

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
МІСЬКОГО ГОСПОДАРСТВА імені О. М. БЕКЕТОВА**



В. О. БАРАННІК

**КОНСПЕКТ ЛЕКЦІЙ
з дисципліни**

**МОДЕЛЮВАННЯ ТА
ПРОГНОЗУВАННЯ СТАНУ
ДОВКІЛЛЯ**

*(для студентів денної та заочної форм навчання
спеціальності 101 – Екологія)*

Бараннік В. О. Конспект лекцій з дисципліни «Моделювання та прогнозування стану довкілля» (для студентів денної та заочної форм навчання спеціальності 101 – Екологія.) / В. О. Бараннік ; Харків. нац. ун-т міськ. госп-ва ім. О. М. Бекетова. – Харків : ХНУМГ ім. О. М. Бекетова, 2017. – 46 с.

Автор канд. фіз.-мат. наук В. О. Бараннік

Рецензент канд. техн. наук, доц. Є. Г. Пономаренко

*Рекомендовано кафедрою міських і регіональних екосистем,
протокол № 6 від 25 грудня 2015 р.*

© В. О. Бараннік, 2017
© ХНУМГ ім. О. М. Бекетова, 2017

ЗМІСТ

Вступ	4
1 Понятійний апарат та загальні принципи моделювання і прогнозування стану довкілля.....	5
1.1 Понятійний апарат і засади моделювання і прогнозування стану довкілля.....	5
1.2 Місце і різновиди математичного моделювання в системному аналізі проблем забруднення довкілля.....	8
1.3 Системний підхід до побудови математичних моделей.....	9
2 Статистичні методи моделювання і прогнозування стану довкілля.....	13
2.1 Регресійні моделі параметрів стану систем довкілля.....	17
2.2 Моделі Монте-Карло.....	23
2.3 Марковські моделі процесів у довкіллі.....	25
3 Моделювання і прогнозування наслідків антропогенного впливу на довкілля.....	29
3.1 Аналітичне моделювання фізичних і біотичних процесів у довкіллі.....	29
3.2 Принципи складання детермінованих моделей процесів у довкіллі.....	32
3.3 Детерміновані моделі процесів у біореакторах.....	34
3.4 Детерміновані моделі процесів у водоймах.....	38
4 Математичні моделі популяційної екології.....	40
4.1 Дискретні моделі динаміки чисельності окремих популяцій.....	40
4.2 Моделювання трофічного ланцюга на прикладі моделей «хижак – жертва».....	42
Список рекомендованої літератури	45

ВСТУП

Мета цього курсу лекцій – викласти основи створення і застосування математичних моделей, у яких найбільше має потребу інженерна екологія, якщо ціллю дослідження є моделювання і прогнозування стану природних або штучних екосистем для отримання нових знань щодо їх можливих властивостей.

Давно минули часи, коли екологія обмежувалася якісними або досить простими кількісними описами спостережень. Саме застосування сучасного математичного апарату моделювання в екологічних дослідженнях виправдовує прикметних «інженерна» у назві досить молодого наукового та продуктивного інженерного напрямку досліджень і розробок, що має назву «інженерна екологія».

Відбір матеріалу досить важкий: курс лекцій, що вміщує усі методи, які застосовуються у різних задачах інженерної екології, був би надзвичайно великим. Тому ми звичайно включали моделі та методи, що мають найбільше застосування на практиці, і навели посилання на інші посібники; проте ми не завжди керувалися цим правилом у всіх випадках.

Цим конспектом лекцій можна користуватися послідовно, але деякі його складові є досить незалежними від інших; таким чином можна і навіть корисно вивчати окремі лекції паралельно. Звичайно, вважається, що користувач вже знайомий з курсом математичного аналізу в обсязі програми вищого технічного учбового закладу. Ми вважали також доцільним рознести лекції за змістовими модулями, що передбачені навчальною програмою дисципліни «Моделювання і прогнозування стану довкілля».

1 ПОНЯТІЙНИЙ АПАРАТ ТА ЗАГАЛЬНІ ПРИНЦИПИ МОДЕЛЮВАННЯ І ПРОГНОЗУВАННЯ СТАНУ ДОВКІЛЛЯ

1.1 Понятійний апарат і загальні принципи моделювання і прогнозування стану довкілля

Свідомість людини наділена обмеженою спроможністю сприймати всевіт у всьому різноманітті його явищ і зв'язків, саме тому умовний розподіл його на системи забезпечує можливість аналізу процесів, що відбуваються у ньому взагалі і, зокрема, у навколишньому середовищі, що оточує людину. **Звичайно під системою розуміють сукупність одного або декількох елементів середовища, що взаємодіють між собою та з довкіллям, від якого система відокремлюється фізичними або умовними границями.**

Взаємодія елементів системи між собою та з довкіллям відбувається за рахунок **силової дії, обміну речовинами, енергією або інформацією.**

Інженерна екологія найбільшу увагу приділяє обміну речовинами або енергією. Відповідно до цього з певною мірою абстрагування дійсності розрізняють закриті й відкриті та проточні й непроточні системи. **Закритою системою** називають сукупність, якщо можна знехтувати взаємодією її елементів з довкіллям без втрати її суттєвих властивостей, що підлягають аналізу (наприклад, чай та повітря у закритому термосі на протязі нетривалого часу). У протилежному випадку систему називають **відкритою**. Відкриті системи поділяють на проточні та непроточні. До **непроточних** відносять відкриту систему, якщо можна знехтувати її обміном речовинами із довкіллям (наприклад, продукти та повітря у закритому холодильнику). У протилежному випадку систему відносять до **проточних систем**.

Характеристиками системи є фізичні величини, що визначають вміст речовин і енергії в елементах системи та потоки речовин і енергії між елементами системи та між системою і довкіллям. Фізичні величини вмісту та потоків речовин і енергії у системі та між системою і довкіллям називають **змінними системи**. Сукупність змінних, що визначають потоки речовин або енергії від довкілля до системи, називають **входами системи**. Сукупність змінних, що визначають потоки речовин або енергії від системи у довкілля, називають **виходами системи**. **Параметрами** називають фізичні величини, що визначають властивості потоків речовин або енергії між елементами системи та між системою і довкіллям. Частина параметрів певної системи, що мають незмінні величини, називають її **коефіцієнтами**, а коефіцієнти, що мають універсальну величину для усіх або багатьох систем (наприклад, маса атома водню, число Авогадро, прискорення сили тяжіння на рівні земної поверхні, тощо), визначають як **константи**.

Класифікацію простих систем за ознаками, що мають суттєве значення відповідно до цілей їх дослідження, можна проводити з використанням наступних альтернатив: детермінованість – випадковість, зосередженість – розподіленість, статичність – динамічність, неперервність – дискретність, лінійність – нелінійність.

Так, якщо впливом випадкових факторів на входи, виходи і в самій системі можна знехтувати, так що існує однозначна залежність виходів від входів, то її

відносять до *детермінованих систем*. У протилежному випадку систему розглядають як *імовірнісну* або *стохастичну*.

Якщо неоднорідністю розподілу вмісту речовин та енергії в системі можна знехтувати, то систему розглядають як *зосереджену* або з *зосередженими параметрами*, і в протилежному випадку - як *розподілену* або з *розподіленими параметрами*.

Якщо усі змінні системи можна вважати постійними у часі, то система є *статичною*. Система є *динамічною*, якщо деякі змінні змінюються у часі.

Якщо всі змінні системи можна вважати неперервними функціями часу, то систему розглядають як *неперервну*. У протилежному випадку її відносять до *дискретних* систем.

Нарешті, якщо з достатньою для цілей дослідження точністю виходи системи можна визначити як лінійні комбінації її входів (суперпозиція впливів), то систему розглядають як *лінійну*. Навпаки, коли деякі входи підсилюють або послаблюють вплив інших входів на систему, то її відносять до *нелінійних* систем.

Слід пам'ятати, що реальні об'єкти завжди поєднують у собі альтернативні властивості, тому віднесення системи до певного виду є абстрагуванням, доцільність якого обумовлюється метою дослідження та вимогами її спрощення без втрати бажаної точності результатів аналізу. Ситуація ще більше ускладнюється, якщо деякими елементами складної системи є інші системи. Тоді система верхнього рівня ієрархії може поєднувати альтернативні властивості об'єктів у будь-якому сполученні.

Різновиди моделей. *Моделювання* – це один з найважливіших сучасних методів наукового дослідження. В наукових дослідженнях моделлю називають матеріальний або уявний (ідеальний) об'єкт, який заміщує у дослідженні об'єкт довкілля таким чином, що дозволяє дослідити певні його властивості з достатньою для цілей дослідження точністю. Відповідно до цього, розрізняють матеріальні та ідеальні моделі.

Матеріальні моделі втілюють властивості об'єкта, який досліджується, з використанням схожості форми, структури (аналогові моделі) або процесів (фізичні моделі), що досліджуються. Саме дослідження у такому разі включає матеріальний вплив на модель, тобто проведення експерименту. Основним видом матеріальних моделей у наукових дослідженнях є фізичні моделі, які своїм виглядом і структурою повторюють об'єкт, що моделюється, з певним масштабом. Критерії подоби такого втілення використовують для перерахунку модельних вимірів у кількісні характеристики об'єкта довкілля. Найбільше використання такого роду моделі знайшли у технічних науках. Проте в екологічних дослідженнях вони практично не застосовуються.

Ідеальні моделі з'являються у свідомості і є уявними образами (образні моделі) або символами (символьні моделі) об'єктів довкілля. У наукових дослідженнях найбільший розвиток отримали математичні моделі, що описують об'єкти і процеси довкілля за допомогою спеціальних символів, які, не зважаючи на різницю численних мов людства, мають однакове застосування скрізь на земній кулі.

Ідеальні моделі засновані на уявній аналогії об'єкта і моделі. Таке моделювання носить теоретичний характер. Найбільший розвиток отримали концептуальні та математичні моделі.

Класифікація математичних моделей відповідно до властивостей процесів довкілля, що моделюються. Взагалі, математична модель – це спеціальна (знакова) мова, що у порівнянні із звичайними мовами не має надмірності в описі об'єктів; тобто будь-яке її ствердження є або істинним або помилковим. Математичні моделі можуть мати вигляд функцій, рекурентних залежностей, окремих алгебричних рівнянь та їх систем, окремих та систем звичайних диференціальних рівнянь, окремих та систем диференціальних рівнянь у частинних похідних тощо.

Класифікація математичних моделей може відбуватися за ознаками систем, що моделюються. Так математичні моделі простих за структурою систем також можуть визначатися як:

- детерміновані або ймовірнісні (стохастичні) моделі;
- моделі з зосередженими або розподіленими параметрами;
- статичні або динамічні моделі;
- дискретні або неперервні моделі;
- лінійні або нелінійні моделі.

Моделювання в прогнозах і сценаріях стану довкілля. Прогнозування є невід'ємною складовою свідомої діяльності людей на різних рівнях пізнання явищ довкілля в широкому сенсі, тому що без нього неможлива доцільність вчинків. На побутовому, повсякденному рівні людина постійно аналізує явища, що відбулись, намагається передбачити хід подій у майбутньому і визначити свої дії у відповідності зі своїми інтересами, спираючись на особистий досвід і досвід свого оточення. Звичайно, таке прогнозування не потребує використання математичних або матеріальних моделей. З іншого боку, коли мова йде щодо наукового аналізу функціонування існуючих складних інженерно-технічних або еколого-інженерних систем, оцінки можливих впливів на довкілля дій або об'єктів, що існують тільки в намірах або проектних планах, то моделювання є необхідним інструментом дослідження можливих наслідків і оптимізації втручання в природні процеси довкілля.

Можна розрізнявати два види прогнозів – безумовні та умовні. **Безумовний прогноз** є передбачення і надання або поширення інформації щодо наступу певної події в реальній системі, тобто явища з певними ознаками, що обов'язково наступить у певний проміжок часу і у певному місці. До таких прогнозів відносяться, наприклад, прогнози погоди, що кожного дня надають Гідрометслужби країни, анонси виступів театральних колективів або розклад занять в урочовому закладі. Якість прогнозів характеризують такими первинними показниками як **глибина** (за терміном перспективи, на яку прогноз надається), **детальність** (за складом і кількістю ознак, що прогнозуються), **точність** (за похибками прогнозованих кількісних оцінок) та **виправданість** (за ймовірністю або частотою, з якими прогноз має збігатися або збігається з реальністю).

На відміну від безумовних прогнозів **умовний прогноз**, який також є передбаченням певних подій або явищ, додатково супроводжується переліком умов, за якими ці події або явища можуть наступити. У зв'язку з відсутністю упевненості, який саме набір факторів, що будуть впливати на хід подій або картину явищ, буде дійсно реалізований, умовні прогнози є багатоваріантними. В

умовних прогнозах математичне моделювання є інструментом виконання **прогностичних розрахунків** кількісних ознак можливих явищ, що можуть наступити у відповідності з можливими наборами факторів впливу. Іншими словами, прогностичні розрахунки це є математизований пошук відповідей на запитання якою може бути реакція (вихід) системи навколишнього середовища, якщо складеться певний набір зовнішніх контрольованих і неконтрольованих впливів (входи системи).

Кожний набір входів системи, що розглядається і повністю визначає її реакцію, разом з відповідним розрахованим за моделлю системи її виходом складають **прогностичний варіант** або **сценарій**. Дослідження різних сценаріїв використовується для отримання нових знань про екологічні процеси у системі, визначення умов встановлення її рівноважних станів, прогнозування можливих змін її стану і умов, за якими вони можуть відбутися, а також для оптимізації контрольованих впливів на систему з огляду на потрібні для цього ресурси та бажаність або корисність відповідних режимів її функціонування. Саме вимоги прийняття обґрунтованих рішень щодо управління складними системами навколишнього середовища надають великого практичного значення їх математичним моделям.

1.2 Місце і різновиди математичного моделювання в системному аналізі проблем забруднення довкілля

Який саме вид математичної моделі слід обрати для дослідження певної інженерно-екологічної системи, з'ясовують на відповідних етапах **системного аналізу проблеми** – методології дослідження об'єктів на основі зображення їх у вигляді систем і аналізу цих систем методами логічного, математичного або натурального моделювання.

Як відомо, основними етапами системного аналізу довкілля є:

1. Визначення границь та елементів системи, в межах якої існує проблема, а також екологічних, економічних і соціальних критеріїв оцінки її проявів або наслідків та варіантів її вирішення.

2. Збір інформації щодо елементів системи, визначення її структури, причинно-наслідкових зв'язків та побудова концептуальної моделі (блок-схеми) системи. Встановлення змінних системи та побудова її математичної моделі, що визначає зв'язок виходів системи з її входами.

3. Визначення найдоцільнішого варіанту впливу на входи системи через моделювання та порівняння виходів системи за встановленими критеріями.

