$$C(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{Dt}} e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4Dt}} \phi(\xi) d\xi, \quad (49)$$

можно получить решение в виде:

$$C(x, t) = C_0 [1 - \Phi(z)], \quad (50)$$

где $\phi(\xi)$ – действие начальной концентрации,

$$\Phi(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-\alpha^2} d\alpha - \text{функция ошибок для } z = \frac{x}{2\sqrt{Dt}}.$$

Заметим, что, используя уравнение (50), можно находить распределение концентрации $C(x, t)$, а также оценивать время, за которое концентрация ЗВ в точке с координатой x в водоеме станет больше предельно допустимой.

Для оценки времени $t_{\text{п}}$ достижения предельно допустимых значений концентрации примеси $C_{\text{п}}$ в некоторой точке канала x , ее можно представить как $C_{\text{п}} = \gamma \cdot C_0$, где $\gamma < 1$. Затем, воспользовавшись соотношением

$$C_{\text{п}} = C_0 \left[1 - \Phi \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt_{\text{п}}}} \right) \right], \quad (51)$$

выразить $t_{\text{п}} = \frac{x^2}{4D^2k^2}$, где k – корень уравнения, $\Phi(z) = 1 - \gamma$.

Из литературных источников видно, что неорганические ЗВ имеют коэффициенты диффузии от 0,4 до 3,0 см²/сутки, а органические – от 0,3 до 1,8 см²/сутки.

На практике при загрязнении водоемов промышленными сточными водами концентрация ЗВ в источнике поддерживается на постоянном уровне C_0 , в начале канала происходит поступление вещества, что неизбежно приводит к некоторой конвекции. Для частичного учета этого фактора можно вводить коэффициент продольного перемешивания, или коэффициент конвективной диффузии, который на один – два порядка больше расчетных значений коэффициента диффузии (определяется экспериментально).

Для одномерной задачи диффузии при постоянно действующем источнике загрязнения начальные и краевые условия примут вид: $C(0, t) = C_0(t)$, $C(x, 0) = 0$, $C(0, 0) = C_0$, $C(\infty, t) = 0$. При этом считается, что $C_0(t)$ – известная зависимость разбавления начальной концентрации источника C_0 со временем t , например, в первом приближении можно принять $C_0(t) = C_0 - k \cdot t$.

Так как Пензенское водохранилище можно отнести к плоскому водоему, то удобнее рассматривать задачу распространения тяжелых металлов в плоском пространстве, решая двухмерную задачу диффузии.

Представим, что попадание тяжелых металлов в водоем происходит на некотором участке границы водоема (рис. 4). Этот случай достаточно распространен, например, при сбросах загрязняющих веществ в обширный, неглубокий водный массив.

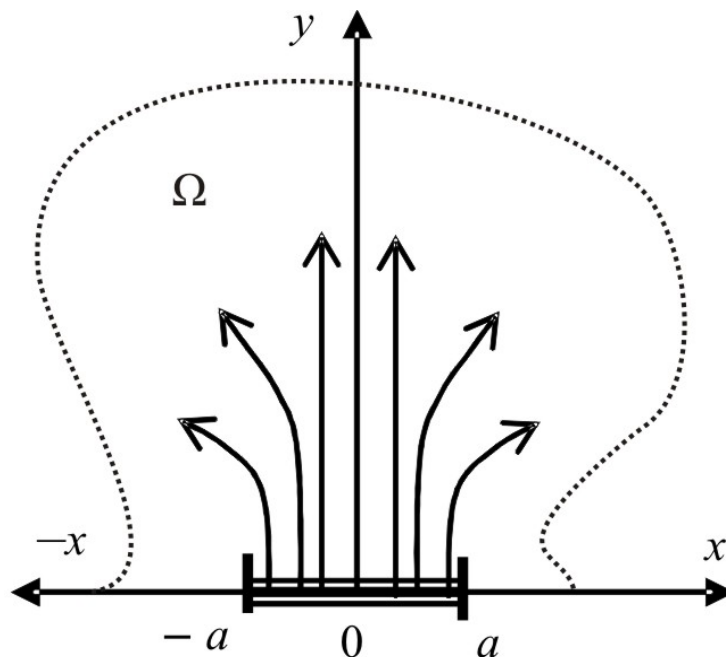


Рис. 4. Источник постоянной мощности на участке границы $[-a; a]$

Будем считать, что размеры той части границы, через которую происходит загрязнение, малы в сравнении с размерами всей границы водоема. Кроме того, будем считать, что распределение тяжелых металлов по глубине водоема происходит равномерно, и основной процесс диффузии происходит по длине и ширине водоема.

