

JAKUB LANGHAMMER

MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ JAKO METODA HODNOCENÍ STAVU A VÝVOJE JAKOSTI VODY

J. Langhammer: *Assessment of Water Quality and Its Changes: the Role of Mathematical Modelling*. – Geografie-Sborník ČGS, 102, 4, pp. 241 – 253 (1997). – As regards the assessment of water quality and its changes (both in cross- and lengthwise-profile), mathematical modelling is a relatively recent method. It is based on simulation of water movement in the river bed and on consequent modelling of diffusion of pollutants. Mathematical modelling enables to calculate a continuous lengthwise-profile of water quality in the water course and to identify the impact of various pollution sources on water quality. It also makes possible to predict water quality changes over the time under changing external conditions.

KEY WORDS: hydrology – water quality – mathematical modelling.

1. Úvod

Současný rozvoj moderní společnosti s sebou vedle jednotlivých civilizačních výtoky a nesporného technického pokroku přináší i značnou zátěž pro životní prostředí. Jeho postupná devastace se promítá do všech složek přírodní sféry – do ovzduší, vody, půdy, flóry i fauny.

Vodní složka přírodní sféry přitom představuje jednu z jejích nejvýraznějších a nejlépe uchopitelných součástí. Kvalita povrchové vody totiž odráží aktuální stav zatížení prostředí nejběžnějšími a nejhojněji zastoupenými aktivitami – zemědělstvím, průmyslem a lidským osídlením.

Z tohoto důvodu je ve většině vyspělých zemí již dlouhodobě provozována síť měrných kontrolních profilů, ve kterých se v pravidelných intervalech odebírají a analyzují vzorky povrchové vody. Sledovány přitom bývají různé skupiny ukazatelů znečištění – ukazatelé kyslíkového režimu, zachycující zejména míru biologického a komunálního znečištění, základní chemické ukazatele, odrážející zatížení zemědělstvím a průmyslem. Sem řadíme jednotlivé sloučeniny dusíku, fosforu, ale i obsah veškerých rozpuštěných a nerozpuštěných látek ve vzorku, reakci vody apod. Aby bylo možné postihnout vliv zatížení z průmyslových výroby, které jsou svým vlivem na životní prostředí mimořádně závažné, je potom sledována skupina ukazatelů těžkých kovů a dalších specifických látek – AOX, PCB, fenoly, tenzidy aj., dále pak speciální ukazatele biologické a mikrobiologické. V České republice přitom existuje síť měrných profilů, která svým plošným rozsahem patří k nejhustším v Evropě.

Rychlý rozvoj techniky umožnil postupné rozšiřování škály sledovaných ukazatelů i významné zvýšení citlivosti analytických metod. V současné době tak můžeme získat poměrně přesný odraz aktuálního stavu znečištění povrchové vody na prakticky všech významných tocích a povodích v České republice. Při rozsahu měrné sítě a náročnosti analytického zpracování však zůstá-

vá problémem periodicita prováděných odběrů, která je u naprosté většiny profilů 30 dní, u významnějších míst odběru potom dva týdny.

Vývoj kvality vody však přitom vykazuje permanentní časovou proměnlivost, způsobenou jak proměnlivostí vodních stavů, tak i změnami v přísunu polutantů od jednotlivých zdrojů znečištění. Tu však metoda periodických odběrů nemůže plně postihnout. Pro sledování nepřetržitého stavu vývoje kvality vody byly proto vyvinuty automatické měřicí stanice, pracující v kontinuálním režimu, resp. s velice krátkým, řádově minutovým intervalem měření. Vysoká finanční nákladnost těchto zařízení však umožňuje jen jejich omezené použití, a to na nejvýznamnějších profilech či tocích. V ČR je tak např. v současné době v provozu pouze pět těchto automatických stanic, provozovaných v rámci mezinárodního projektu Labe; čtyři na vlastním toku Labe, jedna na výústním profilu Vltavy. Údaje z těchto stanic nám poskytují téměř dokonalé pokrytí problematiky sledování kvality vody v daném profilu. Široký rozsah ukazatelů, sledovaných v požadované úrovni přesnosti a v kontinuálním režimu, umožňuje pro příslušný profil detailní analýzu vývoje jakosti vody v čase. Z finančního i technického hlediska však plošné využití těchto stanic není a v nejbližší době patrně ani nebude reálné.

I zde však zůstává prakticky neřešitelná otázka: měření v soustavě několika měrných profilů na toku nám při sledování vývoje jakosti vody v podélném profilu může nabídnout vždy pouze více či méně nespojitý odraz skutečnosti. Klasickými analytickými metodami dokážeme zkoumat a sledovat stav a vývoj kvality vody v určitých definovaných klíčových bodech toku – v měrných profilech. Jak se však mění kvalita vody mezi těmito profily, které zdroje – ať již bodové nebo difusní – ji ovlivňují a v jaké míře, to je otázka, na kterou nám metody bodového měření nemohou dát uspokojivou odpověď.

Zde právě nacházíme pole působnosti pro relativně mladou, avšak rychle se rozvíjející metodu hodnocení kvality vody – matematické modelování. Jedná se o metodu, která umožňuje sledovat vývoj kvality vody v kontinuálním podélném profilu toku či říční síti a v čase. Ten může představovat buď jeden vybraný moment nebo spojitě časové období.