Саме на другому і третьому етапі системного аналізу визначається та застосовується математичний апарат, що забезпечує можливість адекватної імітації певних властивостей процесів або явищ, які цікавлять дослідника. Широке застосування математичних моделей у системному аналізі проблем взаємодії суспільства і природи обумовлене, з одного боку, швидким зростанням використання і можливостей обчислювальної техніки, порівняно низькою вартістю розробки моделей та достатньо високою точністю розрахунків, а з другого – дуже обмеженими можливостями лабораторного або натурального моделювання складних процесів і систем навколишнього середовища. У той же

час саме дані спостережень і експериментів складають підґрунтя математичного моделювання, без якого воно залишається відірваним від дійсності.

Процес складання та уточнення математичної моделі системи починається вже з першого етапу системного аналізу і формально завершується на третьому етапі, де уявлення щодо причинно-наслідкових зв'язків системи перетворюються у сукупність математичних складових моделі, що мають вигляд тотожностей, рівнянь, нерівностей тощо. Цей процес нагадує побудову бажаної моделі певної конструкції з елементів конструктора. Ця аналогія досить глибока, тому що сучасне комерційне програмне забезпечення складних інженерних розрахунків містить майже повний набір необхідних елементів математичного аналізу, засобів їх поєднання у математичні моделі систем, пошуку рішень, аналізу і відображення результатів моделювання та наділене такими дружніми інтерфейсами, що надають математичному моделюванню ігрових ознак.

1.3 Системний підхід до побудови математичних моделей ***Порядок розробки математичних моделей процесів довкілля.***

Процес побудови математичної моделі системи навколишнього середовища включає повністю або частково наступні стадії.

Слід особливо підкреслити, що процес розробки математичної моделі – це, як правило, ітеративна процедура із зворотними зв'язками, позначеними пунктирними стрілками, послідовного наближення до бажаного опису об'єкта, що моделюється.

1. Прийняття рішення щодо необхідності розробки математичної моделі.
2. Визначення мети моделювання.
- ▲-----> 3. Опис системи, що моделюється: визначення її елементів, границь, довкілля, взаємодії елементів.
- > 4. Розгляд та обґрунтування припущень щодо можливого спрощення системи, що моделюється.
- > 5. Визначення змінних системи, її входів, виходів, параметрів.
- > 6. Формулювання моделі у вигляді блок-схеми змінних системи та їх зв'язків, рівнянь, початкових та граничних обмежень (умов) тощо.
7. Перетворення моделі у стандартну математичну форму.
8. Підготовка моделі до реалізації на обчислюваному пристрої.
- ←----- 9. Налаштування моделі за даними спостережень.
- ←----- 10. Перевірка адекватності моделі за даними спостережень.
11. Практичне застосування моделі.

Рішення щодо достатнього для цілей моделювання відтворення реакцій виходів системи на зміну її входів приймаються на стадіях налаштування та перевірки адекватності моделі.

Стадія налаштування моделі необхідна тому, що навіть при використанні у побудові моделі фундаментальних принципів і теорій, вихід моделі може суттєво відрізнятись від реакції об'єкта внаслідок прийнятих припущень і спрощень. Ці відхилення можуть бути певною мірою мінімізовані. Для цього дані натурних спостережень використовують як ***«навчальну» вибірку***.

Моделювання процесів (прогонка моделі) для умов спостереження за різними величинами її вільних (обраних для підбору) параметрів і коефіцієнтів виконується до тих пір, доки вихід моделі не буде відповідати навчальній вибірці найліпшим чином. Якщо ця відповідність задовольняє встановлені вимоги до адекватності моделі, то стадія настройки моделі вважається успішною. Якщо ні, то слід переглянути припущення і спрощення, що приймалися на попередніх стадіях. Якщо у процедурі настройки моделі підбирають декілька параметрів, то доцільно перед цим провести **аналіз чутливості** виходів моделі до зміни цих величин. Це дозволяє зосередити зусилля на підборі величин тих параметрів, які найбільшим чином впливають на виходи моделі.

Стадія перевірки адекватності (відповідності) моделі доцільна з такої причини. Навіть якщо настройка моделі пройшла з успіхом, пристосованість моделі до імітації реакцій об'єкта за іншими зовнішніми впливами залишається під питанням. **Неформальна перевірка** точності моделі виконується за допомогою розрахунків та порівняння результатів за модельними ситуаціями, що допускають аналітичні рішення. Підвищити степінь упевненості щодо адекватності моделі дозволяє процедура її **формальної перевірки**. Для цього необхідно мати **перевірочну вибірку** спостережень об'єкта за умов, що відрізняються від умов спостережень, які були використані як навчальна вибірка. Якщо відміна перевірочних результатів моделювання від даних спостережень достатньо мала, а саме, відповідає встановленим вимогам до адекватності моделі, то перевірка моделі визнається успішною. У протилежному випадку слід знову повернутися до перегляду попередніх стадій розробки моделі з метою її удосконалення.

Засоби Microsoft Excel[®]. Доступність за ціною потужних високошвидкісних настільних ЕОМ разом з розвинутим програмним забезпеченням сприяли в останні роки значному поширенню використання математичних моделей в різних галузях науки та техніки. Переваги комп'ютерних імітаційних моделей для розуміння, аналізу і прогнозів поведінки складних природних і інженерних систем стали загально визнаними. Зараз значна кількість розроблених професіоналами проблемно-орієнтованих програмних продуктів, що дозволяють проводити досить складні числові імітаційні експерименти, доступні на різних умовах для практичного використання.

Більшість програм, що використовуються у теперішні часи, розроблені з застосуванням комп'ютерних мов програмування, таких як Fortran, Pascal, C, BASIC та інших. Кінцеві користувачі часто адаптують ці програми для своїх потреб у режимі «чорної скриньки», тобто заповнюють необхідними параметрами модельної системи певні формати і отримують величини певних параметрів, що були передбачені програмістами. Доступ користувачів до первинного коду таких програм звичайно не передбачається, що не дозволяє у необхідних випадках модифікувати програми для пристосування до власних потреб.

Часто дослідники, інженери або інші особи опиняються у ситуаціях, коли програмне забезпечення не є досить гнучким, доступним або відповідним конкретним цілям дослідження. У таких випадках виникає потреба у розробці власних програм або комп'ютерних моделей, що відповідали би власним потребам.

Використання у таких цілях традиційних мов програмування потребує значного досвіду програмування на додаток до знання предметної області моделювання. Навіть коли таких досвід є, програмування може зайняти багато часу, що в умовах обмеженого використання імітаційної моделі може бути недоцільним.

Визнавши потреби фахівців, що не мають досвіду програмування з використанням первинних мов, розробники програмного забезпечення створили нове покоління програмних продуктів, що легко піддається вивченню і використанню непрограмістами для створення власних комп'ютерних моделей. Ці програми сприймаються як програмні набори для побудови авторизованих досить професійних імітаційних моделей за помірні кошти та нетривалий час фахівцями з мінімальним досвідом програмування. Дружній інтерфейс дозволяє користувачам будувати моделі різної складності, користуючись знайомими операторами і математичною логікою на відокремому від синтаксису і програмній логіці, що притаманні традиційним мовам програмування. Вони також вміщують шаблони для побудови графіків і діаграм, анімації, статистичного аналізу, презентацій, що користувач може з легкістю вмонтовувати у свої моделі.

Доступні зараз програмні засоби імітаційного моделювання умовно поділяються на три види: програми матричних листів, пакети редагування рівнянь і пакети динамічної імітації.

Програми матричних листів, такі як Excel[®], Quattro[®] і Lotus[®], доступні на протязі тривалого часу і мають дуже близькі властивості і можливості. Не зважаючи на те, що спочатку вони розроблялись як електронні таблиці для проведення фінансового аналізу, потім до них були введені досить потужні математичні засоби, що дозволили користувачам застосовувати ці засоби для імітації явищ широкого спектру. Можна сказати, що матричні листи дозволяють працювати з числами як редактори текстів дозволяють працювати зі словами.

Робоче поле у матричному листі має вигляд таблиці, що складається зі стовбців, помічених літерами, і строк, помічених числами. Перетин стовпця зі строчкою сприймається як вічко, що має адресу, складену з поміток стовпця і строки. Користувач може обрати курсором належне вічко щоб ввести до нього текст, число, функцію чи логічний вираз із вбудованої бібліотеки або власне рівняння. При цьому можливі посилання на вміст інших вічок за їх адресами. Власні рівняння заносять до вічок друкуючи на екрані стандартні математичні символи з посиланням, у свою чергу, на константи, змінні, функції або власні рівняння, що знаходяться у інших вічках за їх адресою. Зв'язки між вічками є «живими», тобто зміна вмісту будь-якого вічка негайно викликає зміну вмістів інших вічок, що мають посилання на нього, а також зміну графіків, що утворені з вказаних вічок.

Програми матричних листів вміщують широкий спектр вбудованих математичних, статистичних та логічних функцій, що можуть заноситися до вічок з використанням звичайних математичних позначок. Вони також вміщують меню команд для активізації процедур зберігання, форматування і сортування даних, креслення графіків, виконання розв'язків рівнянь, аналізу даних, апроксимації кривими, експорту або імпорту даних тощо. На додаток,

вони включають схожу на англійську мову, що просунуті користувачі можуть застосовувати для введення функцій-макросів спеціального призначення.

Специфічною рисою Excel[®] є те, що він має вбудований набір розвинутих засобів малювання для користувачів, які мають намір створити якісні графічні об'єкти на робочому полі. Програми матричних листів, таких як Excel[®] є відносно дешевими, легкими для вивчення і користування, а також дуже швидкими і потужними для алгебричних операцій.

Засоби MathCad[®]. Слід зазначити, що можливості програм матричних листів обмежені їх неспроможністю повністю або частково підтримувати внутрішню однорідність розмірностей, забезпечувати символічні перетворення або такі числові процедури, як диференціювання і інтегрування, використовувати математичні функції комплексних змінних, гама-функції, скінченно-різницевої схеми тощо. Декілька програмних пакетів редагування рівнянь з потужними математичними можливостями стали доступними на протязі останніх двох декад. На теперішній час найбільшого поширення набули такі пакети як MathCad[®], Mathematica[®], MATLAB[®] і TK Solver[®]. Вони дозволяють працювати з рівняннями так, як програми матричних листів працюють з числами, а текстові редактори зі словами. Найбільш ефективним пакетом визнаний пакет Mathcad[®].

MathCad[®] створений таким, що дозволяє аналізувати рівняння числовими або символічними засобами. Щоб створити імітаційну модель у середовищі MathCad[®], треба спочатку на верхівці робочого листа декларувати константи і змінні, а нижче написати рівняння, що їх поєднують. Рівняння вводять до листа у такому самому вигляді, як вони друкуються у книгах, з невідомими величинами з лівої сторони і з відомими змінними з правої сторони рівняння. Усі числові або символічні операції на робочому листі автоматично виконуються починаючи з його верха і закінчуючи низом. Усі змінні у лівих частинах рівнянь мають бути визначені, тобто мати певні величини, вище за розташуванням на листі. MathCad[®] має вбудовані засоби для розрахунків і операцій з дійсними та комплексними числами, функціями, матрицями, виконання ітерацій. Він також обладнаний просунутими засобами векторної графіки, анімації, апроксимації, інтерполяції, числового інтегрування систем диференціальних рівнянь. В ньому не передбачена можливість створення рисунків (як це зроблено в Excel[®]), але користувач може імпортувати графічні об'єкти інших програм. Крім того, MathCad[®] дозволяє створювати листи Excel[®] або обмінюватися даними з листами Excel[®].

На відміну від інших програмних пакетів MathCad[®] має кілька унікальних властивостей. Математичні позначення і рівняння відображуються на робочому листі у загальноприйнятому символічному вигляді і є «живими» – кожна зміна, що вноситься до констант або змінних, розташованих вище рівняння, миттєво враховується в результатах рівняння, а також у результатах рівнянь і графіків, що пов'язані з ними. Mathcad[®] не потребує спеціальних кодів або синтаксису для побудови моделей, що включають елементарну алгебру і основні математичні об'єкти. Треба також зазначити, що він споряджений розвинутим довідником щодо його можливостей.

2 СТАТИСТИЧНІ МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ І ПРОГНОЗУВАННЯ СТАНУ ДОВКІЛЛЯ

У широкому розумінні статистичне моделювання має давати відповіді на такі запитання.

1. Чи є детерміновані зв'язки, які називають *трендами*, між величинами за даними їх спостережень, що складають *вибірку*?
2. Яка структура цих зв'язків (трендів), а саме: що, від чого і яким чином залежить?
3. Як найліпше визначити параметри ідентифікованих трендів, щоб відокремити тренди від прояву випадкових факторів, який називають *шумом*?
4. Які характеристики має шум, як він впливає на точність визначення параметрів і надання прогнозів?

Процедури, що застосовуються у пошуку відповіді на перші два запитання, складають етап *ідентифікації статистичної моделі*. Пошук відповіді на останні два запитання складається з процедур етапу *настройки статистичної моделі*.

Слід зазначити, що не кожні дані спостережень дають вибірки, що пристосовані для використання статистичного метода. Існують спеціальні рекомендації стосовно методів планування і проведення спостережень, що забезпечують бажану якість отриманих даних. Ці методи складають зміст *вибіркового метода спостережень* і мають розглядатися в дисципліні «Екологічний моніторинг». Надалі будемо вважати, що маємо дані спостережень у вигляді якісних (репрезентативних) вибірок.

Певною обмеженістю статистичного аналізу даних є те, що досить часто важко передбачити, який саме математичний вигляд має зв'язок між величинами (тренд), тому пошук доводиться проводити методом *спроб і помилок*. Згідно цьому методу пошук трендів виконують ітеративно, а саме: по черзі формулюють різні гіпотези (випробування) щодо можливого виду тренда і перевіряють їх статистичну значимість за певним критерієм (*критерій селекції*).

Гіпотезу відкидають як помилкову, якщо критерій не виконано, і приймають у протилежному випадку. Але це не гарантує, що достовірне рішення буде прийняте, тому що треба мати на увазі можливість (ризик) помилок двох родів. *Ризик помилки першого роду* є ймовірність відкинути гіпотезу у випадку, якщо вона насправді є правильною, а *ризик помилки другого роду* є ймовірність прийняти гіпотезу у разі, коли вона є помилковою.

Безпосередній розгляд даних спостережень дозволяє виявити певні залежності лише при досить малих розмірах вибірки. Справа у тому, що числа є лише символами кількісних співвідношень між змінними і значно гірше сприймаються свідомістю ніж образи. Тому продуктивним засобом пошуку залежностей, що можуть бути сховані у даних, є візуалізація даних.