Эти предположения дают возможность рассматривать двухмерное уравнение диффузии, заданное в некоторой области Ω , которое имеет вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right). \quad (52)$$

Для случая, когда на участке границы от $-a$ до $+a$ находится постоянно действующий источник загрязнения с плотностью $p(x, t)$, а начальная концентрация ЗВ в пространстве равна нулю, в качестве граничных условий можно выбрать следующие:

$$C(x, y, 0) = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_{y=0} = \begin{cases} p(x, t) & \text{при } -a \leq x \leq a, \\ 0 & \text{при } x \notin [-a, a], \end{cases} \quad (53)$$

где $p(x, t)$ – плотность потока примеси;

x, y – соответствующие координаты по длине и ширине водоема.

$$C(x, 0) = C_0, \quad -a \leq x \leq a,$$

$$C(x, y)|_{y=\infty} = 0, \quad C(x, y)|_{x=\pm\infty} = 0.$$

Аналогичную задачу можно рассмотреть для трехмерного характера распространения ЗВ – сферическую диффузию. Такая экологическая ситуация характерна для случая, когда источник загрязнения находится в неограниченном пространстве, например, на некоторой глубине водоема, а в окружающей среде начальная концентрация равна нулю, то есть $C(r, 0) = 0$ при $r \neq 0$. Распространение примеси в однородной среде происходит симметрично во всех направлениях: x, y, z . Следовательно, уравнение пространственной диффузии имеет вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right), \quad (54)$$

где D – коэффициент диффузии;

C – концентрация ЗВ в точке с координатами (x, y, z) в момент времени t .

В сферической системе координат уравнение (54) можно представить в виде:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right); \quad (55)$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ – радиус-вектор точки с координатами (x, y, z) .

Задачи, учитывающие движение воды, имеют более сложную математическую постановку.

На основании данных математических выражений нами были проведены расчеты, которые позволяют определить концентрацию загрязняющего вещества при попадании некоторого его количества в водоем за определенный промежуток времени.

3.2.2. Результаты, полученные в ходе исследований

Расчеты проводились с использованием интегрированной системы MathCAD, полученные результаты частично представлены на рис. 5–7.

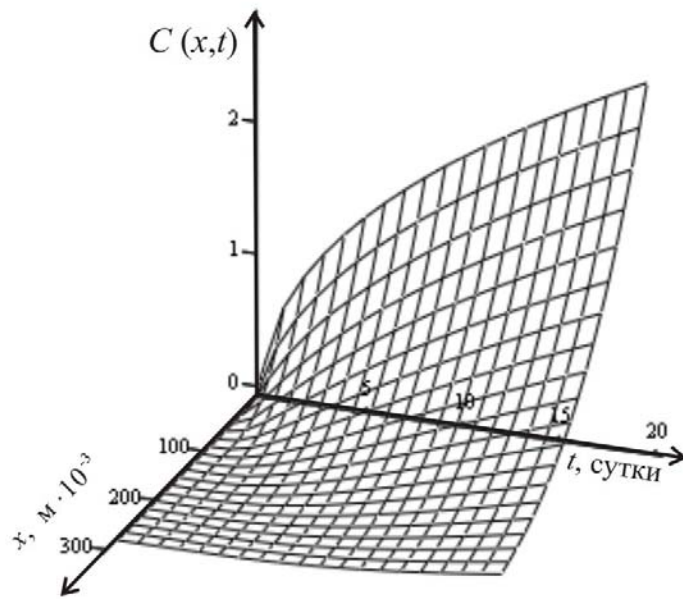


Рис. 5. Зависимость изменения концентрации ЗВ в различных сечениях при одномерной диффузии

На рис. 6 показано, как изменяется время достижения предельно допустимой концентрации $C_{\text{п}}$ при изменении начальной концентрации вещества в десять раз: 1 – при $C_0 = 1$ М/л; 2 – при $C_0 = 10$ М/л.

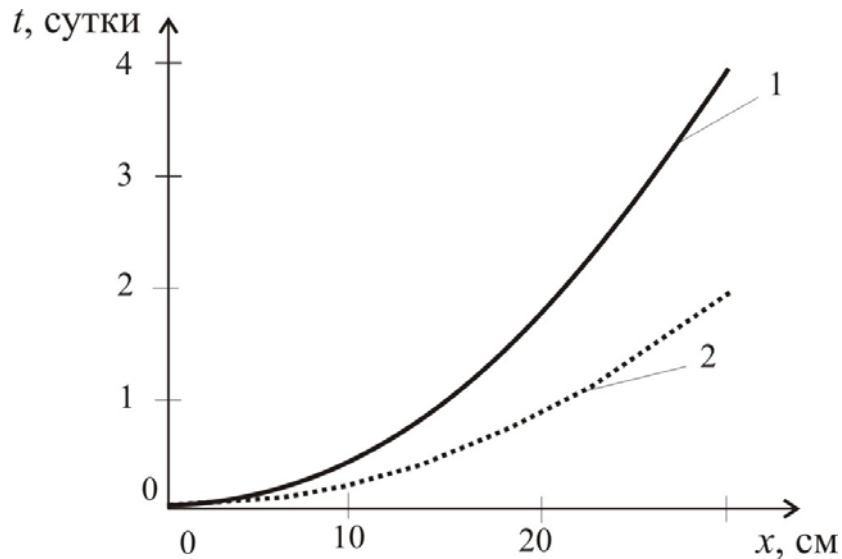


Рис. 6. Зависимость времени достижения $C_{\text{п}}$ от расстояния для одномерной диффузии при разных значениях начальной концентрации ЗВ

Пример распределения концентрации в точках плоского водоема, прилегающих к источнику загрязнения при фиксированном времени t , приведен на рис. 7.

