

3. Коміркова модель обміну речовин у екосистемі

Просторова і часова неоднорідність екосистеми забезпечує належне здійснення в ній щомиттєвої роботи. В екосистемі поряд із плавним (градієнтним) переходом від одних умов до інших спостерігаються також і різні за розмірами ділянки простору, що характеризуються більш менш однаковими умовами і водночас помітно відрізняються від сусідніх ділянок простору – має місце дискретна зміна факторів.

Ми пропонуємо розробляти коміркову модель екосистеми – один із арсеналу засобів ЕІС. Згідно з цією моделлю екосистему можна вважати просторово дискретною – такою, що складається з певної (досить великої) кількості видів комірок, іншими словами компартментів. Кожна комірка – це сукупність точок у визначеній обмеженій частині простору, на які однаково впливають фактори середовища, що зумовлюють перебіг певних хімічних та фізико-хімічних процесів. За нашим задумом, коміркова модель екосистеми являє собою множину комірок різного роду, які змінюються в часі, розміщуються та переміщуються в просторі у визначеному порядку – за певними закономірностями.

Кожній із комірок у моделі екосистеми присвоюються внутрішні та зовнішні атрибути (вхідні параметри). До внутрішніх належать: 1) Вид компартменту, 2) Положення та форма компартменту, що описуються за допомогою його координат відносно умовної точки відліку або відносно інших компартментів. Згідно задуму, зазначення координат об'єктів у процесі створення моделі – процедура необхідна для виконання обчислювальною машиною багатьох операцій вже при запуску моделі, зокрема пов'язаних із розрахунками перенесення речовин. 3) Хімічний склад комірки, точніше особливості хімічного складу, що відрізняють дану комірку від хімічного складу базової моделі комірок цього виду.

Зовнішніми вхідними параметрами комірок є: 1) час; 2) зовнішні фізичні фактори (температура, вологість, освітлення та ін.); 3) зовнішні хімічні фактори – концентрації речовин, які неможливо передбачити як результат попередньої діяльності самого організму.

До первинних, але разом із тим найголовніших питань, на які повинна давати відповідь комп'ютеру і досліднику коміркова модель метаболізму, належать:

- 1) Чи принципово може відбуватися у зазначений час реакція у зазначеному компартменті?
- 2) Якщо проходження реакції за зазначених умов принципово можливе, то чи є реакція термодинамічно вигідною за заданого хімічного складу компартмента?
- 3) Якщо за заданих умов реакція термодинамічно вигідна, то яка кінетика її проходження за притаманних компартменту внутрішніх і заданих факторів зовнішнього впливу – як інтенсивно і до яких пір може проходити реакція.

Без відповіді на ці питання неможлива постановка більш складних задач.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Henry C.M., Washington C., Washington E.N. System biology: Integrative approach in which scientists study pathways and networks will touch all areas of biology, including drug discovery // Chemical and Engineering News. – 2003. – Vol. 81, Issue 20. – P. 45-55.
2. Novère N., Bornstein B., Broicher A., Courtot M., Donizelli M., Dharuri H., Li Lu, Sauro H., Schilstra M., Shapiro B., Snoep J.L., Hucka M. BioModels Database: a free, centralized database of curated, published, quantitative kinetic models of biochemical and cellular systems // Nucleic Acids Research. – 2006. – Vol. 34, Database issue. – P. D689-D691.
3. <http://www.ebi.ac.uk/biomodels-main/>.
4. Guglielmo F., Lammel G., Maier-Reimer E. Global environmental cycling of gamma-HCH and DDT in the 1980s – a study using a coupled atmosphere and ocean general circulation model // Chemosphere. – 2009. – Vol. 76, No 11. – P. 1509-1517.
5. Strömbäck L., Lambrix P. Representations of molecular pathways: an evaluation of SBML, PSI MI and BioPAX // Bioinformatics. – 2003. – Vol. 21, No 24. – P. 4401-4407.
6. http://sbml.org/SBML_Software_Guide/SBML_Software_Matrix/.
7. Бигон М., Харпер Дж., Таунсенд К. Экология: Особи, популяции и сообщества: В 2-х т. / Пер. с англ. В.Н.Михеева и М.А.Снеткова. – М.: Мир, 1989. – Т. 1. – 667 с.
8. Остроумов С.А. Введение в биохимическую экологию. – М.: Издательство Московского университета, 1986. – 176 с.
9. Александров В.Я. Реактивность клеток и белки. – Л.: Наука, 1985. – 317 с. – 8 ил.