Засоби візуалізації даних спостережень. Дані спостережень різних фізичних величин, що є змінними інженерно-екологічних систем довкілля, складають інформативну базу для побудови математичних моделей або їх пристосування до специфічних умов середовища. Щоб сприяти спробам вияву можливих зв'язків між змінними застосовують різні засоби візуалізації рядів даних спостережень. Найпростішим, але дуже корисним засобом візуалізації вибірки вимірювань

$$(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n), \dots, (x_N, y_N) \quad (2.1)$$

двох фізичних величин x і y є побудова графіка (діаграми) розсіяння цих даних у прямокутній системі координат (див. приклад на рис. 1).

Із графіка на рисунку 1 вже можна углядіти, що між двома фізичними величинами, які надані вибіркою спостережень з розміром N , існує зв'язок. Він маскується випадковими збуреннями. Щоб зменшити вплив випадкових збурень та краще візуалізувати зв'язок застосовують різні методи згладжування (усереднення) даних.

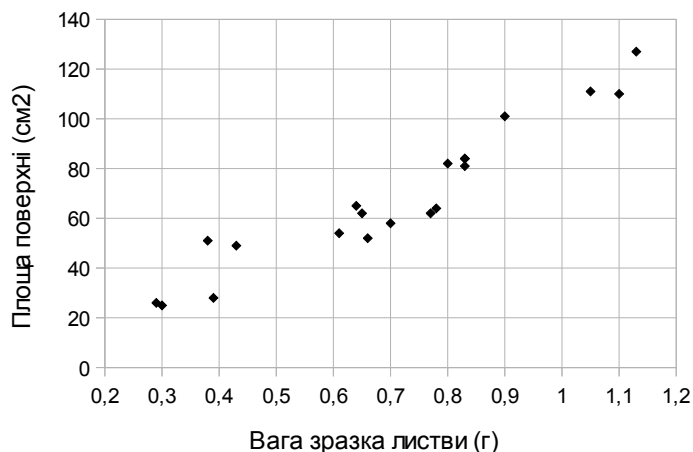


Рисунок 2.1 – Графік розсіяння величин x і y (за даними табл. 2.1)

Таблиця 2.1 – Дані вимірювань ваги (г) і площі поверхні (см²) зразків листви у вибірці

x_i , г	0,29	0,3	0,38	0,39	0,43	0,61	0,64	0,65	0,66	0,7
y_i , см ²	26	25	51	28	49	54	65	62	52	58
x_i , г	0,77	0,78	0,8	0,83	0,83	0,83	0,9	1,05	1,1	1,13
y_i , см ²	62	64	82	84	84	81	101	111	110	127

Згладжування методом ковзаючого середнього. Для застосування цього методу спочатку потрібно шляхом перестановки перетворити вибірку (2.1) цих спостережень на варіаційний ряд

$$(\tilde{x}_1, \tilde{y}_1), (\tilde{x}_2, \tilde{y}_2), \dots, (\tilde{x}_n, \tilde{y}_n), \dots, (\tilde{x}_N, \tilde{y}_N), \quad (2.2)$$

у якому дані вимірювань якоїсь величини (наприклад, x) розташовані у порядку зростання

$$\tilde{x}_1 \leq \tilde{x}_2 \leq \dots \leq \tilde{x}_n \leq \dots \leq \tilde{x}_N. \quad (2.3)$$

Далі визначають ширину k вікна осереднення, яка має бути цілим числом не менше ніж 2, після чого розраховують усереднені величини вимірювань за формулами:

$$\hat{x}_i = \frac{1}{k} \sum_{n=i}^{k+i-1} \tilde{x}_n ; \quad (2.4)$$

$$\hat{y}_i = \frac{1}{k} \sum_{n=i}^{k+i-1} \tilde{y}_n ; \quad (2.5)$$

$$i = 1, 2, \dots, N - k + 1. \quad (2.6)$$

Вибірку усереднених даних (2.4) і (2.5) зображують на графіку розсіяння, можливо, разом з вибіркою первинних даних (2.1) (рис. 2.2).

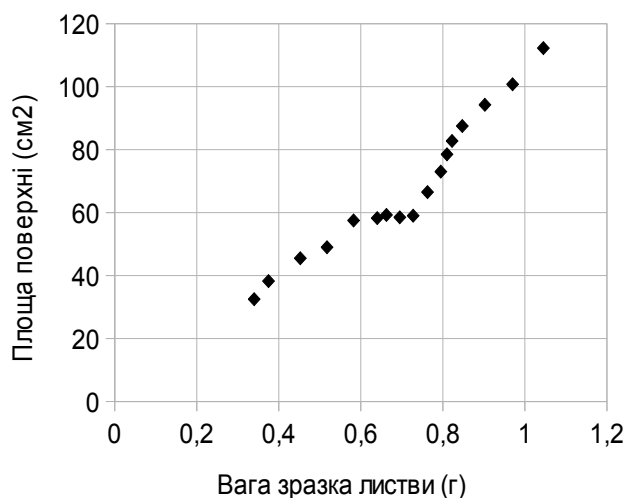


Рисунок 2.2 – Згладжування даних ковзаючим середнім з шириною вікна $k = 4$ (за даними табл. 2.2)

Таблиця 2.2 – Ковзаючі середні даних таблиці 2.1 ($k=4$)

$\hat{x}_i, \text{г}$	–	–	–	0,34	0,375	0,453	0,518	0,583	0,64	0,663
$\hat{y}_i, \text{см}^2$	–	–	–	32,5	38,25	45,5	49	57,5	58,25	59,25
$\tilde{x}_i, \text{г}$	0,695	0,728	0,763	0,795	0,81	0,823	0,848	0,903	0,97	1,045
$\tilde{y}_i, \text{см}^2$	58,5	59	66,5	73	78,5	82,75	87,5	94,25	100,8	112,3

Згладжування методом експонентного усереднення. Щоб згладити дані цим методом треба також спочатку утворити варіаційний ряд (2.2) і вибрати величину параметра усереднення $0 < \mu < 1$. Експонентне усереднення виконується за формулами

$$\hat{x}_i = (1 - \mu) \sum_{n=i}^1 \mu^{i-n} \tilde{x}_n ; \quad (2.7)$$

$$\hat{y}_i = (1 - \mu) \sum_{n=i}^1 \mu^{i-n} \tilde{y}_n ; \quad (2.8)$$

$$i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.9)$$

Вибірку усереднених даних також відображують на графіку разом з первинними даними (рис. 2.3).

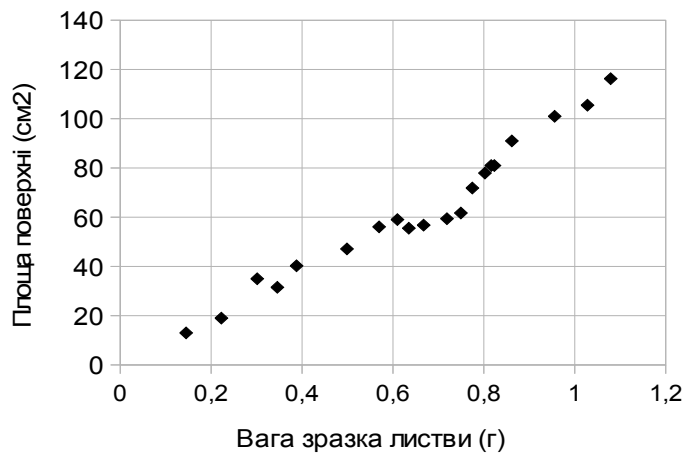


Рисунок 2.3 – Згладжування даних експонентним усередненням (дані з табл. 2, $\mu = 0,5$)

Таблиця 2.3 – Експонентні середні даних таблиці 1 ($\mu = 0,5$)

\hat{x}_i , г	0,145	0,223	0,301	0,346	0,388	0,499	0,569	0,610	0,635	0,667
\hat{y}_i , см ²	13,0	19,0	35,0	31,5	40,3	47,1	56,1	59,0	55,5	56,8
\tilde{x}_i , г	0,719	0,749	0,775	0,802	0,816	0,823	0,862	0,956	1,028	1,079
\tilde{y}_i , см ²	59,4	61,7	71,8	77,9	81,0	81,0	91,0	101,0	105,5	116,2

Згладжування методом медіанного усереднення. Для згладжування варіаційного ряду (2.2) за медіанним усередненням треба задатися шириною вікна згладжування, що має бути непарним додатнім числом більше 1, тобто $k = 3$ або 5, або 7 і так далі.

Розрахунок середніх величин виконується за формулами

$$\hat{x}_i = \text{медіана ряду: } \tilde{x}_i, \tilde{x}_{i+1}, \dots, \tilde{x}_{i+k-1}; \quad (2.10)$$

$$\hat{y}_i = \text{медіана ряду: } \tilde{y}_i, \tilde{y}_{i+1}, \dots, \tilde{y}_{i+k-1}; \quad (2.11)$$

$$i = 1, 2, \dots, N - k + 1. \quad (2.12)$$

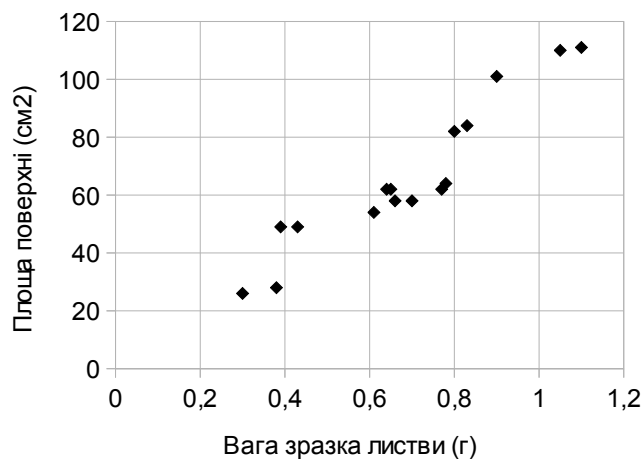


Рисунок 2.4 – Згладжування даних медіанним усередненням з шириною вікна $k = 3$ (за даними табл. 2.4)

Таблиця 2.4 - Середні даних таблиці 1 за медіаною ($k = 3$)

\hat{x}_i, Γ	–	–	0,3	0,38	0,39	0,43	0,61	0,64	0,65	0,66
$\hat{y}_i, \text{см}^2$	–	–	26	28	49	49	54	62	62	58
\hat{x}_i, Γ	0,7	0,77	0,78	0,8	0,83	0,83	0,83	0,9	1,05	1,1
$\hat{y}_i, \text{см}^2$	58	62	64	82	84	84	84	101	110	111

З розгляду згладжених даних виявляється доцільним пошук зв'язку між величинами x і y у вигляді лінійної залежності

$$y = bx. \quad (2.13)$$

2.1 Регресійні моделі параметрів стану систем довкілля

Коли виникає питання щодо наявності певного статистичного зв'язку між двома фізичними величинами X і Y , які визначені вибірками даних спостережень (2.1), у якості критерію селекції використовують вибірковий коефіцієнт кореляції $K_{x,y}$, що розраховують за формулами

$$K_{x,y} = \frac{1}{(n-1)S_x S_y} \sum_{i=1}^n (x_n - \bar{x})(y_n - \bar{y}) = \frac{n}{n-1} \cdot \frac{\overline{xy} - \bar{x} \cdot \bar{y}}{S_x S_y}$$

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i; \quad \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i; \quad \overline{xy} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i y_i;$$

$$S_x = \sqrt{D_x} = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_n - \bar{x})^2}; \quad S_y = \sqrt{D_y} = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_n - \bar{y})^2},$$

де \bar{x} – вибіркове середнє вимірювань величини X ;

\bar{y} – вибіркове середнє вимірювань величини Y ;

\overline{xy} – вибіркочий середній добуток величин X і Y ;

D_x – вибіркова дисперсія вимірювань величини X ;

D_y – вибіркова дисперсія вимірювань величини Y ;

S_x – вибіркоче стандартне (середньоквадратичне) відхилення вимірювань величини X ;

S_y – вибіркоче стандартне (середньоквадратичне) відхилення вимірювань величини Y ;

n – розмір вибірки.

Вибірковий коефіцієнт кореляції завжди має величину у межах $-1 \leq K_{x,y} \leq 1$. Якщо розрахункова величина $K_{x,y}$ задовольняє умові

$$|K_{x,y}| \geq \frac{2}{\sqrt{n-3}},$$

то вважають, що вибірка даних спостережень виявляє тренд між величинами X і Y з вірогідністю 95%. У протилежному випадку, вважається, що або вибірка даних не виявляє статистичний зв'язок величин або розмір вибірки замалий для цього.

Лінійна регресійна модель $y = \theta + e$. Відсутність певного статистичного зв'язку фізичних величин Y і X приводить до висновку, що фізична величина y має певне стале значення θ , а відхилення e її вимірів від сталої величини викликані впливом випадкових факторів. У цьому випадку розглядають найпростішу лінійну за величиною θ модель статистичної залежності (регресії) величини y , що має такий вигляд:

$$y = \theta + e. \quad (2.14)$$

Настройка моделі (2.14) полягає у визначенні величини θ , яку називають **параметром регресії**, і характеристик шуму e .

Для настрійки моделі застосовують **метод найменших квадратів** (МНК), згідно з яким параметр регресії θ має бути обраний таким, щоб сума квадратів залишків регресії (залишкова сума квадратів – ЗСК) була мінімальною.

$$ЗСК(\hat{\theta}) = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\theta})^2.$$

У формулі (2.14) $e_i = y_i - \hat{\theta}$ є залишок регресії для вимірювання величини y з порядковим номером i ; $\hat{\theta}$ – оцінка величини θ параметра регресії, що обирається. Оцінку $\hat{\theta}$ параметра регресії знаходять з рівняння:

$$\frac{\partial}{\partial \hat{\theta}} ЗСК(\hat{\theta}) = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\theta}) = -2 \left(\sum_{i=1}^n y_n - n \hat{\theta} \right) = 0,$$

Із якого випливає для розрахунку величини $\hat{\theta}$:

$$\hat{\theta} = \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_n. \quad (2.15)$$

Крім того, маємо рівняння для розрахунку величин залишків регресії

$$e_i = y_i - \hat{\theta} = y_i - \bar{y},$$

а також залишкової суми квадратів через вибірккову дисперсію або вибірккове стандартне відхилення вимірювань величини y :

$$ЗСК(\hat{\theta}) = (n-1)D_y = (n-1)S_y^2.$$

Вибіркова дисперсія і вибірккове стандартне відхилення вимірювань величини y є також вибірковою дисперсією і вибіркковим стандартним відхиленням залишків регресії

$$D_e = D_y, S_e = S_y,$$

що є статистичними характеристиками шуму.