Základ hodnocení s pomocí matematického modelování tvoří hydraulický model koryta toku či říční sítě, včetně jednotlivých definovaných regulačních objektů – jezů, hrází, zdrží apod. Podél toku jsou potom nadefinovány zdroje bodového či plošného znečištění. Výsledná kvalita vody je potom vypočítávána kombinací rovnic popisujících hydrodynamiku proudění v korytu toku spolu s rovnicemi chemickými, které definují reakce jednotlivých látek. Výsledkem činnosti modelu je potom stanovení koncentrací vybraných látek pro jednotlivé úseky podélného profilu v čase.

Praktické využití těchto modelů bylo umožněno v podstatě až spolu s prudkým rozvojem výpočetní techniky. Náročnost a složitost výpočtů totiž ještě v nedávné době dovozovala realizovat takovéto simulace téměř výhradně na výkonných sálových počítačích. V dnešní době je možné provozovat tyto matematické modely na běžných pracovních stanicích či silných osobních počítačích, což zvyšuje možnost nasazení těchto nástrojů.

Jak bylo naznačeno, matematické modelování je možno použít pro spojitě hodnocení stavu a vývoje kvality vody v tocích. To platí za předpokladu, že jako vstupní data použijeme údaje naměřené v odpovídajícím období ve sledované oblasti. Potom získáme kontinuální podélný profil vývoje kvality vody toku buď pro daný časový moment či pro časové období ve formě spojitých časových řad. Hlavní síla matematických modelů však spočívá v možnostech simulace. Umožňují tak buď simulovat různé hydrologické situace – povodně,

období sucha či jiné modelové hydrologické situace, a to jak z hlediska čistě hydraulického (tj. z hlediska změn proudění a vodních stavů) tak z hlediska změn jakosti vody. Druhou možností potom představuje simulace změn v objemech či režimech vypouštění polutantů od jednotlivých zdrojů znečištění. S vysokou mírou spolehlivosti tak lze simulovat účinek různých změn a opatření, stanovovat míru vlivu jednotlivých zdrojů na celkovou kvalitu vody v toku a na jeho vývoj.

Stále zřetelněji se ukazuje, že si matematické modelování postupně vydobývá svoji pozici mezi standardními metodami hodnocení kvality vody. Může jednak vhodně doplňovat měření, realizovaná prostřednictvím sítě měrných profilů, především však výrazně zefektivňuje činnost sledování významu jednotlivých zdrojů na znečištění toku a jeho vývoje. Nezastupitelnou pozici má pak v oblasti vodohospodářského plánování a v projekční činnosti.

2. Základní principy modelování kvality vody

2.1 Přehled

Dříve, než se budeme věnovat popisu principu, funkce a použití matematických modelů v hodnocení jakosti vody, musíme se zmínit o základních existujících typech modelů v hydrologii obecně. Aplikací obecných fyzikálních a numerických principů v oblasti hydrologie je totiž značné množství – tak jak rozmanitá je sama hydrosféra a možnosti jejího zkoumání. Z metodického hlediska můžeme modely rozdělit podle různých kritérií. Jedním z nich je základní oblast použití; můžeme tak rozlišovat:

- modely pro simulaci proudění v otevřených korytech (simulace vodních toků a jejich soustav)
- modely popisující proudění v nádržích (speciální modely, popisující proudění vody v uzavřených vodních nádržích, zohledňující specifika tohoto prostředí, tj. teplotní stratifikaci, odlišné mechanismy šíření a odbourávání látek aj.)
- modely pro simulaci proudění v pobřežních oblastech moře a ústí řek (kombinace proudění říčního s vlivem dmутí, rozdílných vlastností a chemismu sladké a slané vody a šíření látek v něm aj.)

V tomto příspěvku se budeme dále zabývat pouze modely pro simulaci proudění v podélném profilu otevřených říčních koryt, což je oblast pokrývající problematiku sledování a hodnocení jakosti vody v našich tocích. Máme-li stručně definovat oblastí možného použití tohoto druhu modelů, jako hlavní cíle můžeme vidět:

- výpočet hodnot jednotlivých ukazatelů kvality povrchové vody v prostoru a čase
- simulaci vývoje jakosti vody v prostoru a čase za různých vnějších podmínek (změny průtoků, zatížení polutanty aj.)
- prognózy vývoje kvality vody v jednotlivých ukazatelích.

Při vlastním provádění simulace pomocí matematických modelů je vždy nutné mít na zřeteli, že výsledné vypočtené hodnoty jsou *vždy hodnoty pouze pravděpodobné* a že míra jejich pravděpodobnosti je přímo závislá na:

- fyzikální oprávněnosti matematického modelu
- vhodnosti zvoleného matematického popisu fyzikální podstaty
- kvalitě vstupů

2.2 Základní principy činnosti modelů

Základním kamenem matematických modelů, používaných v hydrologii je vždy definice simulované říční soustavy, morfometrie koryta a hydraulických, resp. hydrodynamických poměrů proudění. Popis použitý v matematickém modelu je vždy určitým schematickým účelovým zjednodušením reálných poměrů, panujících v toku. Říční síť v povodí je tak podle potřeby zjednodušena a dále definována více či méně schematicky. Většina modelů kromě hlavního toku umožňuje při současném běhu modelovat i proudění v jednotlivých přítocích. Využití možnosti simulace v síti však klade vyšší nároky na výpočetní zpracování. Proto je třeba před definicí projektu vždy vzít v úvahu požadovanou přesnost výsledku, a to s ohledem na náročnost zpracování. V případě zjednodušeného modelu potom méně významné přítoky definujeme obdobně jako bodové zdroje.