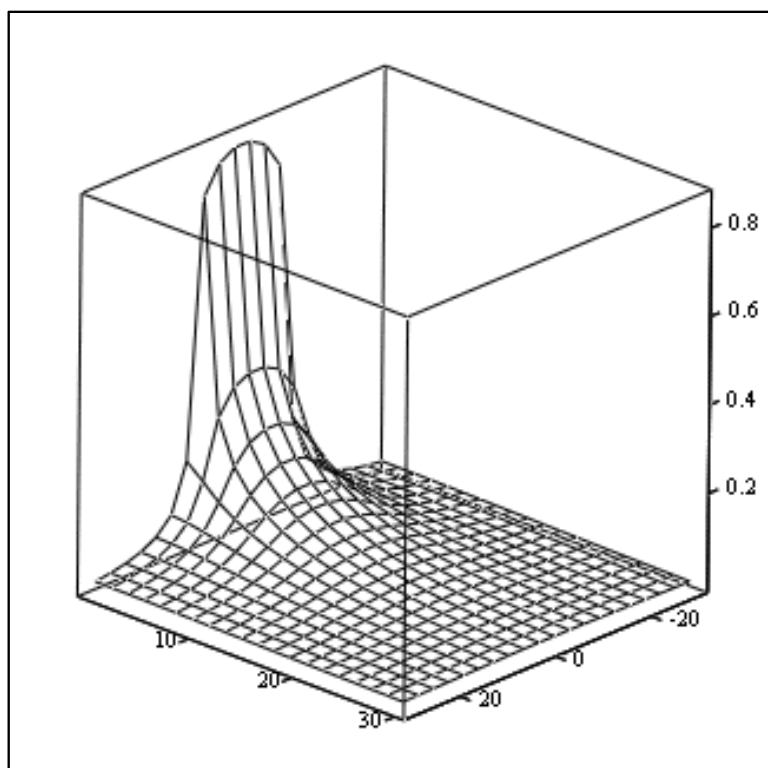


Рис. 7. Пример двумерной диффузии

Для проверки адекватности математических моделей проводится численная имитация натурального эксперимента, и полученные расчетные значения концентрации ЗВ в зависимости от координаты x сопоставляются с результатами реального натурального эксперимента.

Проведенное сравнение позволяет сделать вывод, что полученные в результате численного эксперимента значения хорошо согласуются с опытными данными.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследования, проведенные в работе, дают новые возможности для проведения анализа современного состояния химических и физико-химических методов определения загрязняющих веществ в окружающей среде. Были выявлены тенденции для дальнейшего применения в водном мониторинге с точки зрения эффективности всей аналитической процедуры, включающей в себя пробоотбор воды и их последующий анализ. Исследование экологического состояния реки Суры, на основе традиционно применяемых методов, в гидромониторинге было впервые апробировано на реальных водных образцах реки Суры. Была разработана математическая модель, описывающая наиболее вероятный миграционный механизм никеля, кадмия и цинка в поверхностных водах. На примере Пензенского водохранилища был показан принцип составления математических моделей разного уровня для возможного контроля за состоянием экосистемы.