Оцінку $\hat{\theta}$ величини параметра регресії θ знаходимо за формулою (2.15) через вимірювання величини y , що містять вплив випадкових факторів. Тому величина $\hat{\theta}$ теж є випадковою і буде відрізнятися від дійсної величини θ параметру регресії. Величину можливих відхилень θ показують за допомогою довірчого інтервалу. Для цього спочатку обирають ризик помилки першого

роду α (найчастіше $\alpha = 0,05$), потім за статистичними таблицями або через відповідну функцію в Excel® знаходять величину $t_{v,\alpha/2}$ зворотного розподілу Стьюдента, що відповідає ймовірності $\alpha/2$ і числу степенів свободи $v = n - 1$.

Довірчий інтервал для параметра регресії θ визначається так:

$$\hat{\theta} - \frac{S_e}{\sqrt{n}} t_{n-1;\alpha/2} < \theta < \hat{\theta} + \frac{S_e}{\sqrt{n}} t_{n-1;\alpha/2}.$$

Лінійна регресійна модель $y = \theta x + e$. У випадку, коли очікується лінійна залежність $y = \theta x$ величини y від величини x , розглядають лінійну модель регресії величини, що має вигляд

$$y = \theta x + e. \quad (2.16)$$

Настройка моделі (2.16) полягає у визначенні величини параметра регресії θ і характеристик шуму e . Для настройки моделі також застосовують метод найменших квадратів, згідно з яким параметр регресії θ має бути обраний так, щоб сума квадратів залишків регресії (залишкова сума квадратів – ЗСК) була мінімальною.

$$ЗСК(\hat{\theta}) = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\theta} x_i)^2$$

У наведеній формулі $e_i = y_i - \hat{\theta} x$ є залишок регресії для вимірювання величини y з порядковим номером i ; $\hat{\theta}$ - оцінка параметра регресії, що обирається. Оцінку $\hat{\theta}$ параметра регресії знаходять з умови

$$\frac{\partial}{\partial \hat{\theta}} ЗСК(\hat{\theta}) = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\theta} x_i) x_i = 0,$$

із якої випливає рівняння для розрахунку величини $\hat{\theta}$:

$$\hat{\theta} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i}{\sum_{i=1}^n x_i^2}. \quad (2.17)$$

Крім того, маємо співвідношення для розрахунку величин залишків регресії $e_i = y_i - \hat{\theta} x_i$, а також для залишкової суми квадратів через вибірккову дисперсію або вибірккове стандартне відхилення залишків регресії:

$$ЗСК(\hat{\theta}) = (n - 1) D_e = (n - 1) S_e^2.$$

Вибіркова дисперсія D_e і вибірккове стандартне відхилення S_e залишків регресії є статистичними характеристиками шуму.

Оцінка $\hat{\theta}$ параметра регресії теж є випадковою і буде відрізнятися від дійсної величини θ параметру регресії. Величину можливих відхилень θ також показують через довірчий інтервал. Для цього спочатку обирають ризик помилки першого роду α (найчастіше $\alpha = 0,05$), потім за статистичними таблицями або через відповідну функцію в Excel® знаходять величину $t_{v,\alpha/2}$ оберненого розподілу Стьюдента, що відповідає ймовірності $\alpha/2$ і числу степенів свободи $v = n - 1$.

Довірчий інтервал для параметра регресії θ визначається так:

$$\hat{\theta} - \frac{S_e}{\sqrt{\sum_i x_i^2}} t_{n-1; \alpha/2} < \theta < \hat{\theta} + \frac{S_e}{\sqrt{\sum_i x_i^2}} t_{n-1; \alpha/2}. \quad (2.18)$$

Лінійна регресійна модель $y = \theta_0 + \theta_1 x + e$. У випадку, коли очікується лінійна залежність $y = \theta_0 + \theta_1 x$ величини y від величини x , розглядають лінійну модель регресії, що має вигляд

$$y = \theta_0 + \theta_1 x + e.$$

Визначення оцінок $\hat{\theta}_0$, $\hat{\theta}_1$ параметрів регресії θ_0 , θ_1 виконується методом найменших квадратів:

$$ЗСК(\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1) = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\theta}_0 - \hat{\theta}_1 x_i)^2 = \min,$$

де $e_i = y_i - \hat{\theta}_0 - \hat{\theta}_1 x_i$ є залишок регресії для вимірювання величини y з порядковим номером i .

Оцінки параметрів регресії знаходять з системи двох рівнянь

$$\frac{\partial}{\partial \hat{\theta}_0} ЗСК(\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1) = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\theta}_0 - \hat{\theta}_1 x_i) = 0;$$

$$\frac{\partial}{\partial \hat{\theta}_1} ЗСК(\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1) = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\theta}_0 - \hat{\theta}_1 x_i) x_i = 0,$$

що визначаються формулами:

$$\hat{\theta}_0 = \bar{y} - \hat{\theta}_1 \bar{x}; \quad \hat{\theta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2},$$

де \bar{x} і \bar{y} є вибірковими середніми вимірювань.

Як і раніше, дійсні величини θ_0 , θ_1 регресійних параметрів не збігаються з їх випадковими оцінками $\hat{\theta}_0$, $\hat{\theta}_1$. Тому для завершення регресійного аналізу треба указати в декартовій системі координат (θ_0, θ_1) **довірчу область**, де можуть знаходитися дійсні величини регресійних параметрів з вірогідністю $P=1-\alpha$. Ця область в координатах (θ_0, θ_1) обмежена еліпсом, який визначається рівнянням

$$n(\theta_0 - \hat{\theta}_0)^2 + 2 \left(\sum_i x_i \right) (\theta_0 - \hat{\theta}_0)(\theta_1 - \hat{\theta}_1) + \left(\sum_i x_i^2 \right) (\theta_1 - \hat{\theta}_1)^2 = 2S_e^2 F_{2; n-2; \alpha},$$

де $F_{2; n-2; \alpha}$ – величина F статистики з $\nu_1 = 2$ і $\nu_2 = n - 2$ степенями свободи, що знаходять в статистичних таблицях або за відповідною функцією в пакети Excel®.

Довірчий інтервал для величини \hat{y} , що слід очікувати, якщо незалежна змінна набуде довільну величину $x = \hat{x}$, визначається за формулою:

$$\hat{y} = \hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 \hat{x} \pm t_{n-1; \alpha/2} S_e \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(\hat{x} - \bar{x})^2}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}}. \quad (2.19)$$

Крім того, довірчий інтервал для величини y , що вона може прийняти, якщо незалежна змінна прийме довільну величину $x = \hat{x}$, визначається за формулою:

$$y = \hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 \hat{x} \pm t_{n-1; \alpha/2} S_e \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(\hat{x} - \bar{x})^2}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}}. \quad (2.20)$$

У формулах знак «+» перед t статистикою вибирається для верхньої границі довірчого інтервалу, а знак «-» – для його нижньої межі.

Приклад. За даними вимірів зросту y_i і ваги x_i кожної особи з довільної вибірки 20 людей, що наведені у таблиці 2.5, спробуємо визначити залежність між цими величинами.

Таблиця 2.5 – Вага і зріст у вибірці людей

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$x_i, \text{см}$	155	156	157	157	158	160	161	163	163	164
$y_i, \text{кг}$	52	58	61	53	65	52	68	54	62	54
i	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
$x_i, \text{см}$	167	170	175	175	177	182	184	185	188	189
$y_i, \text{кг}$	70	67	83	68	70	83	76	95	82	94

Як це прийнято, регресійний аналіз починаємо з побудови графіку (рис. 2.5) розподілу результатів вимірів на площині $(x; y)$. З рисунку 2.5 зрозуміло, що точки даних вимірювань утворюють розтягнуту «хмаринку» з нахилом до осі абсцис. Тому можна сподіватися, що між фізичними величинами існує регресійна залежність. Кореляційний аналіз, тобто розрахунок коефіцієнта кореляції та визначення, що його величина перевищує критичну величину:

$$K_{x,y} = 0,8802 > \frac{2}{\sqrt{n-3}} = 0,4851;$$

зміцнює ці сподівання.

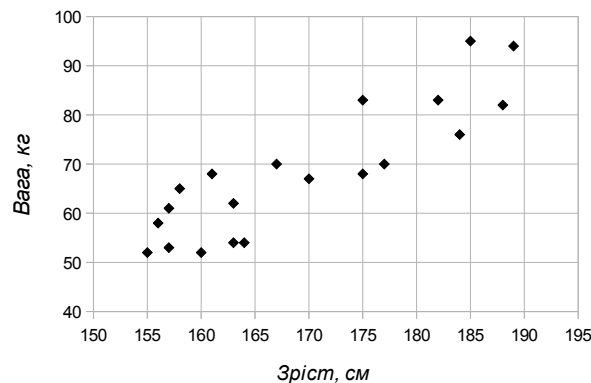


Рисунок 2.5 – Графік розподілу даних вимірювань за таблицею 2.5

Розраховуємо оцінку $\hat{\theta}_1$ величини регресійного параметра θ_1 :

$$\hat{\theta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} = \frac{2616,9}{2566,2} = 1,02 \frac{\text{кг}}{\text{см}}.$$

Далі розраховуємо оцінку величини іншого регресійного параметра:

$$\hat{\theta}_0 = \bar{y} - \hat{\theta}_1 \bar{x} = 68,35 - 1,02 \cdot 169,3 = -104,3 \text{ кг}.$$

Розраховуємо параметри еліпсу довірчої області:

$$n = 20; 2\sum_i x_i = 6772 \text{ см}; \sum_i x_i^2 = 575800 \text{ см}^2;$$

$$S_e^2 = 40,84 \text{ кг}^2; F_{2;18;0,05} = 3,555.$$

Визначаємо довірчу область, де з ймовірністю 0,95 можуть знаходитися дійсні величини регресійних параметрів:

$$20(\theta_0 + 104,3)^2 + 2734(\theta_0 + 104,3)(\theta_1 - 1,02) + 96870(\theta_1 - 1,02)^2 \leq 290,4 \text{ кг}^2.$$

Формули (2.19), (2.20) пристосовуємо для розрахунку границь довірчих інтервалів:

$$\hat{y} = \hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 \hat{x} \pm t_{n-1;\alpha/2} S_e \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(\hat{x} - \bar{x})^2}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}} = -104,3 + 1,02 \cdot \hat{x} \pm 2,093 \cdot 6,391 \cdot \sqrt{0,05 + \frac{(\hat{x} - 169,3)^2}{2566}};$$

$$y = \hat{\theta}_0 + \hat{\theta}_1 \hat{x} \pm t_{n-1;\alpha/2} S_e \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(\hat{x} - \bar{x})^2}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}} = -104,3 + 1,02 \cdot \hat{x} \pm 2,093 \cdot 6,391 \cdot \sqrt{1,05 + \frac{(\hat{x} - 169,3)^2}{2556}}.$$

Завершити регресійний аналіз доцільно побудовою лінії регресії $y(x) = -104,3 + 1,02 \cdot x$ і меж довірчих інтервалів.

На графіку (рис. 2.6) штрихованими лініями обмежена довірча область, де має проходити лінія регресії за точно визначеними параметрами регресії. Пунктирні лінії є межами довірчої області, що містить можливі відхилення ваги від величини, яка може бути розрахована за допомогою регресійної моделі по відомому зрості. Так, наприклад, якщо навмання обрана людина має зріст 172 см, то її вага може коливатися у межах від 57 кг до 84 кг. У той же час середня вага людей, що мають такий зріст знаходиться у межах від 68 кг до 74 кг. Звичайно, ці оцінки не охоплюють виняткові явища екстремально великих відхилень, що можуть мати місце у випадках ожиріння або дистрофії.

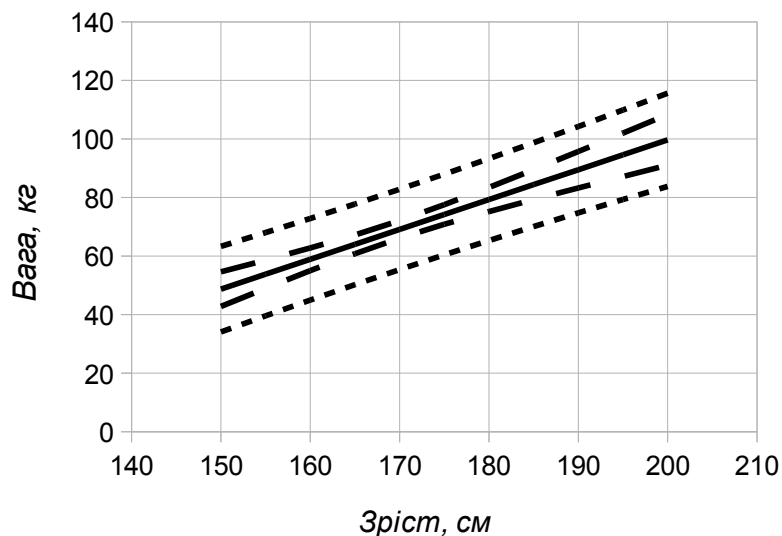


Рисунок 2.6 – Лінія регресії (суцільна) разом з границями довірчих інтервалів (2.19) (штриховані лінії) і (2.20) (пунктирні лінії)

2.2 Моделі Монте-Карло

Моделі Монте-Карло застосовують для обчислювання розподілів ймовірностей виходів детермінованої системи за відомими розподілами ймовірностей її входів із залученням послідовностей випадкових чисел, що утворюються спеціальними генераторами випадкових чисел. Для прикладу розглянемо модель рівноважного стану біореактора-змішувача с закріпленою біомасою активного мулу, що зв'язує вміст речовини-субстрата на виході реактора $P_{вих}$ з її вмістом P_{cm} на вході:

$$P_{вих} = \frac{P_{cm}}{1 + k_1 \tau}, \quad (2.21)$$

де k_1 – коефіцієнт швидкості реакції біохімічного окислення;

τ – час утримання стічної води в біореакторі.

Зрозуміло, що абсолютно сталий режим роботи очисної споруди не може бути практично реалізованим. У дійсності різні фактори, наприклад, температура, рН, витрата стічної води, вміст забруднюючої речовини на вході біореактора, повільно коливаються навколо певних сталих величин, що викликає відповідні коливання вмісту забруднюючої речовини на виході з біореактора. Модель Монте-Карло дозволяє дослідити статистичні характеристики виходу такої системи, якщо відомі статистичні характеристики її входу.

Для простоти припустимо, що відомі лише межі

$$P_{\min} \leq P_{cm} \leq P_{\max}; \quad B_{\min} \leq B \leq B_{\max}; \\ k_{\min} \leq k_2 \leq k_{\max}; \quad \tau_{\min} \leq \tau \leq \tau_{\max},$$

у яких відбуваються коливання величин, від яких залежить інтенсивність процесу очистки. Тоді модель Монте-Карло нестационарного процесу очистки стічної води може бути реалізована наступним алгоритмом.