Morfologie koryta bývá obvykle definována prostřednictvím série příčných profilů řečištěm, jejich nadmořskou výškou a geografickou polohou. Hustota těchto profilů záleží na charakteru koryta a celkové míře jeho proměnlivosti. Na toku potom dále definujeme jednotlivé hydrologické a regulační objekty – nádrže, hráze, jezy, zdrže. Ty bývají většinou zadány prostřednictvím údajů o jejich tvaru a vlivu na proudění – šířky, výšky hráze, rozdílu hladin, podílu přepadu přes korunu, charakteru hrany přepadu apod.

Pro vlastní výpočet je potom celý tok (či síť) rozdělen na jednotlivé úseky s pevně definovanou délkou, ve kterých pak vždy probíhají výpočty změn proudění a následně i kvality vody. Délku těchto úseků – elementárních výpočetních kroků – volíme v závislosti na rozsahu projektu a jeho požadované přesnosti většinou v rozsahu od desítek metrů po kilometry. K takto definovanému projektu je třeba rovněž zadat vstupní a okrajové podmínky, které vymezují rámec funkčnosti modelu.

Vytvořený model koryta či říční sítě je potom v první řadě třeba optimalizovat porovnáním vypočtených hodnot s hodnotami naměřenými v reálném toku. Sady parametrů, které upravují popis proudění a které jsou na počátku nastaveny na hodnoty popisující platné podmínky pro obecné proudění v otevřených korytech, je třeba zkalibrovat na daný tok a jeho specifika. Na podkladu takto odladěného modelu proudění vody v korytě potom probíhá vlastní výpočet kvality vody.

Pro simulaci šíření jednotlivých znečišťujících látek v korytě toku je nutno nejprve vytvořit strukturu zdrojů znečištění, tj. vybrat a lokalizovat všechny významné zdroje vypouštění znečišťujících látek, stejně jako odběrů vody. Do této struktury řadíme i jednotlivé přítoky hlavního toku, které nejsou modelovány jako samostatný tok v rámci říční sítě. Tyto bodové zdroje jsou potom definovány kilometráží, umožňující lokalizaci zdroje a jeho začlenění do hydraulické soustavy, dále pak údaji o objemu vypouštěných látek a o jejich chemismu. Vedle zdrojů bodových je možno definovat rovněž zdroje difusní, které v praxi pokrývají zejména znečištění pocházející ze zemědělské činnosti a povrchového splachu. To bývá nejčastěji modely identifikováno jako podélný přírůstek průtoku pro jednotlivé úseky, opět spolu s údaji o chemismu vod.

Jádrem výpočtu kvality vody v matematických modelech je vždy výpočet kyslíkového režimu – tj. rozpuštěného kyslíku a BSK, na jehož základě se poté odvíjejí reakce dalších ukazatelů – jednotlivých forem dusíku, fosforu, biologického znečištění aj. Speciální ukazatele jako těžké kovy aj. bývají obvykle modelovány jako konzervativní látky.

Rovněž pro výpočet kvality vody je naprosto nevyhnutelná kalibrace modelu porovnáním s údaji naměřenými na kontrolních profilech. Teprve na zá-

kladě optimalizovaného a zkalibrovaného modelu je možno přistoupit k vlastnímu modelovému výpočtu či simulaci.

2.3 Hlavní typy matematických modelů jakosti vody

Výše uvedený popis základních principů funkce matematických modelů pro hodnocení jakosti vody je velmi kusý a všeobecný. Přitom je nutno mít na zřeteli rozdíly, které mezi jednotlivými modely existují. Každý typ modelu je totiž koncipován pro odlišné podmínky a tím i předurčen pro různé oblasti nasazení. Přestože modely popisují obecné podmínky proudění v tocích a jsou co do možností použití značně flexibilní, nejsou naprosto univerzální. To podtrhuje nutnost uvážlivé volby vhodného modelu pro konkrétní projekt ještě před započatím prací, aby mohly být dosaženy optimální výsledky. Podle základní koncepce přístupu k hodnocení kvality vody tak můžeme v této oblasti vidět dvě hlavní skupiny modelů:

- modely pro výpočet v ustáleném stavu proudění
- dynamické modely.

Modely, které pracují v režimu *ustáleného stavu* počítají zadanou soustavu pro jeden definovaný časový okamžik. Tímto momentem může být reálný den v roce, stejně však lze i počítat s hodnotami, vyjadřujícími delší časové období, vyjádřené např. průměrnými hodnotami. To je výhodné zejména při hodnocení standardních časových period, ročních či víceletých průměrů, při simulacích a prognózách dopadu změn znečišťování na kvalitu vody na základě statistických údajů. Nezanedbatelnou výhodou je rovněž menší náročnost na objem vstupních údajů, kterými jsou v případě delších časových období data statisticky předzpracovaná. Značnou předností, vyplývající z charakteru modelu je rovněž menší náročnost na výpočetní výkon. Daní je zde však často menší přesnost a zejména omezenost hodnocení na jeden časový moment. Asi nejrozšířenějším představitelem tohoto typu modelů je americký model QUAL II E, vyvinutý v laboratořích U.S. EPA (United States Environmental Protection Agency). Tento model, široce používaný ve světě i v našich podmínkách si zároveň přiblížíme v následující kapitole.

