



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

Теоретичні основи математичних моделей поведінки полютантів у кореневій зоні рослин PRZM (Pesticides Root Zone Model)

Дослідимо тенденцію міграції забруднень у верхніх шарах ґрунту на прикладі пестицидів. Фактори які є суттєвими у такому дослідженні можна розділити наступним чином:

фізико-хімічні фактори:

хімічна насиченість розчину в воді	сорбційні властивості
випаровуваність	тривалість існування

агрономічні фактори:

властивості ґрунту	кліматичні умови
тип сільськогосподарських культур	практика вирощування цих культур



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

Опис моделі

Модель поведінки пестицидів у кореневій зоні у 1984-85рр. була запропонована в роботах Карселя (Carsel).

Модель PRZM є одновимірною, нестационарною моделлю для використання при прогнозуванні міграції хімікатів у ненасичених ґрунтових системах в межах та нижче кореневої системи рослин (рис. 1).

Модель дозволяє:

- прогнозувати розповсюдження потенційно токсичних хімікатів;
- розглядати ритмові забруднювальні навантаження;
- передбачати пікові події;
- оцінювати часово-залежні масові емісії чи профілі концентрації.



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

Модель PRZM враховує

дисперсію	адвекцію
випаровування з ґрунту	молекулярну дифузію
випаровування з поверхні рослин	поверхневе змивання
рух води, шляхом використання узагальнених параметрів ґрунту, включаючи пропускну здатність ґрунту, насичення водою	процеси поглинання пестицидів рослинами
зрошування	ерозію
адсорбцію	розпад
листяний змив	випаровування

Гідрологічні компоненти рівнянь перенесення пестицидів (тобто вологість і швидкість ґрунтової води) розглядаються окремо і використовуються для того щоб чисельно інтегрувати рівняння на наступних часових кроках.

Вихідні дані можуть бути отримані на

1-денний, місячний, річний періоди.