За допомогою генератора випадкових чисел, тобто спеціальної функції, наприклад, з бібліотеки пакету Excel[®], розраховують чотири випадкових числа P_r , B_r , k_r , τ_r , кожне з яких має рівномірний розподіл в інтервалі зміни відповідної фізичної величини. Далі, за формулою (2.21)

$$p_r = \frac{P_r}{1 + B_r k_r \tau_r}$$

розраховують випадкову величину p_r вмісту забруднюючої речовини на виході. Таку генерацію випадкових чисел і обчислювань вмісту забруднюючої величини на виході з біореактора повторюють досить велику кількість разів (не менше $R = 1000$), отримуючи внаслідок вибірку p_1, p_2, \dots, p_R величин вмісту забруднюючої речовини на виході з біореактора, що імітують нестационарний процес очистки стічної води. Отриману вибірку аналізують, наприклад, засобами найпростішої моделі регресії.

Також корисним методом аналізу отриманих результатів є побудова *емпіричної функції розподілу* $F(p)$ або *графіка частот розподілу* величини p . Звичайно, такий алгоритм вимагає проведення багатьох обчислень, тому краще їх робити засобами програмування алгоритму розрахунків.

Для побудови емпіричної функції розподілу $F(p)$ з вибірки p_r утворюють *варіаційний ряд* \tilde{p}_r , тобто ряд, в якому складові вибірки p_r розташовані у порядку зростання їх величин: $\tilde{p}_1 \leq \tilde{p}_2 \leq \dots \tilde{p}_R$. Величина емпіричної функції розподілу $F(\tilde{p}_r)$, що відповідає члену варіаційного ряду з порядковим номером r визначається рівнянням:

$$F(\tilde{p}_r) = \frac{r}{R+1}.$$

Взагалі, *функція розподілу* $F(\xi)$ довільної випадкової числової величини ξ визначає ймовірність $\Pi = F(a)$, з якою випадкова величина приймає значення в інтервалі $\xi \leq a$. Для побудови графіка частот розподілу величини p інтервал $\Delta P = \tilde{p}_R - \tilde{p}_1$ поділяють на кілька рівних за величиною сегментів $\Delta p_1, \Delta p_2, \dots \Delta p_k$ так, щоб на кожний сегмент припадало в середньому не менше 10 членів варіаційного ряду. Для кожного сегмента з порядковим номером k визначають кількість n_k членів варіаційного ряду, які за величиною дійсно потрапляють у сегмент Δp_k . Величини частот $v_k = n_k/R$ наводять у вигляді, наприклад, стовбчастої діаграми. Стовбчасту діаграму розподілу частот будь-якої величини за інтервалами її можливих значень також називають *гістограмою*.

Приклад. Розглянемо систему очисної споруди, що має такі параметри

$$\begin{aligned} 70 \text{ мг/дм}^3 &\leq P_{cm} \leq 130 \text{ мг/дм}^3; \\ 20\,000 \text{ мг/дм}^3 &\leq B \leq 40\,000 \text{ мг/дм}^3; \\ 8 \cdot 10^{-5} \text{ дм}^3/\text{мг} \cdot \text{добу} &\leq k_2 \leq 12 \cdot 10^{-5} \text{ дм}^3/\text{мг} \cdot \text{добу}; \\ 1,8 \text{ доби} &\leq \tau \leq 2,2 \text{ доби}. \end{aligned}$$

За допомогою генератора випадкових чисел (наприклад, *Randbetween* з бібліотеки Excel[®]) можна скласти в середовищі Excel[®] просту програму, що реалізує алгоритм моделі Монте-Карло, і провести необхідні розрахунки. При цьому тисяча ітерацій $R = 1000$ забезпечать достатньо великий розмір вибірки для статистичного аналізу. Визначаємо:

- середній вміст забруднюючої речовини на виході з біореактора: $\bar{p} = 15,0 \text{ мг/дм}^3$;
- дисперсія вмісту речовини на виході: $D_p = 17,2 \text{ мг}^2/\text{дм}^6$;
- стандартне відхилення вмісту речовини на виході: $S_p = 4,15 \text{ мг/дм}^3$;
- мінімальний вміст речовини на виході: $p_{\min} = 6,71 \text{ мг/дм}^3$;
- максимальний вміст речовини на виході: $p_{\max} = 31,0 \text{ мг/дм}^3$.

Емпіричний розподіл ймовірностей $F(p)$ для вмісту p забруднюючої речовини на виході з біореактора показаний на рисунку 2.7, а діаграма розподілу частот (гістограма) вмісту речовини – на рисунку 2.8. Для побудови гістограми інтервал $(6,70 \text{ мг/дм}^3; 31,0 \text{ мг/дм}^3)$, що вміщує вибірку p_r вмісту забруднюючої речовини, поділено на 27 сегментів шириною $0,9 \text{ мг/дм}^3$.

За графіком на рисунку 2.7 можна, наприклад, визначити, що ймовірність виявити на виході з біореактора вміст забруднюючої речовини, який не перевищує величини 15 мг/дм^3 , дорівнює приблизно 0,55.

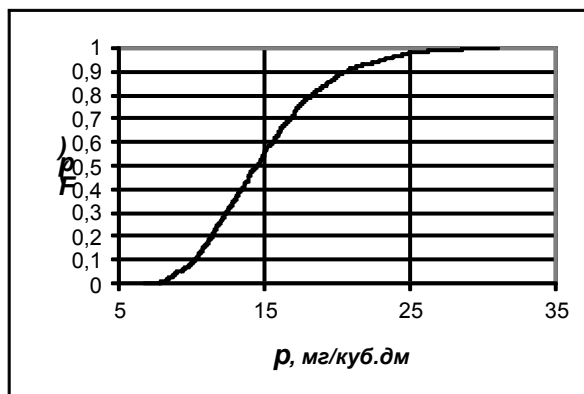


Рисунок 2.7 – Емпірична функція розподілу величини вмісту забруднюючої речовини на виході з біореактора



Рисунок 2.8 – Діаграма розподілу частот (гістограма) вмісту забруднюючої речовини на виході з біореактора.

2.3 Марковські моделі процесів у довкіллі

Моделювання динаміки систем довкілля, що спирається на моделі Маркова, виходить з наближення, в якому система складається з багатьох елементів, що розподілені по певному набору можливих станів s_1, s_2, \dots, s_m . Цей розподіл має відповідати таким вимогам:

- елемент системи обов'язково знаходиться в одному з станів, що належить набору;
- якщо елемент знаходиться у певному стані, то він не може одночасно перебувати у іншому стані;
- узагальненою характеристикою системи в момент часу t є розподіл кількості $n_i(t)$ елементів системи по станам s_i , так що повна кількість елементів системи в момент часу t визначається сумою:

$$\sum_i n_i(t) = N(t);$$

– динаміка системи визначається **коефіцієнтами переходу**, а саме: коефіцієнт переходу $T_{i,j}(\Delta t)$ визначає кількість $n_{i,j}(t + \Delta t)$ елементів системи, що утворюються у стані s_i за часовий інтервал Δt з елементів $n_j(t)$, що були в стані s_j на момент часу t , за формулою:

$$n_{i,j}(t + \Delta t) = T_{i,j}(\Delta t) \cdot n_j(t).$$

Загальна кількість $n_i(t + \Delta t)$ елементів у стані s_i на момент часу $t + \Delta t$ розраховується за формулою:

$$n_i(t + \Delta t) = \sum_j T_{i,j}(\Delta t) n_j(t). \quad (2.22)$$

З коефіцієнтів переходу можна утворити **матрицю переходу**, якщо розмістити їх так, щоб коефіцієнт $T_{i,j}(\Delta t)$ знаходився на перетині строки i зі стовбцем j . Матрицю переходу називають **стохастичною матрицею**, якщо виконується умова

$$\sum_i T_{i,j}(\Delta t) = 1.$$

У системах зі стохастичною динамікою залишається постійною у часі загальна кількість елементів, тому що

$$N(t + \Delta t) = \sum_i n_i(t + \Delta t) = \sum_i \left(\sum_j T_{i,j}(\Delta t) n_j(t) \right) = \sum_j \left(n_j(t) \sum_i T_{i,j}(\Delta t) \right) = \sum_j n_j(t) = N(t).$$

Рівняння (2.22) разом з визначеними величинами коефіцієнтів переходу, часовим інтервалом переходу Δt та початковим розподілом елементів системи по можливим їх станам $n_i(t = 0) = n_i(0)$ складають стохастичну модель Маркова. Вказаному рівнянню можна надати матричної форми, а саме:

$$\vec{n}(t + \Delta t) = T(\Delta t) \times \vec{n}(t),$$

де матриця переходу має вигляд:

$$T(\Delta t) = \begin{Bmatrix} T_{1,1}(\Delta t) & T_{1,2}(\Delta t) & \cdots & T_{1,m}(\Delta t) \\ T_{2,1}(\Delta t) & T_{2,2}(\Delta t) & \cdots & T_{2,m}(\Delta t) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ T_{m,1}(\Delta t) & T_{m,2}(\Delta t) & \cdots & T_{m,m}(\Delta t) \end{Bmatrix},$$

а розподіл елементів системи за можливими їх станами зображується вектор-стовпцями:

$$\vec{n}(t) = \begin{Bmatrix} n_1(t) \\ n_2(t) \\ \vdots \\ n_m(t) \end{Bmatrix}; \quad \vec{n}(t + \Delta t) = \begin{Bmatrix} n_1(t + \Delta t) \\ n_2(t + \Delta t) \\ \vdots \\ n_m(t + \Delta t) \end{Bmatrix}.$$

Сталим називають такий розподіл $n^{(cm)}(t)$ елементів, що не змінюється з часом:

$$\frac{n_i^{(cm)}(t)}{n_j^{(cm)}(t)} = const. \quad (2.23)$$

При цьому загальна кількість елементів системи може змінюватись. Таким чином, сталий розподіл елементів має задовольняти умову:

$$\lambda \vec{n}^{(cm)}(t + \Delta t) = T(\Delta t) \times \vec{n}^{(cm)}(t),$$

де λ є коефіцієнт розмноження.

Рівняння (2.23) означає, що λ має бути власним числом матриці переходу, а сталий розподіл є відповідним йому власним вектором матриці переходу. Відомо, що квадратна матриця має m власних чисел і m відповідних власних векторів. З плином часу система наблизиться до сталого розподілу, що відповідає найбільшому власному числу, незалежно від початкового розподілу її елементів.

Приклад. Розглянемо популяцію (систему) організмів (елементи системи), що розрізняються за віком (стани елементів). Позначимо через $n_1(t)$, $n_2(t)$, $n_3(t)$ кількість організмів першого, другого і третього року розвитку, відповідно. Будемо вважати репродуктивними лише організми другого і третього років розвитку. Кожен організм другого року розвитку народжує за рік в середньому 9, а третього року розвитку – 12 організмів першого року розвитку. Відповідно до цього визначаємо частки $T_{1,2}(1) = 9$, $T_{1,3}(1) = 12$. Крім того, третина організмів першого року розвитку за час $\Delta t = 1$ рік переходить (виживе) на другий рік розвитку, так що $T_{2,1}(1) = 1/3$, а з організмів другого року розвитку відповідна половина переходить на третій рік, так що $T_{3,2}(1) = 1/2$. Інші переходи для елементів в системі заборонені, тобто

$$T_{1,1}(1) = T_{2,2}(1) = T_{3,3}(1) = T_{2,3}(1) = T_{1,3}(1) = 0.$$

Відповідна матриця переходу має вигляд:

$$\hat{T}(\Delta t) = \begin{pmatrix} 0 & 9 & 12 \\ 1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}.$$

З наведених умов рівняння (2.23) мають вигляд:

$$n_1(t+1) = 9n_2(t) + 12n_3(t); \quad n_2(t+1) = \frac{1}{3}n_1(t); \quad n_3(t+1) = \frac{1}{2}n_2(t).$$

Саме таку модель розвитку самок вивчав М. Х. Уільямсон. Склавши ці три рівняння, отримаємо рівняння відносно загальної кількості організмів на момент часу t :

$$N(t+1) = \frac{1}{3}n_1(t) + 9\frac{1}{2}n_2(t) + 12n_3(t). \quad (2.24)$$

З цього рівняння можна побачити, що зміна загальної кількості організмів у часі залежить від розподілу організмів за віком.

Спробуємо з'ясувати, чи існує у популяції сталий розподіл організмів за віком, тобто розподіл, за яким кількість організмів кожного віку змінюється в однакову кількість λ разів через кожний рік:

$$n_1(t+1) = \lambda n_1(t); \quad n_2(t+1) = \lambda n_2(t); \quad n_3(t+1) = \lambda n_3(t).$$

За такими умовами рівняння моделі набувають вигляду

$$-\lambda n_1(t) + 9n_2(t) + 12n_3(t) = 0; \quad \frac{1}{3}n_1(t) - \lambda n_2(t) = 0; \quad \frac{1}{2}n_2(t) - \lambda n_3(t) = 0.$$

Ця система рівнянь має ненульове рішення тільки тоді, коли її детермінант дорівнює нулю:

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 9 & 12 \\ 1/3 & -\lambda & 0 \\ 0 & 1/2 & -\lambda \end{vmatrix} = -\lambda^3 + 3\lambda + 2 = -(\lambda - 2)(\lambda + 1)^2 = 0.$$

Детермінант має найбільший корінь $\lambda = 2$. За такою величиною λ з рівнянь знаходимо

$$n_2(t) = 4n_3(t); \quad n_1(t) = 24n_3(t),$$

де $n_3(t)$ може бути довільним цілим числом.

Тоді загальна кількість організмів у системі в момент часу t є такою:

$$N(t) = n_1(t) + n_2(t) + n_3(t) = 29n_3(t),$$

а кількість організмів в момент часу $t + 1$ рік визначається з рівняння (2.24):

$$N(t + 1) = 58n_3(t) = 2N(t).$$

Таким чином, за сталим віковим розподілом організмів на кожний організм третього року життя знайдеться 4 організму другого року і 24 організму першого року життя. Кількість організмів щорічно одвоюється. Якщо початковий віковий розподіл організмів популяції не є сталим, то популяція наблизиться до сталого розподілу за певну кількість років.

3 МОДЕЛЮВАННЯ І ПРОГНОЗУВАННЯ НАСЛІДКІВ АНТРОПОГЕННОГО ВПЛИВУ НА ДОВКІЛЛЯ

3.1 Аналітичне моделювання фізичних і біотичних процесів у довкіллі

Нереактивні процеси довкілля відбуваються без перетворення речовин.

До них відносять наступні явища:

- адвекція;
- дифузія;
- адсорбція – десорбція;
- абсорбція – звітрювання;
- осідання – зависання;
- біологічне поглинання – біологічне вивільнення.