Таким образом, наряду с традиционными методами, применяемыми в экологии для оценки состояния экосистем, возможно использование метода математического моделирования. Данный метод позволяет не только определять качественный и количественный состав природных сред при антропогенном воздействии, но и дает возможность прогноза протекания тех или иных химических и физико-химических процессов, происходящих в экосистеме с учетом различных параметров рассматриваемого природного объекта. Конечно, при составлении подобных моделей следует ограничиваться небольшим количеством факторов, учитывающих распределение загрязняющих веществ, но математическое моделирование способно прогнозировать поведение поллютантов не только во временном порядке, но и на длительное расстояние.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Cadrecha, M. // *Power Engineering J.* – 1980. – Vol. 84. – P. 54–56.
2. Davison, W. Ultra-trace analysis of soluble zinc, cadmium, copper and lead in Windermere lake water using anodic stripping voltammetry and atomic absorption spectroscopy / W. Davison // *Freshwater Biol.* – 1980. – Vol. 10, No. 3. – P. 223–227.
3. Hertz, J. Chemische Untersuchungen der atmosphärischen Deposition / J. Hertz, P. Bucher // *Chimia.* – 1988. – Vol. 42, No. 2. – P. 57–67.
4. Jieser, K.H. Reproduzierbarkeit von Analysenergebnissen bei der Bestimmung der Elemente Cd, Cr, Cu, Fe, Mn und Zn mit der flammenlosen Atomabsorption / K.H. Jieser, S. Sondermeyer, A. Kliemchen // *Fresenius Z. Anal. Chem.* – 1982. – Vol. 312, No. 6. – P. 517–519.
5. Keller, C. Activation analysis / C. Keller // In: *Ullmann's encyclopedia of technical chemistry*. 4-th ed. Weinheim, Deerfield Beach, Basel: Verlag Chemie. – 1980. – Vol. 5. – P. 685–707.
6. Kryger, L. Differential potentiometric stripping analysis / L. Kryger // *Anal. Chem. Acta*, 1980. – Vol. 120, No. 6. – P. 19–30.
7. Masamitsu, K. Construction of a permanganate ion-selective electrode and its application to potentiometric stripping analysis / K. Masamitsu, U. Naoki, K. Timihito // *Anal. Chem. Acta.* – 1983. – Vol. 30, No. 10. – P. 741–744.
8. Munn, R.E. Global environmental monitoring system, SCOPE Rep. 3 / R.E. Munn. – Toronto, 1973. – 130 p.
9. Palliere, M., Gernes, G. Nouvelle technique de dosage du mercure et des éléments. Donnant facilement des composés volatils en spectrométrie d'absorption atomique / M. Palliere, G. Gernes // *Analysis.* – 1980. – Vol. No. 1. – P. 23–25.
10. Welz, B. Atomic absorption spectrometry / B. Welz. – Weinheim, Deerfield Beach, Basel: Verlag Chemie, 1983. – 527 p.
11. Абакумов, А.И. Этапы математического моделирования [Текст] / А.И. Абакумов. – Владивосток: Изд-во Дальрыбвтуза, 1997. – 19 с.
12. Абрахимов, Ю.Р. Обезвреживание и использование сернисто-щелочных отходов нефтепереработки и нефтехимии [Текст] / Ю.Р. Абрахимов, А.Г. Ахмадуллина, И.Н. Смирнов. – М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1990. – № 4. – 49 с.
13. Абросимов, А.А. Метод нормирования выбросов углеводородов на нефтеперерабатывающих заводах [Текст] / А.А. Абросимов. – М.: Нефтепереработка и нефтехимия, 1997. – № 11. – С. 49.

14. Абросимов, А.А. Опыт работы Московского НПЗ в области охраны окружающей среды [Текст] / А.А. Абросимов. – М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1990. – 82 с.

15. Абросимов, А.А. Экологические аспекты применения нефтепродуктов [Текст] / А.А. Абросимов, А.А. Гуреев. – М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1997.

16. Амосов, Н.М. Моделирование мышления и психика [Текст] / Н.М. Амосов. – Киев, 1965. – 240 с.

17. Анохин, Ю.А. Системный анализ и имитационное математическое моделирование как методологическая основа определения допустимых нагрузок антропогенных загрязнений окружающей среды – региональный подход [Текст] / Ю.А. Анохин, Ю.А. Израэль // В кн.: Всесторонний анализ окружающей природной среды. Труды советско-американского симпозиума. – Л.: Гидрометеиздат, 1975. – С. 68–82.

18. Аристотель. О частях животных, 645а–646а [Текст] / Аристотель. – М., 1937. – С. 51.

19. Ахмедов, Р.Б. Технология сжигания горючих газов и жидких топлив [Текст] / Р.Б. Ахмедов, Л.М. Цирульников. – М.: Недра, 1984. – 238 с.

20. Безбородов, А.М. Очистка вентиляционных выбросов от паров летучих органических соединений (ЛОС) с помощью биофильтров – технология биореактор [Текст] / А.М. Безбородов [и др.]. – М.: ЦНИИТЭнефтехим: 1995. – № 4. – 21 с.

21. Берешко, И.Н. Математические модели в экологии [Текст]: учеб. пособие: Ч. 1. / И. Н. Берешко, А. В. Бетин. – Харьков: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац.ин-т», 2006. – 68 с.

22. Берлянд, М.Е. О методах определения фонового загрязнения атмосферы [Текст] / М.Е. Берлянд [и др.]. – ТрГГО, 1984. – Вып. 479. – С. 17–30.

23. Беспаятнов, Г.П. Предельно допустимые концентрации вредных веществ в воздухе и воде [Текст] / Г.П. Беспаятнов [и др.]. – 2-е изд., перераб. и доп. – Л.: Химия, 1975. – 455 с.

24. Бокс, Дж. Анализ временных рядов. Прогноз и управление [Текст]: ПЕР. с англ. / Дж. Бокс, Г.Д. Дженкинс. – Вып.1. – М.: Мир, 1974. – 406 с.

25. Будников, Г.К. Вольтамперометрия ионов тяжелых металлов на дисковых ультрамикроректроды и их ансамблях [Текст] / Г.К. Будников, В.Е. Казаков, Ю.Н. Поляков, Л.М. Урмачеев // Журнал аналитической химии. – 1994. – Т. 49, № 4. – С. 410–413.

26. Буренко, П.С. Одновременное полярографическое определение аэрозоль меди и свинца в воздухе [Текст] / П.С. Буренко, Л.П. Артемьева,

Е.В. Нехорошева // В кн.: Развитие технической безопасности и производственной санитарии. – М., 1982. – С. 75–88.