УДК 628.17:658.26:681.5

Семенюта О.М., Квітка О.О., Шахновський А.М. (Україна, Київ)

ОБ'ЄКТНО-ОРІЄНТОВАНЕ ПРОЕКТУВАННЯ ОПТИМАЛЬНИХ СХЕМ ВОДОСПОЖИВАННЯ

Автоматизоване проектування схеми водного господарства промислових підприємств як складової частини хімико-технологічної системи передбачає організацію розрахунків щодо створення нової або модернізації існуючої схеми водного господарства, зокрема, шляхом застосування методів структурної оптимізації.

Структурна оптимізація схем водоспоживання, водовідведення та водоочищення полягає у раціональному перерозподіленні потоків між процесами у складі схеми водного господарства.

Структурна оптимізація схем водного господарства спрямована на максимально повне використання ресурсу схеми водного господарства без заміни основного обладнання, за рахунок організації системи рециклів. Такий підхід показав свою еколого-економічну ефективність внаслідок відносно низької вартості впровадження.

Загальним для переважної більшості використовуваних нині процедур структурної оптимізації схем водного господарства [1, 2] є формулювання проблеми у вигляді задачі математичного програмування. При цьому генерування принципових технічних рішень для підвищення ефективності промислового водоспоживання включає наступні етапи: 1) підготування вихідних даних; 2) визначення критерію оптимізації (мінімальне споживання свіжої води) із застосуванням концептуального підходу; 3) складання узагальноної схеми водоспоживання, що враховує всі варіанти перерозподілу потоків води; 4) формулювання на основі узагальноної схеми задачі математичного програмування, та вирішення цієї задачі; 5) подання результатів розрахунків у зручній для інженера (технолога) формі – у вигляді таблиць і схем.

Задача оптимізації у математичній постановці включає: 1) цільову функцію, що забезпечує рушійну силу процесу оптимізації; 2) систему обмежень, які надають результатам оптимізації належного фізичного сенсу.

Зазначена система обмежень формулюється на основі математичних моделей елементів схеми водного господарства (моделей процесів-водоспоживачів, процесів водоочищення, змішувачів та дільників потоків, тощо).

Специфіка числових методів, що застосовуються для вирішення задач оптимізації, вимагає формулювати обмеження у вигляді системи алгебраїчних рівнянь та нерівностей явного вигляду. Під час пошуку оптимуму на кожній з ітерацій процедури пошуку оптимуму реалізується підстановка даних в математичну модель із отриманням результуючих модельних величин (зокрема, концентрацій забруднювачів на виході з процесу). Такий розрахунок являє собою частковий випадок процесу математичного моделювання. В результаті виключається використання у процесі структурної оптимізації математичних залежностей неявного вигляду (диференціальних рівнянь [3], тощо).

В той же час, процеси, що протікають у складі схеми водного господарства, зокрема, при водоспоживанні та водоочищенні, мають складну природу, і традиційні спрощені моделі вказаних процесів не завжди забезпечують достатню точність опису цих явищ у потрібному обсязі. В результаті, при традиційному підході до структурної оптимізації схем водного господарства (рис. 1) може виникати додаткова похибка результатів проектування.

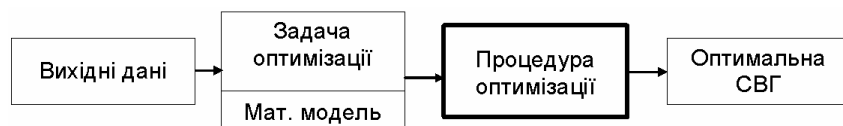


Рис. 1. Традиційний підхід до структурної оптимізації схем водного господарства

Застосований авторами підхід [4] відкриває можливість використання для структурної оптимізації схем водного господарства математичних моделей заданого дослідником ступеню точності (рис. 2). Складність використовуваної математичної моделі обмежується лише наявними обчислювальними ресурсами (наявністю в дослідника програмно-алгоритмічного забезпечення для вирішення обраної моделі, потужністю комп'ютера, тощо).

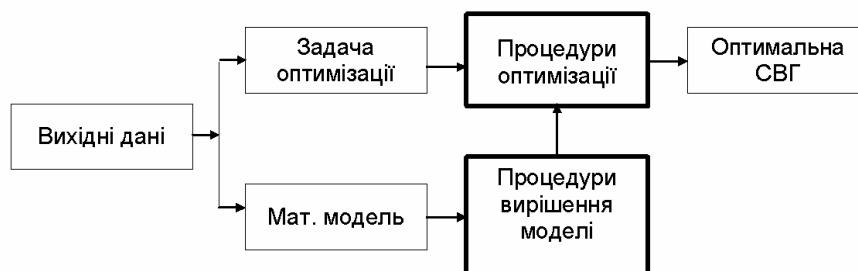


Рис. 2. До збільшення адекватності математичних моделей, під час структурної оптимізації схем водного господарства

При цьому створення програмного забезпечення та реалізація розрахунків базується на об'єктно-орієнтованому принципі. Останній є основним при розробці сучасного прикладного програмного забезпечення, проте не є розповсюдженим серед спеціалістів у наукових обчисленнях. Це зумовлено історичним домінуванням мов програмування FORTRAN та C для програмування числових методів (зокрема, через наявність великої кількості бібліотек програмного коду вказаними мовами програмування), а також популярністю серед науковців математичних пакетів MATLAB, Mathematica та ін.