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

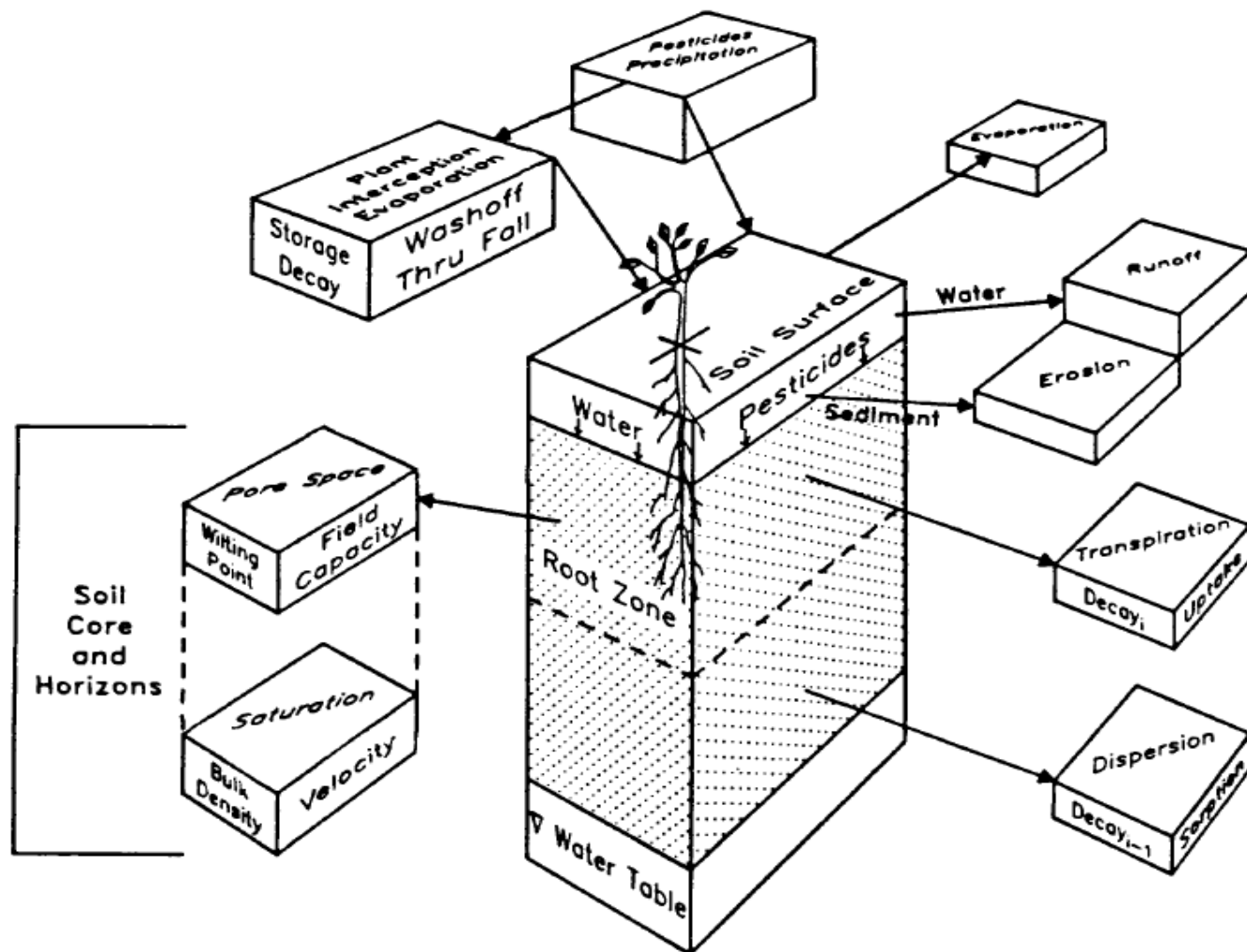


Рис.1. Схематичне подання профілю верхнього шару ґрунту



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

Математичний опис процесів модельованих PRZM розглядається розділенням на дві категорії:

1° Перенесення в ґрунті

2° Рух води

Модель PRZM-2 була отримана із концептуального розділеного представлення ґрунтового профілю як показано на рис. 2.

Рівняння масового балансу для поверхневих та приповерхневих зон:

$$\frac{A\Delta z\partial(C_w\theta)}{\partial t} = J_D - J_V - J_{DW} - J_U - J_{QR} + J_{APP} + J_{FOF} \pm J_{TRN}, \quad (0.1)$$

$$\frac{A\Delta z\partial(C_s\rho_s)}{\partial t} = -J_{DS} - J_{ER}, \quad (0.2)$$

$$\frac{A\Delta z\partial(C_g a)}{\partial t} = J_{GD} - J_{DG}, \quad \text{де} \quad (0.3)$$



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

A - площа поперечного перерізу колони ґрунту (см^2)

Δz - глибина секції (см) t - час (день)

C_w - концентрація розчину пестициду ($\text{г}\cdot\text{см}^{-3}$)

C_s - концентрація сорбції пестициду ($\text{г}\cdot\text{см}^{-3}$)

C_g - газова концентрація пестициду ($\text{г}\cdot\text{см}^{-3}$)