27. Гасилина, Н.К. Национальная система мониторинга состояния окружающей среды в СССР [Текст] / Н.К. Гасилина, Ф.Я. Ровинский // В кн.: Мониторинг состояния окружающей природной среды. – Л.: Гидрометеопиздат, 1977. – С. 69–81.

28. Горелов, А.А. Экология – наука – моделирование [Текст] / А.А. Горелов; отв. ред. А.Т. Шаталов. – М.: «Наука», 1985. – С. 207.

29. ГОСТ 17.2.3.01–86. Охрана природы. Атмосфера. Правила контроля качества воздуха населенных мест.

30. ГОСТ 17.2.4.02.81 «Охрана природы. Атмосфера. Общие требования к методам определения загрязняющих веществ».

31. Государственный комитет РФ по охране окружающей среды. Количественный химический анализ атмосферного воздуха и выбросов в атмосферу. ПНДФ 13.1.2.–97. – М.: 1997.

32. Гридин, В.И. Системно-аэрокосмическое излучение нефтегазоносных территорий [Текст] / В.И. Гридин, А.Н. Дмитриевский. – М.: Наука, 1994. – 282 с.

33. Гриценко, А.И. Экология. Нефть и газ [Текст] / А.И. Гриценко, Г.С. Аكوпова, В.М. Максимов. – М.: Наука, 1997. – 598 с.

34. Губайдуллин М.М. Снижение загрязнения воздуха на установках первичной переработки нефти [Текст] / М.М. Губайдуллин, В.И. Новиков, И.Э. Гудцов. – М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1985. – 44 с.

35. Ентус, Н.Р. Трубчатые печи нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности [Текст] / Н.Р. Ентус, В.В. Шарихин. – М.: Химия, 1987. – 304 с.

36. Жиронов, И.Е. Моделирование фильтрации подземных вод [Текст] / И.Е. Жиронов, В.М. Шестаков. – М., 1971. – С. 5.

37. Загвоздкин В.К. Методы контроля оксидов азота и пути их сокращения в выбросах тепловых агрегатов [Текст] / В.К. Загвоздкин, В.Т. Пушкин, Б.М. Кривоногов. – М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1990. – № 2. – 77 с.

38. Процессы столкновений в ионизированных газах [Текст] / И. МакДаниэль. – М.: Мир, 1967. – 832 с.

39. Ивахненко, А.Г. Долгосрочное прогнозирование и управление сложными системами [Текст] / А.Г. Ивахненко. – Киев: Техника, 1975. – 312 с.

40. Израэль, Ю.А. Глобальная система наблюдений. Прогноз и оценка изменений состояния окружающей природной среды. Основы мониторинга

[Текст] / Ю.А. Израэль // Метеорология и гидрология. – 1974. – № 7. – С. 3–8.

41. Израэль, Ю.А. Комплексный анализ окружающей среды. Подходы к определению допустимых нагрузок на окружающую природную среду и обоснованию мониторинга [Текст] / Ю.А. Израэль // В кн.: Всесторонний анализ окружающей природной среды. Труды советско-американского симпозиума. – Л.: Гидрометеиздат, 1975. – С. 17–25.

42. Израэль, Ю.А. Об оценке состояния биосферы и обоснование мониторинга [Текст] / Ю.А. Израэль. – ДАН СССР, 1976. – Т. 226, № 4. – С. 955–957.

43. Инструкция по проведению инвентаризации источников выбросов вредных веществ в атмосферу (по форме № 1 – воздух). ЦСУ СССР. Утверждена ЦСУ СССР и Госнабом СССР 12.03.1979 № 42/082 – 018/2 – 90. – 7 с.

44. Охрана воздушного бассейна на предприятиях нефтепереработки и нефтехимии в связи с переходом на экономические методы управления [Текст] / Г.М. Кавилов [и др.]. – М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1990. – № 6. – 56 с.

45. Капцов, Н.А. Электрические явления в газах и вакууме [Текст] / Н.А. Капцов. – М.: Изд-во технической литературы, 1950. – 836 с.

46. Катин, В.Д. Снижение вредных выбросов в воздушный бассейн при сжигании нефтезаводских газов и мазута в технологических печах. Катин В. Д., Келарев [и др.]. – М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1996. – 115 с.

47. Катин, В.Д. Экологическая эффективность трубчатых печей [Текст] / В.Д. Катин, И.Г. Киселев, А.Р. Эйсмонт. – М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1993. – № 3. – 57 с.

48. Катин, В. Д. Содержание токсичных веществ в продуктах сгорания трубчатых печей [Текст] / В.Д. Катин, В.М. Кривоногов // ХТТМ. – 1986. – № 8. – С. 43–44.

49. Климат Москвы (особенности климата большого города) [Текст] / под ред. А.А. Дмитриева, Н.П. Бессонова. – Л.: Гидрометеиздат, 1977.

50. Кондратьев В.Я., Григорьев А.А., Покровский А.Г. и др. Космическая дистанционная индикация малых газовых и аэрозольных компонентов в атмосфере [Текст] / В.Я. Кондратьев [и др.]. – Л.: Изд-во ЛГУ, 1974 г.