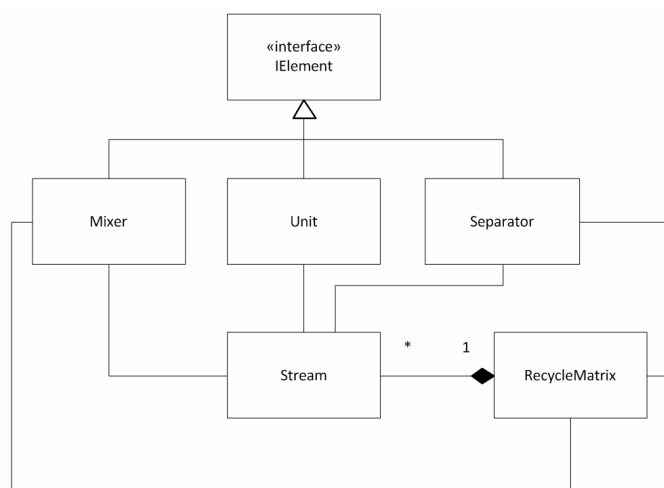


Рис. 3 Діаграма класів для проблемної області процесу оптимізації схем водного господарства

Для моделювання проблемної області процесу оптимізації схем водного господарства запропоновано наступні класи та інтерфейси (рис. 3):

- Stream (потік) – матеріальний потік; характеризується величиною витрати та концентраціями речовин-забруднювачів;
- IElement – структурний елемент схеми: процес, який споживає воду; змішувач чи розділювач потоків; процес водоочищення;
- RecycleMatrix (матриця рециклів);
- Unit (апарат) – об'єкт-водоспоживач; характеризується моделлю у вигляді сукупності множини залежностей (наприклад, системи диференціальних рівнянь) та вхідним і вихідним потоками;
- Mixer (змішувач потоків);
- Separator (розділювач потоків).

Наголосимо, що назви класів відповідають термінології, прийнятій в практиці структурної оптимізації схем водного господарства.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Shakhnovskij A., Jezowski J., Kvitka A., Jezowska A., Statiukha G. Optymalizacja sieci wody procesowej przy zastosowaniu programowania matematycznego. // Inzineria chemiczna i procesowa. – 2004. –25. – p. 1607-1612..
2. Zgurovsky M., Statyukha G., Kvitka O., Shakhnovsky A., Dzhygyrey I. The Systems Approach to Design of Optimal Water Usage and Wastewater Treatment Networks. Abstracts of International Conference on Environment: Survival and Sustainability. 2007, Nicosia – Northern Cyprus. – MT-14. – P. 623-624.
3. Статюха Г.А., Квитка А.А., Бойко Т.В., Джигирей И.Н. Использование математических моделей процессов очистки для проектирования распределенных систем очистки сточных вод. - Химия и технология воды. - 2006. - N 6., т. 28, с. 517-530.
4. Шахновський, А. М. Використання моделей неявного вигляду при оптимізації схем водного господарства / А. М. Шахновський, О. О. Квітка, О. М. Семенюта // «Екологія. Людина. Суспільство»: Тези доповідей XIV міжнародної науково-практичної конференції студентів, аспірантів та молодих вчених. – 18-22 травня 2011, Київ, 2011. – с. 93-95
5. Paul F. Dubois. Object Technology for Scientific Computing. Object-oriented Numerical Software in Eiffel and C++. – NJ: Prentice-Hall. – 1997. – 300 p.

УДК 551

Учитель И.Л., Корбан В.Х., Михайлов В.И., Капочкин Б. Б., Кучеренко Н.В. (Украина, Одесса)

СПУТНИКОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ МОНИТОРИНГА ГЕОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Характеристика общей проблематики. Глобальные геодинамические процессы формируют существенные изменения в окружающей среде. В работах академика П.Н. Кропоткина показано, что в связи с ежегодным июньским изменением объема Земли фиксируется планетарная активизация вулканизма, а в связи с декабрьскими аномальными приливами в твердом теле Земли фиксируется усиление сейсмических проявлений. В связи с «Новой годовой модой» [5] геодинамики, в марте происходит расширение Северного полушария, а в августе Южного полушария, что приводит к многофакторным изменениям. Вследствие явления дилатансии, одни и те же объемы воды, содержащиеся в земной коре, могут формировать как понижение уровня грунтовых