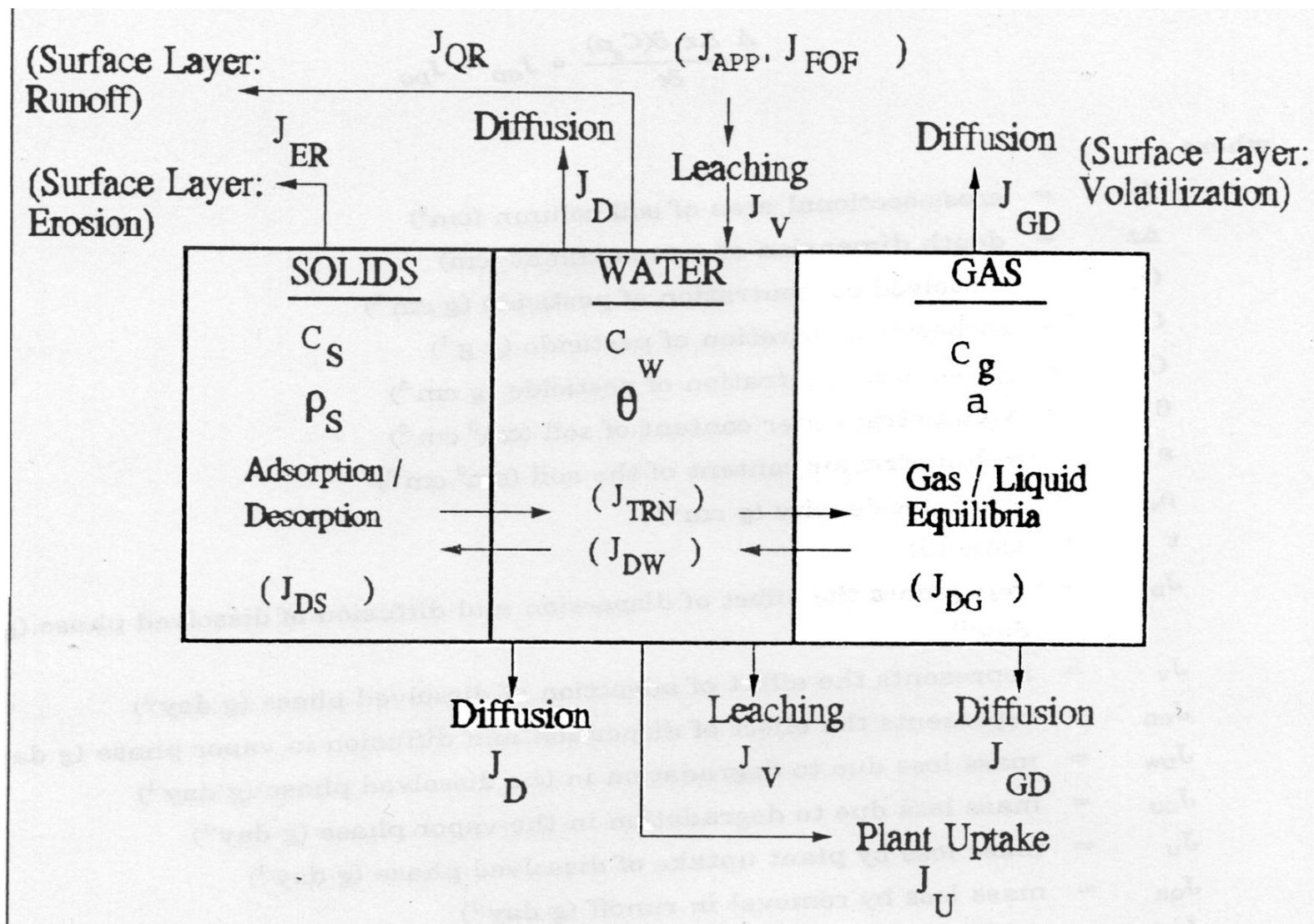
θ - об'ємна вологість ґрунту ($\text{см}^3\cdot\text{см}^{-3}$)

a - об'ємний вміст повітря у ґрунті ($\text{см}^3\cdot\text{см}^{-3}$)

ρ_s - об'ємна густина ґрунту ($\text{см}^3\cdot\text{см}^{-3}$)



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ





ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

J_D - представляє явище дисперсії та дифузії в розчиненій фазі (г·день⁻¹)

J_V - представляє явище адвекції в розчиненій фазі (г·день⁻¹)

J_{GD} - представляє явище дисперсії і дифузії в пароподібній фазі (г·день⁻¹)

J_{DW} - масова втрата від деградації в розчиненій фазі (г·день⁻¹)

J_{DG} - масова втрата від деградації в пароподібній фазі (г·день⁻¹)

J_U - масова втрата від поглинання рослинністю в розчиненій фазі
(г·день⁻¹)