51. Кондратьев, К.Я. Метеорологическое зондирование атмосферы из космоса [Текст] / К.Я. Кондратьев, Ю.М. Тимофеев. – Л.: Гидрометеиздат, 1978.

52. Контроль химических и биохимических показателей окружающей среды [Текст]: сб. науч. тр. / под ред. В.М. Исаева. – СПб., 1998, – 896 с.

53. Кочергин, А.Н. Моделирование мышления [Текст] / А.Н. Кочергин. – М., 1969, – С. 31.

54. Кочергин, А.Н. Моделирование мышления [Текст] / А.Н. Кочергин. – М., 1996. – С. 35.
55. Кротова, В.В. Проблемы экологии Москвы [Текст]: сборник / В.В. Кротова [и др.]. – М.: Гидрометеоздат, 1992. – 198 с.
56. Кузина, В.В. Математическое моделирование процессов переноса примесей в водных экосистемах региона [Текст] // Математические методы в технике и технологиях: сб. тр. XXIII Междунар. науч. конф. В 12 т. Т. 4. Секция 4 // под общ. ред. В.С. Балакирева. – Саратов: Изд-во Саратовского гос. тех. университета. – 2010. – С. 88–91.
57. Кузина, В.В. Система мониторинга распространения возможных техногенных загрязнений водной среды региона на основе математических моделей и методов [Текст] / В.В. Кузина, А.Н. Кошев // Известия вузов. Строительство. – Новосибирск: изд. НГАСУ (Сибстрин). – 2008. – №7. – С. 106–112.
58. Кузина, В.В. Математические модели мониторинга техногенных загрязнений водной среды региона [Текст] / В.В. Кузина, А.Н. Кошев, И.Ф. Сухов // Наука и технологии. Т. 2. Труды XXVIII Российской школы. – М.: РАН, 2008. С. 251–258.
59. Кузовлев, Г.Ф. Факельная установка повышенной экологической безопасности [Текст] / Г.Ф. Кузовлев [и др.]. – М.: Химия и технология топлив и масел, 1998. -№ 2. – с. 19 – 20.
60. Кунцевич, А.Д. Успехи химии / А.Д. Кунцевич. – 1991. – Т. 60. – № 3. – С. 530–535.
61. Лавров, Н.В. Процессы горения топлива и защита окружающей среды [Текст] / Н.В. Лавров. – М.: Металлургия, 1984. – 240 с.
62. Лосев, А.Ф. Проблема символа и реалистическое искусство [Текст] / А.Ф. Лосев. – М., 1976. – С. 133.
63. Лунин, А.Ф. Защита воздушного бассейна от выбросов углеводородсодержащих соединений [Текст] / А.Ф. Лунин, И.Д. Власова, Т.А. Соколинская, Т.П. Вишнякова. – М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1992. – № 2. – 43 с.
64. Мамихин, С.В. Международная кооперация в области математического моделирования поведения радионуклидов в наземных экосистемах // Проблемы радиоэкологии и пограничных дисциплин / С.В. Мамихин, ред. В.И. Мигунов, А.В. Трапезников. – Вып.9. – Заречный, 2006. – С. 159–178.
65. Мастеренко, В.Н. Эколого-аналитический мониторинг супертоксикантов [Текст] / В.Н. Мастеренко, Р.З. Хамитов, Г.К. Будников. – М.: Химия, 1996. – 319 с.
66. Метод моделирования в естествознании [Текст] / Тезисы докладов. – Тарту, 1966, – С. 66.

67. Методика по определению выбросов вредных веществ в атмосферу на предприятиях Госкомнефтепродукта РСФСР. – Астрахань, 1988.
68. Методика проведения инвентаризации выбросов загрязняющих веществ в атмосферу для автотранспортных предприятий. – М., 1992.
69. Методика расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ для нормирования выбросов и установления предельно допустимых выбросов. – М.: Гидрометеиздат, 1981. – 36 с.
70. Методические указания по определению и расчету вредных выбросов их основных источников предприятий и нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности. – М., 1984.
71. Михайлов, М.В. Сокращение выбросов оксидов азота нефтеперерабатывающей промышленности США и Японии [Текст] / М.В. Михайлов, Т.Е. Дадыжанская // Нефтепереработка и нефтехимия. – М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1988. – № 2. – С. 11–14.
72. Моисеев, Н.Н. Методы системного анализа в проблеме «Человек и биосфера» / Н.Н. Моисеев, Ю.М. Свирежев // В кн.: Взаимосвязь наук при решении экологических проблем. – Москва – Обнинск, 1976. – С. 52–53.
73. Морозов, К.Е. Математическое моделирование в научном познании [Текст] / К.Е. Морозов. – М., 1969. – С. 40.
74. Моросанова, С.А. Методы анализа природных и промышленных объектов [Текст] / С.А. Моросанова, Г.В. Прохорова, Е.Н. Семеновская. – М.: Изд-во МГУ, 1988. – 93 с.
75. Моряков, В.С. Снижение загрязнения воздуха на предприятиях нефтеперерабатывающей промышленности [Текст] / В.С. Моряков, М.М. Губайдуллин. – М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1983. – № 3. – 66 с.
76. Назаренко, И.И. Лабораторные и технологические исследования и обогащение минерального сырья. Анализ объектов окружающей среды. [Текст] / И.И. Назаренко [и др.] – М.: ВНИЭМС, 1989. – 56 с.
77. Назаров, И.М. О наблюдении за загрязняющими веществами в системе глобального мониторинга [Текст] / И.М. Назаров // в кн.: Мониторинг состояния окружающей природной среды. Труды Первого советско-английского симпозиума. – Л.: Гидрометеиздат, 1977. – С. 81–85.
78. Ньютон, И. Математические начала натуральной философии [Текст] / И. Ньютон. – Кн. II/III. – Пг., 1916. – С. 376.
79. Образование и разложение загрязняющих веществ в пламени. [Текст] / под ред. Н.А. Чигира. – М.: Машиностроение, 1981. – 407 с.
80. Овчаренко, Т.. Отечественные приборы экологического контроля [Текст] / Т.Б. Овчаренко, Д.Н. Чернышов. – М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1995, № 2–3. – 60 с.