Druhou skupinu tvoří *dynamické modely*. Ty umožňují simulaci v prostoru a v čase definovaném dle potřeby úlohy. Vstupní údaje zde tvoří časové řady, vztahující se k jednotlivým zdrojům zadané struktury. Data přitom nemusí být u všech zdrojů časově homogenní – model počítá s časovým průnikem hodnot jednotlivých řad. Výsledky modelu potom umožňují sledovat vývoj znečištění v toku v zadaném časovém období a kroku. Zatímco modely ustáleného stavu pracují obvykle s průměrnými či jinak statisticky vymezenými hodnotami, dynamické modely obvykle využívají jako vstupní data reálné hodnoty. To zvyšuje nároky na přesnost zadání a potažmo na celou datovou základnu modelu.

Hlavní předností je zde již zmíněná možnost simulace vývoje jednotlivých jevů ve spojitě časové řadě, možnost přímo zjistit hodnotu zvoleného ukazatele pro konkrétní časový okamžik a bod toku, možnost porovnání vývoje kvality vody v různých obdobích, sledování dopadu změn vnějších vlivů na kvalitu vody aj. Dynamické modely jsou však zároveň velmi náročné na výpočetní výkon. Na rozdíl od modelů, pracujících v ustáleném stavu, pro jejichž provoz postačí běžné osobní počítače, vyžadují tyto modely pro smysluplný provoz již výkonné osobní počítače nebo pracovní stanice. Jedním z modelů tohoto typu, kterému se budeme dále podrobněji věnovat, je model MIKE 11. Tento model, který byl vyvinutý v Dánském Hydraulickém Institutu, doznal značného roz-

šíření zejména v evropských zemích a je mj. základním modelem, používaným pro řešení úloh v rámci Mezinárodní komise na ochranu Labe.

Prezentace výsledků matematického modelování potom závisí na možnostech a schopnostech konkrétního programového modelovacího balíku. Nejběžnější metodou bývá vykreslení grafů podélného profilu toku, kde vypočtené údaje lze kombinovat s reálnými naměřenými hodnotami, popř. výsledky simulací za jiné období. Dynamické modely potom díky spojitě časové řadě výsledků nabízejí možnost animace vývoje znečištění v podélném profilu, kde můžeme buď v krocích nebo v celku sledovat časový vývoj simulovaného jevu. Zajímavou možností v této oblasti představuje propojení výsledkových souborů modelů s geografickým informačním systémem (GIS) Zde mohou být jako výstup použity tematické mapy, kombinující různé možnosti kartografického vyjadřování a zobrazených jevů.

3. Příklady možností využití základních typů matematických modelů

V této části si postupně podrobněji představíme dva modely reprezentující jednotlivé skupiny typů matematických modelů jakosti říční vody: model QUAL 2E, který pracuje v režimu ustáleného stavu, a model MIKE 11 jako představitel dynamických modelů.

Autor záměrně představuje tyto dva vybrané matematické modely, neboť se jedná o patrně nejrozšířenější a u nás v praxi nejvíce používané modely, které zastupují dva zmíněné proudy modelů. Oba modely jsou mj. prakticky používány pro hodnocení kvality vody v povodí Labe v rámci mezinárodního Projektu Labe. Použité ukázky jsou ze studií (Kalinová 1994 a Langhammer, Janský 1995), které byly v rámci Projektu Labe zpracovány ve spolupráci Katedry fyzické geografie a geologie PřF UK Praha a Výzkumného ústavu vodohospodářského TGM Praha.

3.1 QUAL 2E

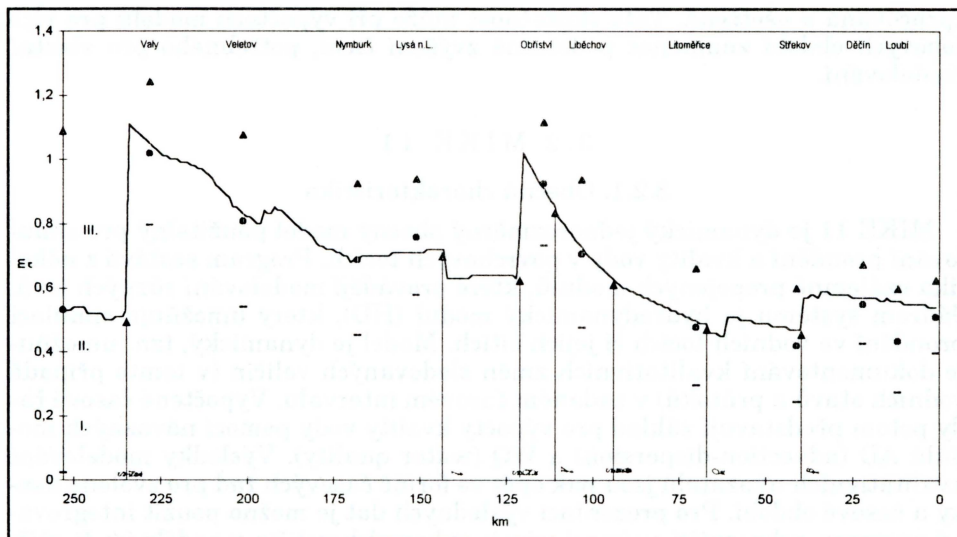
3.1.1 Obecná charakteristika

Programový balík QUAL 2E představuje univerzální model pro simulaci proudění a změny jakosti vody ve vodních tocích při ustáleném stavu.

Umožňuje simulaci celkem 15 ukazatelů jakosti vody při jejich libovolné kombinaci po celé délce vodního toku či říčního systému. Model rozděluje vodní tok na úseky, které mají relativně podobné charakteristiky. Tyto úseky se dále člení na jednotlivé elementy o konstantní délce. Ty pak tvoří základní jednotku pro výpočty.