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

J_{QR} - масова втрата від змивання (г·день⁻¹)

J_{APP} - приріст маси від поверхневого нанесення пестицидів на ґрунт (г·день⁻¹)

J_{FOF} - приріст маси породжений змиванням рослин (г·день⁻¹)

J_{DS} - масова втрата від деградації адсорбованого хімікату (г·день⁻¹)

J_{ER} - масова втрата від розпаду розмитого осаду (г·день⁻¹)

J_{TRN} - приріст чи втрата маси від перетворень (г·день⁻¹)



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

Дисперсія та дифузія в розчиненій фазі поєднуються та описуються законом Фіка

$$J_D = - \frac{A \Delta z D_w \partial^2 (C_w \theta)}{\partial z^2}$$

де

D_w - коефіцієнт дифузії–дисперсії для розчиненої фази, приймається сталим ($\text{см}^2\text{день}^{-1}$)

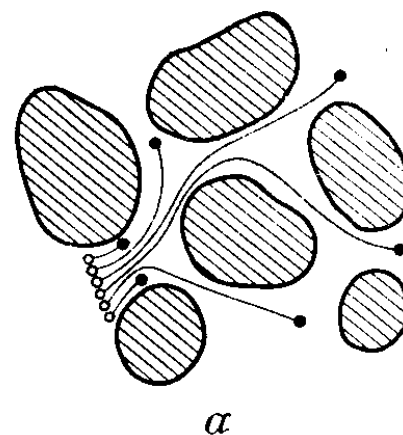
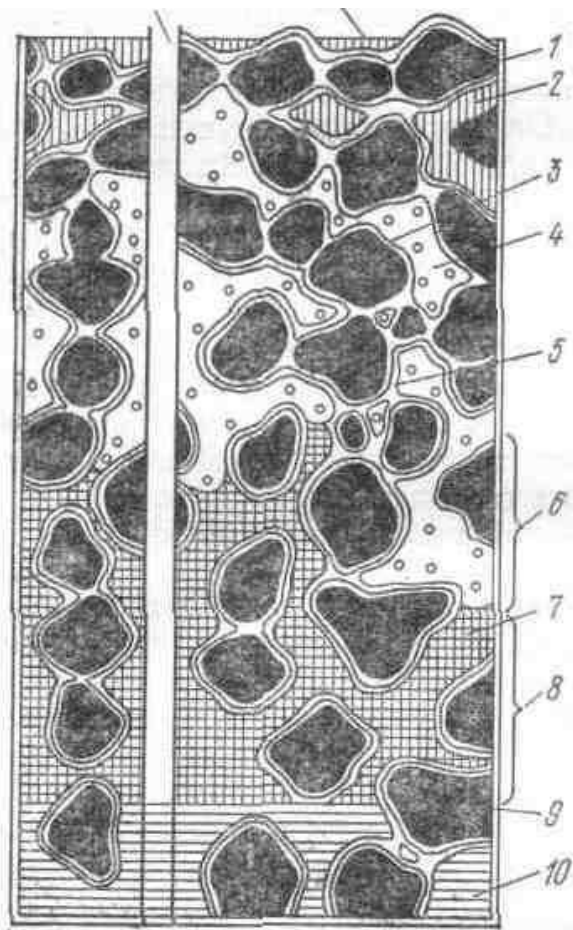
C_w - концентрація розчину пестициду ($\text{г}\cdot\text{см}^{-3}$)

θ - об'ємна вологість ґрунту ($\text{см}^3\cdot\text{см}^{-3}$)

Δz - глибина секції (см)



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МИГРАЦИИ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНИХ ШАРАХ ГРУНТУ



У ґрунтових середовищах, враховуючи неоднорідність будови твердої фази, відбувається розсіювання речовини, викликане неоднорідністю поля швидкостей рідини. Цей процес називають гідродисперсією або механічною дисперсією. Розрізняють поздовжню (в напрямку градієнта швидкості фільтрації) і поперечну (в площині, перпендикулярній до градієнта швидкості) дисперсію.