81. Овчаренко, Т.В. Отечественные приборы экологического контроля [Текст] / Т.В. Овчаренко, Д.Н. Чернышов. – М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1995, № 2–3. – 60 с.
82. Определение содержания предельных (10 компонентов от метана до гексана), непредельных ($C_2 - C_5$) и ароматических углеводородов в воздухе рабочей зоны [Текст]: метод. указания. – 1984. – 30 с.
83. Отс, А.А. Экспериментальные исследования образования окислов азота из азотосодержащих соединений в процессе сжигания жидкого топлива [Текст] / А.А. Отс, Д.М. Егоров, К.Ю. Саар. – М.: Теплоэнергетика, 1979. – № 4. – С. 68–71.
84. Пака, П. Обзор аналогов системы мониторинга Москвы [Текст] / П. Пака // Сборник «Проблемы экологии Москвы». – М.: Гидрометеиздат, 1992. – С. 53–62.
85. Пичинин, М.А. Санитарная охрана атмосферного воздуха городов [Текст] / М.А. Пичинин. – М.: Медицина, 1976.
86. Под ред. доктора хим. наук Ф.Я. Ровинского. Миграция веществ антропогенного происхождения в речных бассейнах и моделирование качества воды [Текст] / Гидрометеиздат, вып.31, 1979.
87. Предложения по разработке отраслевой классификации источников выбросов вредных веществ в атмосферу [Текст]. – М.: Госкомгидромет, 1985. – 66 с.
88. Райзер, Ю.П. Физика газового разряда [Текст] / Ю. П. Райзер. – М.: Наук, 1987. – 529 с.
89. Рамендик, Г.И. Новые направления работ и перспективы развития искровой масс-спектрологии [Текст] / Г.И. Рамендик. // Журн. аналитической химии. – 1983. – Т. 38. – № 11. – С. 2036–2050.
90. Роева, Н.Н. Моделирование в экологии [Текст]: моногр. / Н.Н. Роева, А.Н. Баранов, В.А. Щепетова, Н.Н. Гребенкин. – Рязань: «РИД», 2011. – 188 с.
91. Розовский, Л.Б. Введение в теорию геологического подобия и моделирования [Текст] / Л.Б. Розовский. – М., 1969.
92. Руководство по контролю загрязнения атмосферы. РД 52.04.186–89. [Текст]. – М.: Государственный комитете СССР по гидрометеорологии и Министерство здравоохранения СССР, 1991. – 693 с.
93. Руководство по контролю загрязнения атмосферы. РД 52.04.186–89. – М., 1991.
94. Санитарные нормы проектирования промышленных предприятий. СН 245–71.

95. Сборник временных отраслевых методик для определения загрязняющих веществ в атмосферном воздухе в районах размещения предприятий нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности. – М.: 1985, 68 с.

96. Сборник временных отраслевых методик для определения загрязняющих веществ в атмосферном воздухе в районах размещения предприятий нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности. – М., 1985.

97. Сборник методик по определению концентраций загрязняющих веществ в промышленных выбросах [Текст]. – Л., 1987.

98. Сигал, Н.Р. Защита воздушного бассейна при сжигании топлива [Текст] / Н.Р. Сигал, В.В. Шарин. – Л.: Недра, 1988. – 312 с.

99. Синицин, Ю.Б. Геологические исследования и охрана недр / Ю.Б. Синицин, В.Н. Пятова // Вып. 1. Контроль загрязнения окружающей среды, с использованием лазерного спектрографического микроанализа. – М.: МГП Геоинформкомитет Российской Федерации по геологии и использованию недр, 1993. – 54 с.

100. Смит, Дж. Модели в экологии [Текст] / Дж. Смит. – М.: Мир, 1976, 184 с.

101. Состояние природной среды в СССР в 1988 году [Текст]. – М.: ВИНТИ, 1989. – № 10. – С. 10.