Адвекція речовини є її спрямоване пересування у просторі зі швидкістю $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$. Якщо концентрація речовини в певній точці середовища $\vec{r} = (x, y, z)$ і момент часу $t \in C = C(x, y, z, t)$, то щільність питомого потоку маси речовини визначається за рівнянням

$$\vec{J}_C^{(n)} = (v_x C, v_y C, v_z C).$$

Дифузія речовини є її переміщення у просторі за рахунок нерегулярних, хаотичних коливань швидкості потоку в середовищі, де вона вміщується. Щільність питомого дифузного потоку маси речовини визначається рівнянням

$$\vec{J}_C^{(n)} = (E_x \frac{\partial C}{\partial x}, E_y \frac{\partial C}{\partial y}, E_z \frac{\partial C}{\partial z}).$$

де E_x, E_y, E_z – коефіцієнти турбулентної дифузії;

C – концентрація речовини.

Адсорбція речовини це – поглинання її молекул поверхнями твердих часток, з якими речовина контактує в середовищі. **Десорбція** це – зворотній процес звільнення молекул речовини з поверхонь твердих часток у середовище. Питома швидкість процесу «адсорбції – десорбції» визначається рівнянням

$$r_C^{(n)} = k_{a-d} \cdot (C^* - C),$$

де k_{a-d} – коефіцієнт швидкості процесу «адсорбції – десорбції»;

C^* – вміст адсорбованої частками речовини у стані рівноваги.

Абсорбція це – процес поглинання речовини рідкою фазою середовища з газоподібної фази через поверхню їх розділу. **Звітрювання** це – зворотній процес переходу молекул речовини з рідкої до газоподібної фази. Питома швидкість процесу «абсорбція – звітрювання» визначається за рівнянням:

$$r_C^{(n)} = k_{a-g} \cdot (C^* - C),$$

де k_{a-g} – коефіцієнт швидкості процесу «абсорбції – звітрювання»;

C^* – вміст речовини у рідкій фазі у стані рівноваги.

Осідання часток завислої речовини з потоку рідкої або газоподібної фази середовища на прилеглу тверду поверхню водночас може супроводжуватись їх зворотнім *зависанням*. Питомий потік осідання завислої речовини у напрямку дії сили тяжіння розраховується за формулою:

$$j_c = \rho v_s C,$$

де C – концентрація завислої речовини в потоці;

v_s – швидкість осідання часток завислої речовини.

Процес **біологічного поглинання** є наслідком обміну речовин, що відбувається між біотою і середовищем різними шляхами і призводить до біологічної концентрації, акумуляції або посилення вмісту речовини в організмах. Концентрація речовини у тканинах організмів відбувається шляхом між фазового розподілу. Акумуляція є наслідком процесу харчування, як і посилення, що означає передачу речовини по харчовим ланцюгам. **Біологічне виділення** це – зворотний до поглинання процес. Питома швидкість процесу поглинання речовини визначається за рівнянням:

$$r_c^{(n)} = k_{n-g} \cdot (C^* - C),$$

де C – вміст речовини у біомасі;

C^* – вміст речовини у біомасі у стані її рівноваги з вмістом речовини у середовищі;

k_{n-g} – коефіцієнт швидкості процесу біологічного поглинання.

Реактивні процеси докільця відбуваються з перетворенням речовин. До них відносять такі процеси:

- хімічні реакції;
- ферментативні реакції;
- фотоліз;
- гідроліз;
- біотрансформація.

Хімічні реакції. Питома швидкість хімічних реакцій визначається законом діючих мас, відповідно до закону діючих мас, якщо реакції речовин протікають у розчинах, газових або дрібнодисперсних сумішах і елемент системи є саме таким композитом, то питомі швидкості реакцій утворення або перетворення речовин у елементі залежать лише від вмісту в ньому реагуючих речовин (реагентів) і фізичних умов (температура t^o , тиск p , pH , освітленість, інтенсивність перемішування тощо). Якщо обмежитися урахуванням найбільш поширених бінарних реакцій, що протікають через взаємодію пар реагентів, то закон діючих мас дозволяє представити питомі швидкості реакцій через добуток вмістів реагуючих речовин.

Припустимо, що речовина A сполучається з речовиною B з утворенням речовини G , а C_A , C_B і C_G є вміст цих речовин, відповідно. Тоді за законом діючих мас для питомих швидкостей цього реактивного процесу маємо рівняння:

$$r_A^{(n-)} = k_A C_A^\alpha C_B^\beta; \quad r_B^{(n-)} = k_B C_A^\alpha C_B^\beta; \quad r_G^{(n+)} = k_G C_A^\alpha C_B^\beta,$$

де k_A, k_B, k_G – коефіцієнти швидкості реакції утворення або перетворення речовин A, B, G , що залежать від фізичних умов протікання реакції, яка має порядок $n = \alpha + \beta$.

Речовини вступають в реакції не в довільних кількостях, а у певних пропорціях, що має накладати відповідні обмеження на швидкості утворенні продуктів реакцій та перетворення її реагентів. Якщо бінарна реакція $A + B \rightarrow G$ відбувається тільки через перетворення маси m_A реагенту A та маси m_B реагенту B з утворенням маси m_G продукту G , тому

$$m_A + m_B = m_G,$$

а швидкості протікання відповідних реакцій в елементі системи мають задовольняти **стехіометричні обмеження**

$$\frac{r_A^{(n-)}}{m_A} = \frac{r_B^{(n-)}}{m_B} = \frac{r_G^{(n+)}}{m_G}.$$

Стехіометричні обмеження надають можливість визначити коефіцієнти швидкості реакції через будь-який один, наприклад:

$$k_G = \frac{m_G}{m_A} k_A; \quad k_B = \frac{m_B}{m_A} k_A.$$

Проте більшість математичних моделей, що знайшли широке застосування на практиці, побудовано для врахування перетворення окремих речовин. У цьому випадку питома швидкість реакції перетворення речовини визначається рівнянням

$$r_C^{(n-)} = \frac{dC}{dt} = -k_n C^n,$$

де k_n – коефіцієнт швидкості реакції перетворення, що має порядок n . Розв'язок цього рівняння має вигляд:

$$C(t) = \begin{cases} C_0 \exp(-k_1 t), & \text{коли } n = 1; \\ \frac{C_0}{[1 + (n-1)C_0^{n-1}k_n t]^{\frac{1}{n-1}}}, & \text{у іншому випадку,} \end{cases}$$

де C_0 - вміст речовини на початку реакції, коли час відліку дорівнює $t = 0$.

Ферментативні реакції відбуваються за участю каталітичного ензиму у два кроки. Спочатку ензим E утворює разом з субстратом S сполуку $[ES]$, яка потім засвоюється організмом з утворенням продукту P і звільненням ензиму за схемою:



Питома швидкість ферментної реакції визначається за рівнянням Міхаеліса-Ментена

$$r_P^{(n+)} = \frac{dP}{dt} = \mu_{\max} \frac{PS}{K_M + S},$$

де μ_{\max} – максимальна швидкість збільшення продукту;

K_M - константа напівнасичення.

Фотоліз це – процес перетворення речовини на молекулярному рівні під дією світлової енергії. Питома швидкість фотолізу визначається швидкістю реакції першого порядку:

$$r_C^{(n-)} = k_\phi C,$$

де k_ϕ – коефіцієнт швидкості фотолізу.

Коефіцієнт швидкості фотолізу залежить від властивостей речовини, що перетворюється, і від інтенсивності світлового потоку.

Гідроліз – це реакція перетворення речовини внаслідок розриву хімічних зв'язків її молекул через взаємодію з водою. Процес гідролізу є реакцією першого порядку з питомою швидкістю, що дорівнює

$$r_C^{(n-)} = k_2 C,$$

де k_2 – коефіцієнт швидкості гідролізу.

Біотрансформація – це процес перетворення речовини за посередництвом мікроорганізмів. Такі процеси можуть проявлятися різними шляхами, а саме як: **мінералізація** (перетворення органічних речовин на неорганічні); **детоксикація** (перетворення токсичних речовин на нетоксичні супутні продукти); **кометаболізм** (споживання речовини як другорядного субстрату, але не як споживної речовини). Після лаг-фази, як називають стадію адаптації (приспосовування) популяції мікроорганізмів до речовини, питома швидкість реакції біотрансформації визначається за моделлю Міхаеліса-Ментена

$$r_C^{(n-)} = -\frac{dC}{dt} = \mu_{\max} \frac{BC}{Y(K_c + C)},$$

де μ_{\max} – максимальна швидкість збільшення вмісту B біомаси мікроорганізмів;

Y – коефіцієнт урожайності;

K_c – константа напівнасичення;

C – вміст речовини-субстрата.

Коефіцієнт урожайності визначається так:

$$Y = \frac{\Delta B}{\Delta C},$$

де ΔB – приріст біомаси мікроорганізмів, що супроводжується споживанням речовини-субстрата у кількості ΔC (стехіометричне обмеження).

3.2 Принципи складання детермінованих моделей процесів у довкіллі

Фундаментальні принципи, закони, теорії є надзвичайно важливою складовою сучасних математичних моделей систем навколишнього середовища. Якщо зміна стану системи залежить головним чином від обміну речовинами, то її кількісними характеристиками є вміст речовин у елементах системи і потоки речовин між елементами системи та між елементами системи та її оточенням, що керуються певними законами.

В залежності від агрегатного стану елемента системи (тверде тіло, рідина, газ або суміш фаз) вміст C речовини в ньому може вимірюватися її концентрацією, молярною концентрацією, об'ємною, масовою, або молярною частками. Надалі будемо приймати масову частку для визначення вмісту речовини в елементі, якщо не буде спеціальних застережень. Відповідно до цього маса m певної речовини в елементі системи визначається за формулою:

$$m = C \cdot M ,$$

де M – маса елемента.

Швидкість зміни маси речовини в елементі вимірюється за похідною:

$$\dot{m} \equiv \frac{dm}{dt} = M \frac{dC}{dt} + C \frac{dM}{dt} \equiv M \dot{C} + C \dot{M} , \quad (3.1)$$

де t – час.

Потік $j^{(+)}$ речовини до елемента системи через його границі або поверхню вимірюється масою речовини, що надходить до елемента за одиницю часу. Потік $j^{(-)}$ речовини від елемента через його границі або поверхню вимірюється масою речовини, що виходить з елемента за одиницю часу. Ці потоки є кількісними характеристиками обміну речовинами певного елемента системи з іншими елементами або оточенням системи.

Крім того, речовина в елементі може перетворюватися в інші речовини або утворюватися з інших речовин через реактивні процеси. Швидкість $r^{(-)}$ реактивного перетворення речовини в елементі вимірюється її масою, що трансформується у інші речовини за одиницю часу. Якщо речовина через реакції утворюється в елементі з інших речовин, то швидкість $r^{(+)}$ реактивного утворення речовини в елементі також вимірюється її масою, що народжується в елементі з інших речовин за одиницю часу.

Принцип матеріального балансу є наслідком фундаментального **закону збереження маси речовини**, згідно до якого маса речовини не виникає з нічого і не зникає без сліду, але тільки переміщується у просторі, перетворюється у інші речовини або утворюється з інших речовин. Математичним виразом принципу матеріального балансу певної речовини в елементі системи є рівняння

$$\dot{m} \equiv \frac{dm}{dt} = j^{(+)} - j^{(-)} + r^{(+)} - r^{(-)} , \quad (3.2)$$

де m – маса речовини в елементі.

Якщо мірою величини елемента системи є його маса M , тобто маса усіх речовин, що його складають, то матеріальний баланс для елемента в цілому відображується рівнянням:

$$\begin{aligned} \dot{M} &\equiv \frac{dM}{dt} = J ; \\ J &= \sum (j^{(+)} - j^{(-)}) , \end{aligned} \quad (3.3)$$

де J – сумарний (повний) потік маси усіх речовин до елемента системи, що може бути додатнім, від'ємним або нульовим. Реакції, що протікають у елементі, не впливають на його повну масу.

З рівнянь (3.1), (3.2) і (3.3) випливає рівняння відносно вмісту (масової частки) певної речовини в елементі системи:

$$\dot{C} = j^{(+n)} - j^{(-n)} - J^{(n)}C + r^{(n+)} - r^{(n-)}, \quad (3.4)$$

$$j^{(n)} = \frac{J}{M}; \quad J^{(n)} = \frac{J}{M};$$

де (n) , $(n+)$ і $(n-)$ – верхні індекси питомого (на одиницю маси елемента) потоку певної речовини крізь межі елемента і питомі швидкості реакцій утворення та перетворення речовини, що відбуваються в елементі системи.

3.3 Детерміновані моделі процесів у біореакторах

Біореактором називають пристрій або споруду для очистки стічних вод з використанням мікроорганізмів. Очисні споруди, що включають один або кілька біореакторів є **біоінженерними системами**. Моделі простих біореакторів і біоінженерних систем широко використовуються на практиці.

Біореактор циклічної дії є технічною системою, що працює у періодичному режимі. У **фазі завантаження** в біореактор заливається певна маса стічної води, що містить забруднюючу речовину у кількості, яка перевищує норматив її гранично допустимого скиду у навколишнє середовище. У цей розчин додається реагент – мікроорганізми, для яких забруднююча речовина є субстратом. Ця суміш перемішується у біореакторі на протязі певного **часу утримання** τ , з перебігом якого мікроорганізми розкладають забруднюючу речовину, перетворюючи її частково у свою біомасу і частково у розчинені у воді продукти розкладу (**фаза очистки**). Робочий цикл завершується вивантаженням суміші до відстійника (**фаза розвантаження**). У процесі очистки стічної води до суміші постачають інші речовини, що необхідні для розвитку мікроорганізмів (наприклад, кисень) у достатній кількості, так що саме вміст субстрату є лімітуючим фактором їх розвитку.

Взагалі, **лімітуючими факторами** називають фактори, що обмежують швидкість реакцій або процесів у системі. Вони в першу чергу підлягають урахуванню в моделях систем. Метою моделювання є визначення зміни у часі вмісту забруднюючої речовини в стічній воді, що проходить очистку, в залежності від початкових умов і параметрів системи.

Найпростішою моделлю фази очистки у біореакторі циклічної дії є модель за реакцією першого порядку:

$$C_\tau = C_0 \exp(-k_1 \tau), \quad (3.5)$$

де C_τ – вміст речовини на кінці фази очистки;

C_0 – початковий вміст речовини;

k_1 – коефіцієнт швидкості реакції біотрансформації першого порядку;

τ – час утримання.

Рівнянню (3.5) може бути наданий інший вигляд:

$$k_1 = \frac{1}{\tau} \ln \left(\frac{C_0}{C_\tau} \right).$$

У такому вигляді воно використовується для визначення коефіцієнта k_1 певного біореактора.