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

Дисперсія та дифузія в пароподібній фазі може теж бути описана законом Фіка

$$J_{GD} = - \frac{A \Delta z D_g \partial^2 (C_g a)}{\partial z^2}$$

де

D_g - молекулярна дифузійність пестициду в повітрі порового простору (см²·день⁻¹)

C_g - концентрація пестициду в пароподібній фазі (г·см⁻³)

a - об'ємний вміст повітря у ґрунті (см³·см⁻³)



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

Залежність молекулярної дифузії пестициду від об'ємного вмісту повітря в повітрям заповненому поровому просторі описується формулою Мілінгтона-Квека (Milington-Quirk) (Jury et al. 1983a):

$$D_g = \frac{a^{10/3}}{n^2} D_a$$

a - повітре-заповнена пористість ($\text{cm}^3 \cdot \text{cm}^{-3}$)

n - загальна пористість ($\text{cm}^3 \cdot \text{cm}^{-3}$)

D_a - молекулярна дифузійність хімікату в повітрі, приймається константою ($\text{cm}^2 \cdot \text{день}^{-1}$)



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

Адвективний член для розчиненої фази, J_v описує рух пестицидів і може бути поданим наступним чином:

$$J_v = - \frac{A \Delta z V \partial (C_w \theta)}{\partial z}$$

де

V - швидкість руху води (см·день⁻¹)

Адвекція в газоподібній фазі не була включена як потік в рівняння перенесення. Певне число дослідників визнали, що газоподібна адвекція не є значущою у сільськогосподарських умовах (W.Jury, W.Spencer, W.Farmer, L.Thibodeaux, 1987).



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

Деградація пестицидів в, чи на поверхні ґрунту може бути викликана такими процесами як гідроліз, фотоліз і мікробним (бактеріальним) розпадом. Якщо ці процеси відповідають псевдо кінетиці (динаміці) першого порядку, то коефіцієнти можуть бути отримані як один коефіцієнт розпаду. Зважаючи на таке припущення для твердої та розчиненої фаз, ми можемо записати оцінку зміни хімічного випадання (out) для кожної фази як наступну декомпозицію:

$$J_{DW} = K_s C_w \theta A \Delta z$$

$$J_{DS} = K_s C_s \rho_s A \Delta z$$

$$J_{DG} = K_g C_g a \Delta z$$

де

K_s - складена константа розпаду першого порядку для твердої і розчиненої фаз (день⁻¹)

K_g - складена константа розпаду першого порядку для пароподібної фази (день⁻¹)

C_s - концентрація пестициду в твердій фазі (г·см⁻³)



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

Поглинання рослинністю пестицидів моделюється у припущенні, що поглинання пестициду рослиною прямо пропорційно залежить від оцінки (норми) просочування. Поглинання подається у вигляді:

$$J_U = fC_w \theta \varepsilon A \Delta z,$$

де

J_U - поглинання пестицидів (г·день⁻¹)

f - частина всієї води в зоні використана для просочування (г·день⁻¹)

ε - фактор ефективності поглинання чи коефіцієнт рефлексивності (немає вимірності).



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

Втрати від змиву на поверхні

$$J_{QR} = \frac{Q}{A_w} C_w A$$

де

J_{QR} - втрата пестицидів від змиву
(г·день⁻¹)

Q - об'єм денного змиву (см³·день⁻¹)

A_w - водою покрита площа (см²)

Втрати від ерозії

$$J_{ER} = \frac{PX_e r_{om} C_s A}{A_w}$$

де

J_{ER} - втрата пестицидів від ерозії (г·день⁻¹)

X_e - ерозія осаду (втрати)

(метричних тон·день⁻¹)

r_{om} - відношення збагачення для органічних
речовин (г·г⁻¹)

p - частково перетворюючий фактор (г·тон⁻¹)