Topologie morfometrie říčního koryta je zadávána pro jednotlivé úseky. Jsou definovány staničením, spádem čáry energie, Manningovým koeficientem drsnosti a příčným profilem, který je charakterizován šířkou dna a sklonem břehů. Na toku je rovněž možno simulovat existenci jezů a zdrží. Kvalita vody je počítána na základě zadané struktury bodových zdrojů znečištění a odběrů vody. Navíc je možno pomocí zadání přírůstku látkového obsahu z těchto zdrojů definovat pro jednotlivé i plošné zdroje látek.

Pro prezentaci namodelovaných údajů lze použít buď integrovaný program Q2PLOT, anebo je možné údaje z výstupního souboru zpracovat v některém z obecných prostředků pro manipulaci s daty – tabulkovém kalkulátoru (Excel, QuatroPro, atp.) či databázi.



Obr. 1 – Ukázka výstupu podélného profilu koncentrací $N-NH_4$ (Labe, 1994-95). Osa x – vzdálenost v km; osa y – koncentrace v mg/l.

3.1.2 Specifické vlastnosti

Model QUAL2E je autory navržen pro ideální použití na středně velkých tocích s říční sítí stromovitého typu. Tomu odpovídá i poněkud zjednodušená forma popisu topologie morfometrie říčního koryta, která se však při simulaci ustáleného stavu toku řeky velikosti Labe jeví jako vyhovující. Zadání dat je jednoduché. Vzhledem ke skutečnosti, že se všechny údaje vztahují vždy k jednomu časovému okamžiku, je třeba počítat s nutností jejich statistického předzpracování.

K silným stránkám modelu bezesporu patří schopnost simulovat velké množství kvalitativních ukazatelů při minimálních požadavcích na použitý hardware. Rychlost výpočtu je vysoká, což umožňuje operativní ladění celého modelu a celkový rychlý postup prací na modelování.

3.1.3 Potřeba dat pro model QUAL 2E

Data používaná modelem QUAL2, stejně jako jinými modely pro simulování jakosti vody, jsou v podstatě dvojího druhu: data, umožňující hydraulický a hydrodynamický popis koryta a toku a data, popisující emise do toku.

Pro popis topologie toku používá program QUAL následující údaje: staničení úseku, šířku dna koryta, sklon břehů, sklon čáry energie a Manningův koeficient drsnosti. Pro popis jezů pak program používá: staničení jezu, druh přepadu, podíl přepadu přes korunu jezu a koeficient čistoty vody.

Zdroje bodového znečištění jsou stejně jako okrajové podmínky definovány průtokem zdroje a koncentracemi vypouštěných látek. Zdroje plošného znečištění lze zadat jako postupný přírůstek průtoku pro jednotlivé úseky opět společně s koncentracemi jednotlivých ukazatelů. Pro každý úsek lze rovněž měnit nastavení reakčních konstant pro rovnice, použité k simulaci.

Vzhledem k tomu, že se simulace vztahuje vždy k jednomu časovému okamžiku, je nutno data o emisích do toku zadávat do soustavy již statisticky

zpracovaná a ošetřená. Tato skutečnost může při výpočtech modelu pro více časových období znamenat podstatné zvýšení času, potřebného pro vlastní modelování.

3.2 MIKE 11

3.2.1. Obecná charakteristika

MIKE 11 je dynamický jednorozměrný obecný model použitelný pro simulování proudění a kvality vody v povrchových tocích. Program sestává z několika vzájemně propojených modulů, které provádějí modelování různých jevů. Jádrem systému je hydrodynamický modul (HD), který umožňuje simulaci proudění ve vodních tocích či jejich sítích. Model je dynamický, tzn. umožňuje dokumentování kvalitativních změn sledovaných veličin (v tomto případě vodních stavů a průtoků) v zadaném časovém intervalu. Vypočtené časové řady potom představují základ pro výpočty kvality vody pomocí návazných modulů AD (advection-dispersion) a WQ (water quality). Výsledky modelování kvalitativních ukazatelů jsou pak opět ve formě časových řad pro zvolené úseky a časové období. Pro prezentaci výsledných dat je možno použít integrovaný program, zobrazující animaci vývoje vybraných veličin v podélném či příčném profilu v průběhu stanoveného časového úseku s možností výstupu libovolné fáze animace na připojené výstupní zařízení.

Topologie říční sítě a koryta je poměrně precizně definována v modulu HD. Koryto toku je opět určeno prostřednictvím příčných profilů, které jsou definovány jako polygony. Kromě svého tvaru je příčný profil určen ještě staničením, nadmořskou výškou a zeměpisnými souřadnicemi. Při zadání profilu je automaticky vypočítána odpovídající Q-h relace, kterou je možno v případě potřeby manuálně upravit. Drsnost koryta je zadávána nejčastěji jako Manningovo n , je zde však i možnost alternativní definice pomocí Chézyho C . Jezy a zdrže je možno v modelu MIKE 11 definovat různými způsoby, nejčastěji je však používáná přepad přes širokou korunu (broadcrested weir), určený mj. opět definovatelnou Q-h relací.

Model MIKE používá pro definici soustavy staničení, které jako říční kilometr 0 uvažuje pramen řeky. Pro zadávání hydrologických objektů či zdrojů emisí je proto třeba provést přepočítání ze staničení oficiálního do staničení vyžadovaného modelem.

Modul AD provádí simulaci advekce a disperze konzervativních látek a sedimentů. Tvoří součást modulu WQ, kde doplňuje chemickou a biologickou část modelu šíření látek v toku.