Більш складною моделлю біореактора циклічної дії є модель біотрансформації поживної речовини, яка є лімітуючим фактором. Якщо процес очищення такої речовини відбувається за умов малої концентрації, то питома швидкість реакції є швидкістю реакції другого порядку:

$$\frac{dC}{dt} = -k_2 BC; \quad (3.6)$$

$$k_2 = \frac{\mu_{\max}}{YK_c},$$

де C – вміст речовини;

B – вміст біомаси мікроорганізмів.

Питома швидкість зростання біомаси B мікроорганізмів визначається рівнянням:

$$\frac{dB}{dt} = Yk_2 BC. \quad (3.7)$$

Рівняння (3.6) і (3.7) з приєднанням початкових умов:

$$C(t=0) = C_0; \quad B(t=0) = B_0,$$

складають модель фази очищення у біореакторі циклічної дії. Ця модель має вигляд нелінійної системи двох звичайних диференціальних рівнянь першого порядку. Наведена система рівнянь має аналітичний розв'язок:

$$A = YC_0 + B_0; \quad (3.8)$$

$$C_\tau = \frac{AC_0}{YC_0 + B_0 \exp(k_2 A \tau)}; \quad (3.9)$$

$$B_\tau = \frac{A}{1 + \left(\frac{A}{B_0} - 1\right) \exp(-k_2 A \tau)}, \quad (3.10)$$

де C_τ і B_τ – вміст речовини і біомаси мікроорганізмів по завершенні фази очищення.

Рівнянням (3.9) і (3.10) можна надати іншого вигляду, а саме:

$$k_2 = \frac{1}{A\tau} \ln \left[\frac{C_0}{P_\tau} \cdot \left(1 + Y \frac{C_0 - C_\tau}{B_0} \right) \right]; \quad k_2 = \frac{1}{A\tau} \ln \left[\frac{B_\tau}{B_0} \cdot \left(\frac{A - B_0}{A - B_\tau} \right) \right].$$

У такому вигляді вони можуть бути використані для визначення коефіцієнта k_2 швидкості реакції біотрансформації.

Ідеальний **біореактор-змішувач** це - проточна система, що працює у неперервному режимі з примусовим перемішуванням суміші у його робочому об'ємі, який вміщує постійну масу M завдяки тому, що потік маси J_M усіх

речовин на вході дорівнює потоку маси на виході з реактора. *Час утримання* для реактора-змішувача визначається за формулою

$$\tau = M/J_M .$$

Перемішування забезпечує однорідність розподілу речовин у робочому об'ємі, завдяки чому вміст речовини-субстрата C і біомаси мікроорганізмів B на виході з реактора такий же самий, як і у його робочому об'ємі. Постійними також є питомий потік $j_{C,cm}^{(n)} = C_{cm}/\tau$ речовини-субстрата на вході до робочого об'єму, де C_{cm} є вміст речовини-субстрата у стічній воді, і питомі потоки речовини-субстрата $j_P^{(n)} = C/\tau$ і біомаси мікроорганізмів $j_B^{(n)} = B/\tau$ на виході.

Найпростішою моделлю процесу очистки у біореакторі-змішувачі є модель за реакцією першого порядку, що визначається рівнянням матеріального балансу у вигляді:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{C_{cm} - C}{\tau} - k_1 C .$$

Аналітичним розв'язком рівняння з початковою умовою $C(0) = C_0$ є

$$C(t) = \frac{C_{cm}}{1 + k_1 \tau} + \left(C_0 - \frac{C_{cm}}{1 + k_1 \tau} \right) \exp \left[- \left(\frac{1}{\tau} + k_1 \right) t \right] . \quad (3.11)$$

Формулі (3.11) можна надати вигляду

$$k_1 = \frac{1}{t} \ln \left[\frac{C_0 \cdot (1 + k_1 \tau) - C_{cm}}{C(t) \cdot (1 + k_1 \tau) - C_{cm}} \right] - \frac{1}{\tau} ,$$

що може слугувати рекурентним рівнянням для визначення коефіцієнта швидкості реакції біотрансформації першого порядку.

Ускладнена модель біотрансформації поживної речовини у біореакторі-змішувачі, яка є лімітуючим фактором, утворюється доданням складових, що ураховують обмін робочого об'єму біореактора речовинами з навколишнім середовищем, а саме:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{C_{cm} - C}{\tau} - k_2 C B , \quad (3.12)$$

$$\frac{dB}{dt} = B \cdot \left(Y k_2 C - \frac{1}{\tau} \right) . \quad (3.13)$$

Стаціонарним станом системи називають стан, у якому всі її змінні є постійними величинами. Відповідно до цього стаціонарний стан біореактора-змішувача встановлюється за умов $\dot{C} = 0$ та $\dot{B} = 0$, що дають такі рівняння:

$$\frac{C_{cm} - C}{\tau} - k_2 C B = 0 ; \quad B \cdot \left(Y k_2 C - \frac{1}{\tau} \right) = 0 .$$

Система двох нелінійних рівнянь (3.12) і (3.13) має два розв'язки:

$$1) B = 0, C = C_{cm} ; \quad 2) B = Y C_{cm} - \frac{1}{k_2 \tau}, C = \frac{1}{Y k_2 \tau} .$$

Перший розв'язок відповідає стану біореактора, коли процес очистки не відбувається через відсутність мікроорганізмів у робочому об'ємі. Другий розв'язок – стану біореактора, коли процес очистки відбувається. Можна показати, що перший стан біореактору має місце, коли його навантаження перевищує певний рівень, так що

$$0 < \tau < 1/Yk_2 C_{cm} ,$$

а другий – у протилежному випадку:

$$\tau > 1/Yk_2 C_{\dot{n}0} .$$

Тому, саме для забезпечення безперервного процесу очистки, стічну воду після її проходження через біореактор спрямовують на вторинний відстійник, з якого певну частину активного мулу повертають у біореактор.

Детермінована модель біореактора-витискувача. У біореакторі-витискувачі процес біотрансформації речовини-субстрату відбувається у потоці стічної води, що рухається з постійною витратою вздовж споруди з закріпленою біотою. Біореактор такого типу є розподіленою системою, де вміст речовини залежить від відстані до входу стічної води в біореактор. Модель розподіленої системи отримується складанням балансу маси речовин для кожного її **елементарного об'єму (елементу)**, на які умовно поділяється система, щоб забезпечити однорідність розподілу речовин в межах кожного досить малого елемента.

З урахуванням формул для щільності питомих потоків маси речовини через адвекцію і турбулентну дифузію, а також у наближенні процесу трансформації речовини реакцією першого порядку, рівняння балансу маси для елементарного об'єму середовища має вигляд:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_x \frac{\partial C}{\partial x} + v_y \frac{\partial C}{\partial y} + v_z \frac{\partial C}{\partial z} = E_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + E_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + E_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - k_1 C,$$

де $C = C(x, y, z, t)$ – концентрація речовини у просторі в момент часу t .

Якщо розподіл речовини вздовж напрямків y і z близький до однорідного або розглядається середня концентрація $C = C(x, t)$ речовини у живому перерізі потоку в площині yOz , то модель набуває вигляду:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial x} = E \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - k_1 C; \quad (3.14)$$

$$v = \frac{Q}{\omega},$$

де v - середня в живому перерізі потоку швидкість течії;

Q - витрата потоку;

ω - площа живого перерізу;

E - коефіцієнт дисперсії (вісь x має напрямок уздовж потоку).

Рівняння (3.14) є математичною моделлю ідеального біореактора-витискувача, де трансформація речовини-субстрату відбувається у потоці стічної води, що рухається з постійною швидкістю v вздовж каналу з закріпленою біотою. Біореактор такого типу є розподіленою системою, де вміст речовини залежить від часу t і відстані x до входу стічної води в біореактор.

У стані рівноваги біореактора, коли відсутня залежність усіх змінних від часу, рівняння (3.14) набуває вигляду:

$$v \frac{dC}{dx} = E \frac{d^2C}{dx^2} - k_1 C.$$

Розв'язок є таким:

$$C(x) = C_{cm} \exp\left(\frac{v - \sqrt{v^2 + 4k_1 E}}{2E} x\right). \quad (3.15)$$

Формула (3.15) ще більше спрощується, якщо можна знехтувати впливом дисперсії, тобто при виконанні такої умови:

$$E \ll \frac{v^2}{4k_1}.$$

Тоді рівняння (3.15) перетворюється на таке:

$$C(x) = C_{cm} \exp\left(-k_1 \frac{x}{v}\right).$$

Ця модель може бути корисною для визначення коефіцієнта k_1 , якщо надати їй такого вигляду:

$$k_1 = \frac{v}{x} \ln\left(\frac{C(x)}{C_{cm}}\right).$$

3.4 Детерміновані моделі процесів у водоймах

Розглянемо кілька простих детермінованих моделей динаміки вмісту нормованої речовини у водних об'єктах.

Камерна модель вмісту речовини у водоймищі. Позначимо через $C = C(t)$ середній вміст речовини у водоймищі, що приймає кілька притоків з потоками маси $j_m^{(+)}$ і вмістом речовини C_m , а також з якого витікають кілька витоків $j_k^{(-)}$ з вмістом речовини C . Тоді рівняння балансу маси речовини має вигляд:

$$\frac{d}{dt} MC = \sum_m C_m j_m^{(+)} - C \sum_k j_k^{(-)} - Mk_1 C, \quad (3.16)$$

де M – маса усіх речовин у водоймищі,

k_1 – коефіцієнт швидкості реакції перетворення речовини.

Рівняння балансу маси усіх речовин у водоймищі є таким:

$$\frac{d}{dt} M = \sum_m j_m^{(+)} - \sum_k j_k^{(-)} - j_{\text{вип}}^{(-)}, \quad (3.17)$$

де $j_{\text{вип}}^{(-)}$ – витрата маси води на випаровування.

З урахуванням балансу маси речовини (3.17) рівнянню (3.16) можна надати такого вигляду:

$$\frac{d}{dt}C = \frac{1}{\tau}(C^* - C); \quad (3.18)$$

$$\tau = \left(\sum_m j_m^{(i+)} - j_{\hat{a}\hat{e}i}^{(n-)} + k_1 \right)^{-1}; \quad C^* = \tau \sum_m \tilde{N}_m j_m^{(n+)},$$

де τ - час утримання речовини у водоймищі.

Рівняння (3.17) і (3.18) складають динамічну модель вмісту речовини.

Для стану рівноваги ці рівняння спрощуються до таких:

$$\sum_m j_m^{(n+)} - j_{\text{вун}}^{(n-)} = \sum_k j_k^{(n-)}; \quad C_{pe} = C^* = \frac{\sum_m C_m j_m^{(n+)}}{\sum_k j_k^{(n-)}}.$$

Якщо лише початковий вміст речовини C_0 не дорівнює її рівноважному вмісту C_{pe} , то модель наближення системи до стану рівноваги має вигляд

$$C(t) = C_{pe} + (C_0 - C_{pe}) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right). \quad (3.19)$$

Рівняння (11.8) набуває такого вигляду:

$$\tau = \frac{1}{t} \ln \left(\frac{C_0 - C_{pe}}{C(t) - C_{pe}} \right)$$

і може бути використане для визначення коефіцієнта швидкості реакції k_1 .

4 МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ПОПУЛЯЦІЙНОЇ ЕКОЛОГІЇ.

4.1 Дискретні моделі динаміки чисельності окремих популяцій

Загальні принципи, що використовуються для складання дискретних моделей динаміки популяцій різних організмів, розміри яких піддаються обрахуванню або оцінюванню, можна демонструвати на прикладі моделей досить простих за структурою, але надзвичайно цікавих і корисних для розуміння можливих перетворень, що мають місце у навколишньому середовищі.

Розглянемо динаміку розвитку популяції мікроорганізмів, чисельність якої N_{n+1} в момент часу t_{n+1} змінюється за рахунок народження нових організмів «стрибком», тобто за дуже короткий час у порівнянні з інтервалом часу $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ поміж двома послідовними періодами народження організмів. Будемо вважати, що приріст чисельності (розміру) популяції кожного разу відбувається пропорційно до наявного її розміру N_n у попередній момент часу t_n , а зменшення – пропорційно до квадрату попереднього розміру N_n^2 через внутрішньовидову конкуренцію за обмежений ресурс виживання. За такими припущеннями динаміку розвитку популяції відображують наступним рівнянням:

$$N_{n+1} = bN_n - dN_n^2 = bN_n \left(1 - \frac{d}{b} N_n \right),$$

де b – коефіцієнт приросту чисельності популяції;

d – коефіцієнт зменшення чисельності за рахунок конкурентного відбору.

Якщо замість чисельності N_n ввести нову нормовану величину $a_n = N_n d / b$, то рівняння динаміки нормованої чисельності популяції прийме наступний вигляд:

$$a_{n+1} = ba_n(1 - a_n). \quad (4.1)$$

Початкову нормовану чисельність популяції в момент часу $t_0 = 0$ позначимо так:

$$a_n|_{n=0} = a_0. \quad (4.2)$$

Ці два рівняння складають дискретну модель динаміки чисельності популяції організмів, яку розглянув Р. Мей у 1976 році для демонстрації складних процесів, що можуть відбуватися навіть з простими динамічними системами.

Стану динамічної рівноваги модельна популяція досягає тоді, коли її розмір \hat{a} стало повторюється $a_{n+1} = a_n = \hat{a}$ з кожною новою фазою репродукції організмів. Підстановка величини \hat{a} у рівняння (4.1) замість a_{n+1} і a_n дозволяє отримати квадратичне рівняння для визначення сталого розміру популяції \hat{a} , що визначається рівнянням

$$\hat{a} = \frac{b-1}{b}. \quad (4.3)$$

З наведених формул можна зробити висновок, що динамічні властивості такої популяції визначаються виключно величиною коефіцієнта приросту у той час, коли абсолютна величина чисельності популяції визначається співвідношенням коефіцієнта приросту і коефіцієнта зменшення чисельності за рахунок конкурентного відбору: $N_n = ba_n / d \cdot a_n$

Наведемо графіки процесу зміни розміру популяції при різних величинах коефіцієнта приросту. На рисунку 4.1 зображені графіки зміни розміру популяції з початковою умовою $a_0 = 0,2$, коли коефіцієнт b дорівнює 0,5 (суцільна лінія), 1,8 (штрихована лінія) і 2,9 (пунктирна лінія).

За умовою $b < 1$ чисельність популяції стабільно зменшується, так що з часом популяція повністю вимре. Якщо величина коефіцієнту приросту знаходиться в межах $1 < b < 2$, то чисельність популяції монотонно змінюється, доки не досягне своєї сталої величини. Якщо величина коефіцієнту приросту знаходиться в межах $2 < b < 3$, то чисельність популяції також з часом досягає сталої величини, але не монотонним змінюванням, а з коливаннями навколо сталої величини.