102. Стрейтц, Дж.Ф. Новые конструкции факела, предотвращающие загрязнение окружающей среды [Текст] / Дж. Ф. Стрейтц // Переработка углеводородов. – 1997. – С. 7–42.

103. Уатт, К. Экология и управление природными ресурсами [Текст] / К. Уатт. – М.: Мир, 1971, – 463 с.

104. Уемов, А.И. Логические основы метода моделирования [Текст] / А.И. Уемов. – М., 1971. – С. 12.

105. Устинов, Б.М. Опыт работы Московского НПЗ в области охраны водного и воздушного бассейнов [Текст] / Б.М. Устинов. – М.: ЦНИИТ-Энефтехим, 1986. – 35 с.

106. Федоров, Е.К. Взаимодействие общества и природы [Текст] / Е.К. Федоров. – Л.: Гидрометеиздат, 1972. – 88 с.

107. Хабибуллин, Р.Р. Пути решения экологической проблемы производства синтез-газа в нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности [Текст] / Р.Р. Хабибуллин, Н.А. Малышев. – М.: ЦНИИТ-Энефтехим, 1989. – № 2. – 43 с.

108. Хаггет, П. Модели, парадигмы и новая география [Текст] / П. Хаггет, Р. Чорли // в кн.: Модели в географии. – М., 1971. – С. 7–29.

109. Черик, М.Н. Лаборант-аналитик свинцово-цинковых заводов [Текст] / М.Н. Черик, Б.С. Христофоров. – М.: Metallurgia, 1977. – 167 с.
110. Чупахин, М.С. Аналитические возможности искровой масс-спектрометрии / М.С. Чупахин, О.И. Крючкова, Г.И. Рамендик. – М.: Атомиздат, 1972. – 222 с.
111. Шабанова, Л.Н. Масс-спектрометрический анализ веществ высокой чистоты с использованием замороженной капли [Текст]: автореф. дис... канд. хим. наук / Л.Н. Шабанова. – Новосибирск, 1981. – 20 с.
112. Шимкович, В.В. Современное состояние охраны окружающей среды на нефтеперерабатывающих предприятиях (По регионам размещения и отрасли в целом) [Текст] / В.В. Шимкович. – М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1993. – № 2. – 49 с.
113. Щепетова, В.А. Анализ экологического состояния Пензенского водохранилища [Текст] / В.А. Щепетова, Т.В. Толстова // Фундаментальные исследования, 2011. – № 8, ч. 1. – С. 188–189.
114. Экспресс-информация «Переработка нефти и нефтехимия». – М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1985. – № 35. – С. 5–7.
115. Экспресс-информация. Совершенствование факельной системы с целью снижения степени загрязнения окружающей среды. – М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1985. – № 26. – С. 33–35.
116. Янковский, И.А. Опыт и практика работы службы наблюдения за загрязнением атмосферы [Текст] / И.А. Янковский. – ТрГГО, 1979. – Вып. 417. – С. 117–120.

ОГЛАВЛЕНИЕ

| | |
|--|-----|
| ПРЕДИСЛОВИЕ | 3 |
| 1. СТАНОВЛЕНИЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ КАК НАУЧНОГО МЕТОДА ИССЛЕДОВАНИЯ | 5 |
| 1.1. Краткий исторический обзор развития моделирования как метода исследования..... | 5 |
| 1.2. Значение моделирования во взаимоотношениях человека и природы..... | 20 |
| 2. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК МЕТОД ОЦЕНКИ СОСТОЯНИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ | 32 |
| 2.1. История развития математического моделирования в экологии ... | 32 |
| 2.2. Классификация моделей | 35 |
| 2.3. Математическое моделирование – основные понятия | 41 |
| 2.4. Классификация математических моделей в экологии..... | 44 |
| 2.5. Этапы моделирования в экологии и биологии..... | 45 |
| 2.6. Обзор существующих математических моделей в экологии..... | 49 |
| 2.7. Компьютерная реализация моделей. Краткий обзор..... | 56 |
| 3. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СОСТОЯНИЯ РЕКИ СУРА И ПЕНЗЕНСКОГО ВОДОХРАНИЛИЩА..... | 60 |
| 3.1. Моделирование процесса миграции никеля, кадмия и цинка на примере реки Сура..... | 60 |
| 3.2. Математическое моделирование как метод прогнозирования изменения состояния водных экосистем на примере Пензенского водохранилища..... | 102 |
| ЗАКЛЮЧЕНИЕ | 111 |
| БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК | 112 |

Научное издание

Щепетова Вера Анатольевна

ОСНОВЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ЭКОЛОГИИ

Монография

В авторской редакции

Верстка Т.А. Лильп

Подписано в печать 12.10.15. Формат 60×84/16.

Бумага офисная «Снегурочка». Печать на ризографе.

Усл.печ.л. 7,10. Уч.-изд.л. 7,63. Тираж 500 экз. 1-й завод 100 экз.

Заказ №379.

Издательство ПГУАС.
440028, г. Пенза, ул. Германа Титова, 28.