Modul WQ umožňuje modelování 5 základních ukazatelů: teploty, BSK_5 , O_2 , NH_3 a NO_3 .

Modelování těchto látek probíhá podle charakteru vstupních dat na 6 úrovních (level 1 – 6) s rozdílným rozsahem simulovaných procesů:

1. $BSK_5 + O_2$
2. $BSK_5 + O_2 +$ proces výměny s organickými sedimenty
3. $BSK_5 + O_2 +$ nitrifikace
4. $BSK_5 + O_2 +$ nitrifikace + denitrifikace
5. $BSK_5 + O_2 +$ nitrifikace + denitrifikace + výměna se sedimentem, rozdělení BSK

6. všechny procesy, zahrnuté v úrovních 1 – 5

Průběh simulace uvedených procesů lze ovlivňovat změnou reakčních konstant a koeficientů použitých při výpočtu. Mimo uvedené ukazatele je možno simulovat šíření dalších polutantů (např. těžkých kovů) v toku jako konzervativních látek.

Údaje o zdrojích znečištění se zadávají ve formě časových řad pro jednotlivé zdroje a ukazatele zvlášť. Jako časová řada se rovněž zadává údaj o objemu vypouštěných látek. Na tuto řadu potom probíhají odkazy z řad obsahujících údaje o koncentraci jednotlivých polutantů. Při výpočtu jsou z těchto časových řad použity údaje, které tvoří průnik s časovým úsekem definovaným v podmínkách pro kalkulaci. Kromě těchto údajů o emisích látek je nutno stejným způsobem definovat okrajové podmínky pro počátek a konec modelovaného úseku a podmínky počáteční – buď globální, tj. s platností pro celý říční systém, nebo specifické pro zvolené úseky.

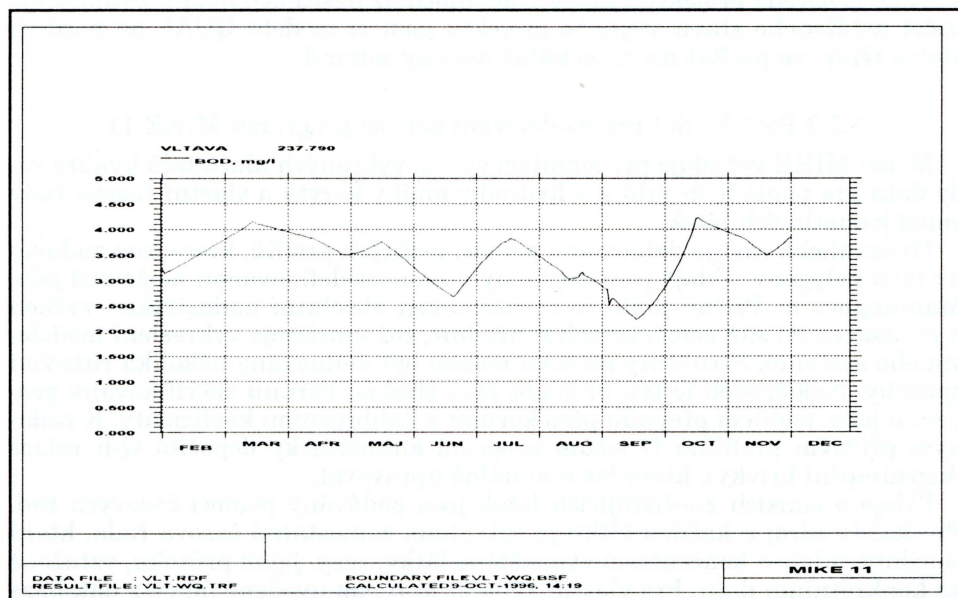
Prezentace výsledků simulace probíhá již zmíněnou formou animace vývoje stavu ukazatele ve zvoleném úseku podélného profilu či v profilu příčném, a to pro zadané časové období. Požadovanou fázi simulace lze vytisknout či vykreslit na připojeném výstupním zařízení, případně je možno soubor uložit s výslednými časovými řadami na disk (viz obr. 2 a obr. 3).

3.2.2 Specifické vlastnosti

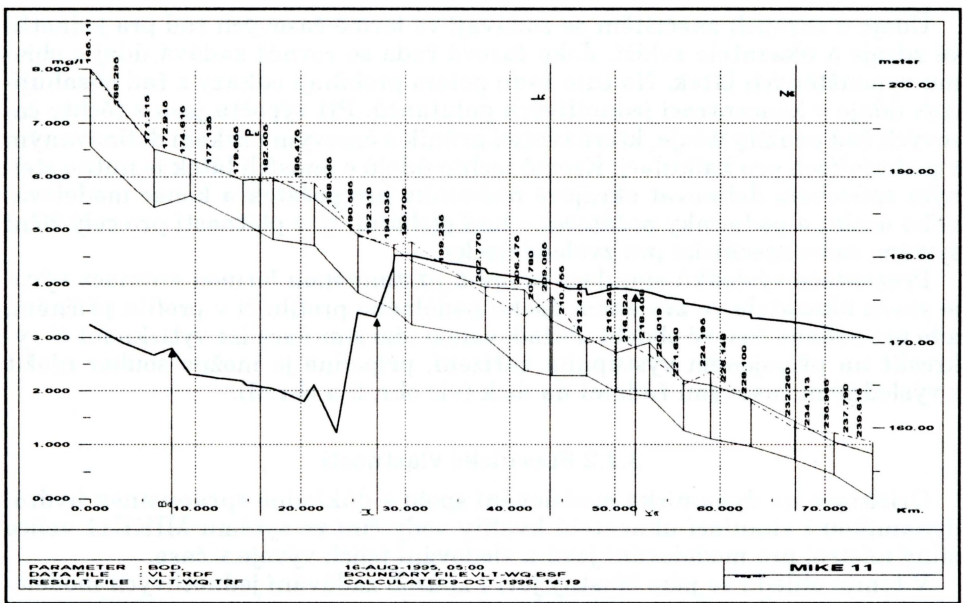
Orientace na dynamické modelování spolu s důkladně zpracovanou hydrodynamikou i simulací ukazatelů kvality vody činí ze systému MIKE11 velice silný nástroj pro modelování jevů a sledování jejich vývoje v čase.