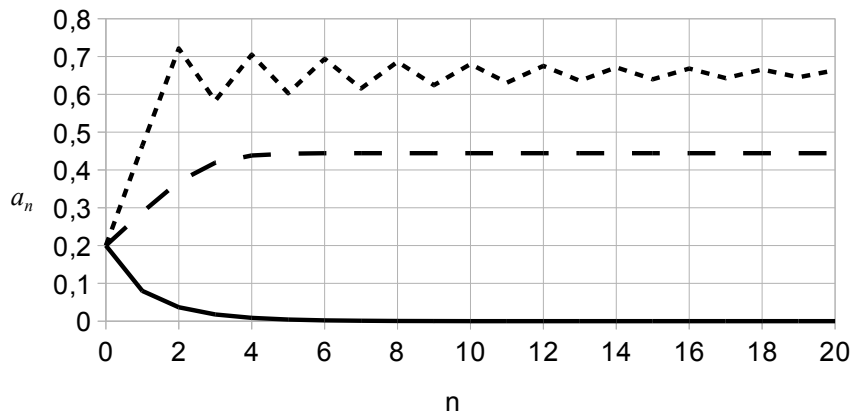


Рисунок 4.1 – Зміна розміру популяції у часі, якщо коефіцієнт приросту знаходиться у межах $0 < b < 3$

На рисунку 4.2 зображені графіки зміни розміру популяції з часом, якщо коефіцієнт приросту b дорівнює 3,1 (суцільна лінія), 3,4 (штрихована лінія) і 3,54 (пунктирна лінія).

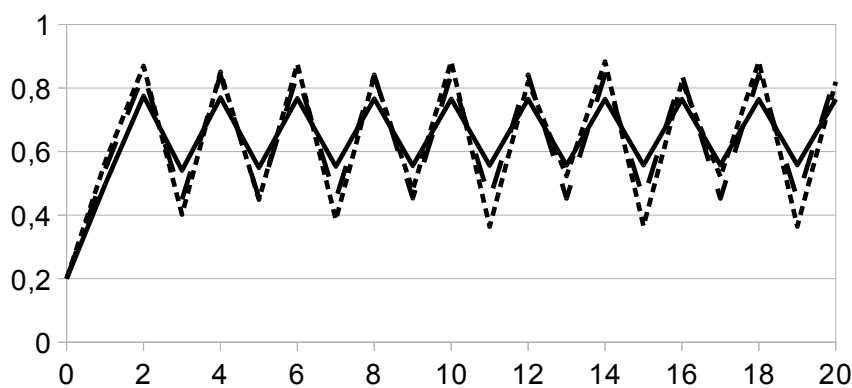


Рисунок 4.2 – Зміна розміру популяції з часом, якщо коефіцієнт приросту знаходиться у межах $3 < b < 3,55$

З графіків (рис. 4.2) видно, що популяція вже не досягає з часом сталого розміру, а виходить на режими коливань з періодами $2\Delta t$, $4\Delta t$, $8\Delta t$. Подальше зростання коефіцієнту приросту у межах $3,55 < b < 4$ призводить до подальшого подвоювання періоду коливань розміру популяції, так що, наприклад, за величиною коефіцієнту приросту $b = 0,95$ графік коливань чисельності (рис. 4.3) нагадує випадкові коливання. Такий режим «хаотичної» зміни будь-якої величини, що визначається динамічними рівняннями називають **динамічним хаосом**.

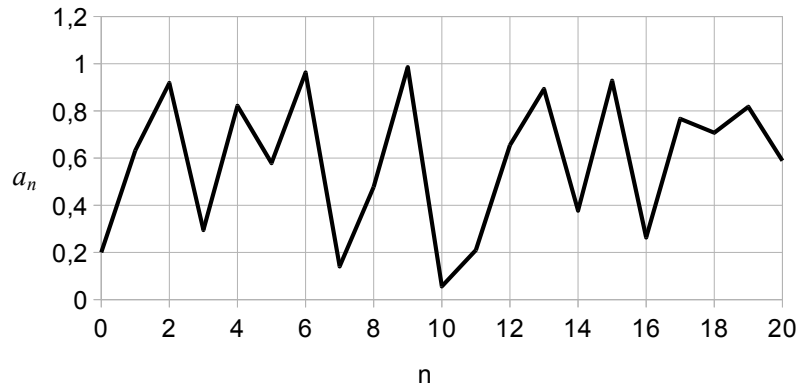


Рисунок 4.3 – Коливання розміру популяції у режимі динамічного хаосу

Крім того, зміни режимів динамічної «поведінки» системи зі зміною величини параметрів рівнянь, що визначають динаміку системи у часі, називають **біфуркаціями**.

4.2 Моделювання трофічного ланцюга на прикладі моделей «хижак-жертва»

Модель «хижак – жертва» є однією з ранніх моделей, що відноситься до виду неперервних моделей. Вона демонструє прояв трофічних зв'язків, що мають місце у всіх складних екологічних системах. Зв'язки такого типу відносять до форм закону збереження речовини, тому що частина живої маси однієї популяції – «жертви» x_2 приєднується до живої маси другої популяції – «хижака» x_1 .

У неперервних моделях швидкість перетворення біомаси популяції відображаються похідними першого порядку за часом t , так що рівняння моделі «хижак – жертва» за простими умовами мають вигляд:

$$\frac{dx_1}{dt} = -a_{11}x_1 + a_{12}x_2x_1; \quad \frac{dx_2}{dt} = -a_{21}x_1x_2 + a_{22}x_2,$$

де a_{11} , a_{22} , a_{12} , a_{21} – коефіцієнти, що із значним спрощенням визначають швидкості процесів відмирання «хижаків», народжуваності «жертв» та впливу «харчового» зв'язку на динаміку біомаси.

Стану рівноваги, коли величини біомаси популяції «хижака» і «жертви» не змінюються з часом відповідають такі значення змінних:

$$\hat{x}_1 = \frac{a_{22}}{a_{21}}, \quad \hat{x}_2 = \frac{a_{11}}{a_{12}}.$$

Якщо біомаси популяцій нормувати на їх рівноважні значення $x_1 = \hat{x}_1 X_1$, $x_2 = \hat{x}_2 X_2$, а також замість фізичного часу t ввести нормований час $\tau = t \cdot \sqrt{a_{11} a_{22}}$, то з новими змінними модель набирає особливо простого вигляду

$$\frac{dX_1}{d\tau} = -\alpha(1 - X_2)X_1, \quad \frac{dX_2}{d\tau} = \frac{1}{\alpha}(1 - X_1)X_2,$$

де $\alpha = \sqrt{a_{11}/a_{22}}$ – єдиний параметр, що визначає властивості динамічної моделі, яка розглядається.

Деякі цікаві властивості моделі можна углядіти з графіків розв’язків цієї системи двох диференціальних рівнянь за однаковими початковими умовами $X_1(0) = 0,5$; $X_2(0) = 0,5$ і різними величинами параметра α , що визначає співвідношення коефіцієнта відмирання «хижаків» до коефіцієнту народжуваності «жертв».

З наведених графіків можна зробити наступні висновки. Коли народжуваність «жертв» і смертність «хижаків» приблизно однакові, то популяції «хижака» і «жертви» демонструють регулярні періодичні коливання зі здвигом за фазою. Динамічна картина значно змінюється, якщо смертність або народжуваність значно більша. Так, за величиною $\alpha = 0,1$, коли народжуваність «жертви» у сто разів перевищує смертність «хижака», періодичність зберігається, проте динаміка популяції «жертви» нагадує «спалахи», що спостерігаються час від часу на відокрем порівняно помірному коливанні біомаси «хижака» (рис. 4.4; 4.5).

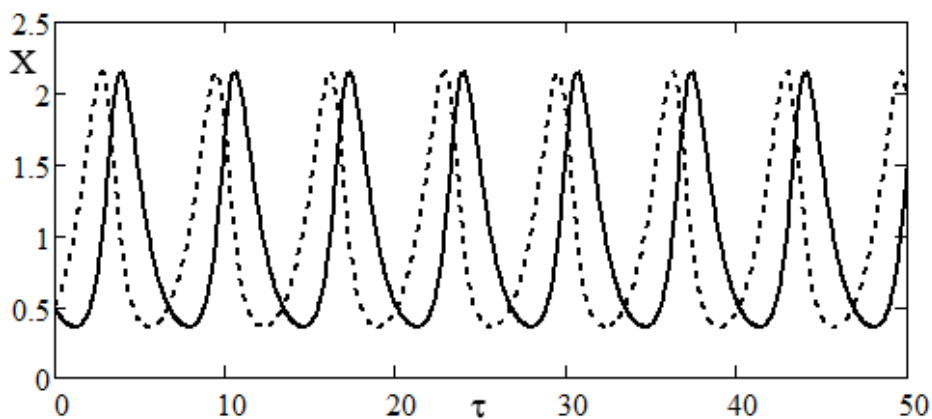


Рисунок 4.4 – Динаміка популяції «хижака» (суцільна лінія) і популяції «жертви» (штрихована лінія), якщо $\alpha = 1$

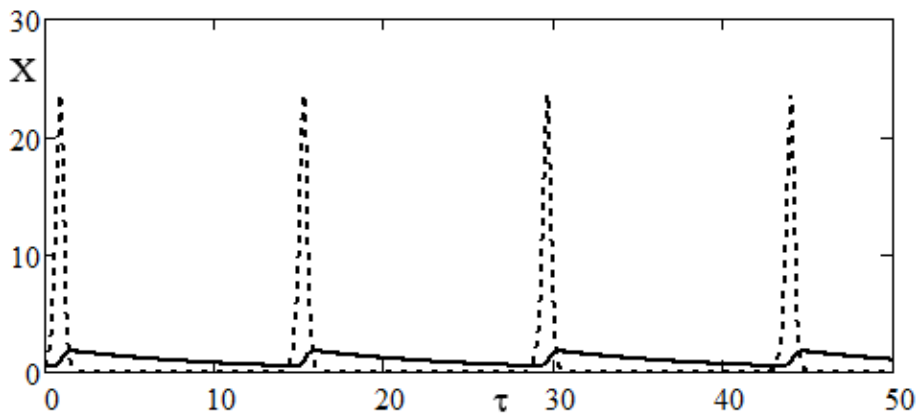


Рисунок 4.5 – Динаміка популяції «хижака» (суцільна лінія) і популяції «жертви» (штрихована лінія), якщо $\alpha = 0,1$

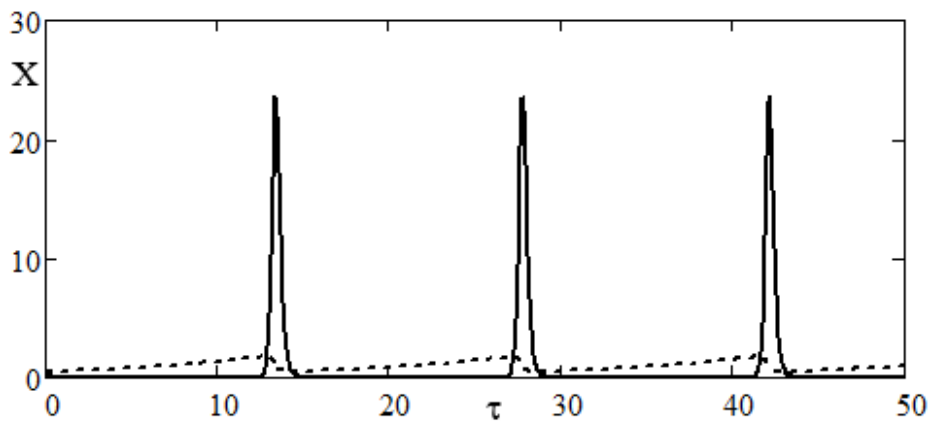


Рисунок 4.6 – Динаміка популяції «хижака» (суцільна лінія) і популяції «жертви» (штрихована лінія), якщо $\alpha = 10$

Навпаки, за величиною $\alpha = 10$ (рис. 4.6), коли смертність «хижака» у сто разів перевищує народжуваність «жертви», періодичність також зберігається, проте тепер динаміка популяції «хижака» нагадує «спалахи», що спостерігаються час від часу на відокрем порівняно помірного коливання біомаси «жертви».

СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Вавилин В. А. Математическое моделирование процессов биологической очистки сточных вод активным илом: моногр. / В. А. Вавилин, В. Б. Вавилин. – М. : Наука, 1979. – 119 с.
2. Джеферс Дж. Введение в системный анализ: применение в экологии : пер. с англ. / Дж. Джеферс. – М. : Мир, 1981.
3. Караушев А. В. Методические основы оценки и регламентированного влияния на качество поверхностных вод: моногр. / А. В. Караушев. – Ленинград : Гидрометеоиздат, 1987.
4. Ковальчук П. І. Моделювання і пргнозування стану нірколишнього середовища: навч. посібник. / П. І. Ковальчук. – Київ : Либідь, 2003. – 208 с.
5. Моисеев Н. Н. Математические задачи системного анализа : пер. с англ. / Н. Н. Моисеев. – М. : Наука, 1981.
6. Одум Ю. Основы экологии : пер с англ. / Ю. Одум. – М. : Мир, 1975.
7. Прокопенко А. И. Экономико-экологическое моделирование : учеб. пособ. / А. И. Прокопенко, А. Г. Вайнер, В. Л. Галкин ; Харьк. гос. пед. ун-т им. Г. С. Сковороды. – Харьков : АО «Бизнес Информ», 1997. – 360 с.
8. Лаврик В. І. Методи математичного моделювання в екології : моногр. / В. І. Лаврик. – Київ : Фітосоціоцентр, 1998. – 131с.
9. Пэнтл Р. Методы системного анализа окружающей среды : пер. с англ. / Р. Пэнтл. – М. : Мир, 1979. –214 с.

Навчальне видання

БАРАННИК Валерій Олександрович

КОНСПЕКТ ЛЕКЦІЙ

з дисципліни

«МОДЕЛЮВАННЯ І ПРОГНОЗУВАННЯ СТАНУ ДОВКІЛЛЯ»

(для студентів 4 курсу денної та заочної форм навчання

спеціальності 101 – Екологія)

Відповідальний за випуск *Ф. В. Стольберг*

За авторською редакцією

Комп'ютерне верстання *К. А. Алексанян*

План 2016, поз. 37 Л

Підп. до друку 26.01.2016

Друк на різнографі

Зам. №

Формат 60x84/16

Ум. друк. арк. 2,04

Тираж 50 пр.

Видавець і виготовлювач:

Харківський національний університет міського господарства імені О. М. Бекетова,

вул. Маршала Бажанова, 17, Харків, 61002

Електронна адреса: rectorat@kname.edu.ua

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи:

ДК № 5328 від 11.04.2017 р.