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

Вклад у рівняння від явища

змиву пестицидів з листяного покриву є:

$$J_{FOF} = EP_rMA \quad (0.1)$$

де

E - коефіцієнт листяного втягування (см^{-1})

P_r - денна глибина випадіння дощу ($\text{см} \cdot \text{день}^{-1}$)

M - маса пестициду на зпроектованій площі рослини ($\text{г} \cdot \text{см}^{-2}$)



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

Листкова маса пестициду M є надалі суб'єктом процесів деградації та втрат через випаровування і зміна в часі описується наступним співвідношенням:

$$\frac{AdM}{dt} = -K_f MA - J_{FOF} + A_F bA,$$

де

K_f - складена константа листяної деградації першого порядку

A_F - норма застосування до рослин (г·гектар⁻¹·день⁻¹)

Застосування пестицидів визначається нормою їх **нанесення на поверхню ґрунту** та рослин J_{APP} , що обчислюється засобами однієї з моделей застосування.



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

Адсорбція і десорбція в рівняннях (1.1)-(1.3) розглядаються як миттєві та лінійні процеси. Використовуючи це припущення, ми можемо пов'язати концентрацію сорбованої фази з розчиненою таким співвідношенням:

$$C_s = K_d C_w,$$

K_d - коефіцієнт поділу між розчиненою та твердою фазами ($\text{cm}^3 \cdot \text{cm}^{-3}$)

Подібний вираз може бути отриманим для концентрації газоподібної фази в термінах розчиненої фази:

$$C_g = K_H C_w$$

K_H - константа Генрі, тобто, коефіцієнт розподілу між рідною фазою та пароподібною фазою ($\text{cm}^3 \cdot \text{cm}^{-3}$)



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

Перетворення J_{TRN} вибирається співвідношенням першого порядку, і має вигляд:

$$J_{TRN} = -K_{TRN} C_W A \Delta z \theta,$$

де

K_{TRN} - константа норми перетворення (день⁻¹).

Коли моделюється закінчення ланцюга, J_{TRN} може також бути рівним сумі перетворень першого порядку від будь-яких попередників:

$$J_{TRN} = \sum_i K_{TRN}^i C_W^i A \Delta z \theta,$$

де індексом i позначено батьківське з'єднання.



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

Сумуючи рівняння (1.1)-(1.3), використовуючи наведені вище рівняння, отримаємо наступні співвідношення балансу маси пестициду в верхньому шарі ґрунту:

$$\begin{aligned} \frac{\partial [C_w (G + K_d \rho_s + a K_H)]}{\partial t} = & D_w \frac{\partial^2 (C_w \theta)}{\partial z^2} + D_g \frac{\partial^2 (a C_w K_H)}{\partial z^2} - \frac{\partial C_w \theta V}{\partial z} - \\ & - C_w \left[K_s (\theta + K_d \rho_s) + K_g a K_H + f \theta_\varepsilon + \frac{Q}{A_w \Delta z} + \frac{P X_e r_{om} K_d}{A_w \Delta z} \right] + \\ & + \frac{J_{APP}}{A \Delta z} + \frac{E P_r M}{\Delta z} - K_{TRN} C_w \theta + \sum_i K_{TRN}^i C_w^i A \Delta z \theta \end{aligned}$$



ОДНА З МОДЕЛЕЙ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЕНЬ У ВЕРХНІХ ШАРАХ ҐРУНТУ

Обмеження

Гідравлічні обчислення зреалізовані в PRZM з кроком за часом в один день; проте (випаровування, змивання, ерозія -?).

Робиться припущення про те, що повний дренаж води проходить в межах 1 дня (у великих стовпах породи ґрунту -?)

Не можна моделювати рух води вгору, викликаного випаровуванням. Цей процес був відмічений Жюрі та ін. (Jury, 1984) як достатньо істотний.

Неадекватність розв'язків рівнянь перенесення в адвективно-домінуючих системах.

Досліджується типова вода і хімічні параметри перенесення відповідають просторово гетерогенним ґрунтам (стохастичні підходи - ?).