V tomto ohledu se jako šťastný jeví i způsob zadávání jednotlivých modelovaných jevů ve formě časových řad, ze kterých si program pro výpočet sám interpoluje či dosazuje potřebné hodnoty. Ke kvalitnímu znázornění simulovaných jevů v čase přispívá rovněž schopnost spojitého zobrazení hodnoty jevu ve formě animace.

Program MIKE 11 je v současné době provozován na 3 počítačových platformách: UNIX, DOS a Windows. Práce, prováděné v rámci projektů MKOL byly prováděny na verzi pro Windows, proto veškeré údaje a poznatky o tom-



Obr. 2 – Ukázka výstupu časové řady koncentrací BSK₅ v příčném profilu toku (Vltava – Zelčín, 1995). Osa x – měsíce; osa y – koncentrace v mg/l.



Obr. 3 – Ukázka výstupu časové řady koncentrací BSK, v podélném profilu toku (Vltava, 16. 8. 1995). Vodorovná osa – vzdálenost v km; levá svislá osa – koncentrace v mg/l; pravá svislá osa – nadmořská výška v m.

to programu se vztahují k této mutaci. Dynamické modelování klade na rozdíl od modelování ustáleného stavu podstatně vyšší nároky na použitý hardware. Při provozování na počítačích třídy PC je nutno počítat s dobou výpočtu středně složitého projektu řádově v hodinách až desítkách hodin, zatímco výpočet ustáleného stavu stejného projektu pomocí modelu QUAL na počítači stejné třídy lze počítat na maximálně desítky sekund.

3.2.3 Potřeba dat pro modelování pomocí programu MIKE 11

Model MIKE vyžaduje pro simulaci vývoje vybraných ukazatelů kvality vody data pro popis hydrauliky a hydrodynamiky koryta a vlastní časové řady emisí jednotlivých látek.

Hydraulická část je definována pomocí příčných profilů, které jsou zadávány jako polygony. Údaje jsou doplněny o drsnost definovanou nejčastěji jako Manningovo n . Příčný profil je rovněž určen absolutní nadmořskou výškou a je zasazen do sítě zeměpisných souřadnic, což umožňuje vykreslení modelovaného systému. Struktury na toku mohou být definovány několika různými způsoby. Nejběžnější je typ přepadu přes širokou korunu specifikovaný geometrií jezu, podílem přepadu přes korunu a kalibračními koeficienty. K zadaným příčným profilům či jezům program automaticky dopočítá Q-h relace (konsumpční křivky), které lze manuálně upravovat.

Údaje o emisích znečišťujících látek jsou zadávány pomocí časových řad. Pro každý zdroj a každou látku je vytvořena samostatná časová řada, která obsahuje údaje o koncentraci vypouštěné látky, resp. jejím průtoku, vztažené ke konkrétnímu datu. Pro vlastní výpočet jsou pak uvedené údaje z databáze časových řad vybírány přiřazením. Okrajové podmínky jsou definovány jako samostatné časové řady se staničením odpovídajícím počátku, resp. konci sou-

stavy. Počáteční podmínky mohou být zadány v libovolných úsecích; pro nezadané úseky jsou použity nastavené podmínky globální. Reakční koeficienty rovnic lze pro požadované úseky upravovat nebo ponechat hodnoty předem nastavené. Zdroje plošného znečištění zadávat nelze.

Zadávání dat o zdrojích znečištění ve formě časových řad obsahujících reálné hodnoty vztahené ke konkrétním časovým momentům spolu s automatickou interpolací pro výpočet představuje při modelování delšího časového úseku značné zjednodušení práce. Navíc není nutné jednotlivé kvalitativní údaje pro různé zdroje vztahovat ke stejnému časovému období či je statisticky upravovat.

4. Aplikace matematického modelování v praxi

Možnosti využití matematických modelů pro hodnocení jakosti vody v tocích jsou široké a rozmanité. Stejně široká je i škála možností, které tyto nástroje nabízejí. Tak, jako modely samotné sestávají z části hydraulické či hydrodynamické a z části pro výpočet jakosti vody, lze použití modelů rozdělit do těchto dvou skupin, které se ovšem vzájemně doplňují a prolínají.

Použití čistě hydraulického modelu nacházíme zejména v případech hodnocení hydrologického režimu toku, simulaci povodňových vln a jejich šíření, rychlosti proudění a změn vodního stavu toku v čase obecně. To je významné zejména pro oblast vodohospodářského plánování v oblasti protipovodňové ochrany. Lze zkoumat důsledky změn koryta a vlivu regulačních objektů na odtokový režim při standardních i nestandardních situacích, samostatnou oblast představují výpočty rychlostí proudění a dotokových dob apod. Tyto druhy simulací jsou pochopitelně doménou dynamických modelů. Pro názornou prezentaci je zde možno s úspěchem využít možnosti animace časového vývoje jevů v podélném, ale i příčném profilu toku.

Rovněž možnosti aplikace v oblasti hodnocení jakosti vody jsou velice četné a rozmanité. Jako zásadní přínos je třeba vidět možnost sledovat vývoj znečištění v kontinuálním podélném profilu toku a přímý vliv jednotlivých zdrojů znečištění na jakost vody v toku. Modely, pracující v ustáleném stavu lze použít pro bilanční hodnocení delších časových období a změn mezi nimi. Modely dynamické potom představují nezastupitelný nástroj pro sledování vývoje znečištění v čase a v závislosti na měnících se vnějších podmínkách. Umožňují totiž sledovat vývoj koncentrací jednotlivých ukazatelů za měnících se vodních stavů a objemů vypouštění polutantů ze zdrojů, umožňují sledovat závislost výsledné jakosti vody na těchto faktorech a identifikaci zdrojů, rozhodujících pro jakost vody v rozdílných obdobích.

Nenahraditelnou oblast použití potom představuje možnost simulování různých situací a jevů. Je možné s vysokou přesností modelovat účinek změn míry a charakteru znečištění z jednotlivých zdrojů, simulovat účinnost navrhovaných opatření ke snížení emisí či naopak důsledky výpadků či odstavení čistících zařízení. Praktické nasazení matematických modelů tak pokrývá široké pole aplikací od teoretického výzkumu až po rutinní vodohospodářskou praxi. Příkladem může být začlenění metod matematického modelování jakosti vody do prací na Projektu Labe MKOL, kde mají pevné místo mezi klasickými metodami hodnocení kvality vody.

Přes rozsáhlé možnosti, které modelování nabízí, nelze nevidět úskalí, se kterými se řešení konkrétních aplikací potýká. Prvním, a pro další rozvoj této metody zásadním, problémem je otázka zajištění vstupních dat. Vzhledem

k tomu, že modely pracují s daty popisujícími znečištění vypouštěné jednotlivými zdroji, jsou veškeré výsledky přímo závislé na věrohodnosti a správnosti těchto primárních dat. Ta obvykle bývají k dispozici ve formě ročních úhrnů objemů vypouštění několika vybraných látek. Již sám rozsah ukazatelů sledovaných vlastními emitenty bývá velice omezený a nejednotný, pro potřeby výpočtů navíc prakticky ve všech případech očištěný o základní veličiny potřebné pro reakční rovnice – tj. teplotu a obsah rozpuštěného kyslíku. V případě dynamických modelů potom navíc skutečnost, že zdroj, jehož emise v průběhu roku kolísají, je za toto období popsán jediným číslem, degraduje navíc schopnost modelu a věrohodnost výsledků. Ty jsou pak de facto závislé pouze na změnách vodního stavu. Nekompletnost a nehomogenita vstupních údajů tak zanáší do celého výpočtu nevyhnutelné chyby, které mohou výrazně ovlivnit celkovou spolehlivost výsledků.

Určitý kvalitativní posun a vývoj však bezesporu čeká i na modely samotné. Jejich softwarové provedení je totiž ve většině případů poplatné okolnostem jejich vzniku a vývoje – jedná se většinou o prosté přenesení modelu ze sálových systémů do prostředí osobních počítačů bez využití výhod, které dnešní operační systémy nabízejí. Zatímco vlastní výpočetní jádro bývá postaveno na robustních a ověřených numerických metodách, ošetření běhu programu, datová kompatibilita a uživatelské rozhraní pak za vlastním systémem výrazně zaostávají. Naprosto nedostatečná bývá datová slučitelnost modelu s obecnými softwarovými produkty pro manipulaci s daty (databázemi a spreadsheetsy), a to jak na úrovni vstupů, tak výstupů. Nedostatečné programové ošetření krizových momentů běhu simulace a často často přímo odstrašující uživatelské rozhraní neusnadňující ani nejzákladnější úkony potom uživatele spíše odradí než motivuje k rutinní práci. Současný bouřlivý vývoj na poli výpočetní techniky, který provozování těchto modelovacích balíčků zpřístupnil širšímu okruhu uživatelů, je však zároveň i jistou zárukou jejich dalšího vývoje: od odstranění “kosmetických” vad až po hlubší provázanost a integraci s ostatními produkty, zejména v oblasti správy dat a jejich prezentace.

Bude bezesporu zajímavé sledovat, jakým směrem se budou v blízké i vzdálenější budoucnosti matematické modely pro hodnocení jakosti vody vyvíjet. Lze předpokládat, že si udrží a upevní pozici mezi standardními metodami pro hodnocení kvality vody, především však v oblasti simulací a predikce změn a vývoje kvality vody, stejně jako prostředky pro doplnění a hlubší analýzu rutinního sledování a vyhodnocování kvality vody v tocích.

Literatura:

- Akční program Labe. MKOL, Magdeburg, 1995.
BROWN, L. C., BARNWELL, T. O. (1987): The enhanced stream water quality models QUAL2E and QUAL2E-UNCAS: documentation and user manual. U. S. Environmental Protection Agency, Athens, U.S.A.
Durchführbarkeitsvorstudie für einen Teil des Elbebeckens. Dorsch Consult, München, 1993.
Hydrologická ročenka České republiky 1993. ČHMÚ, Praha, 1994.
KALINOVÁ, M. (1994): Modelování jakosti vody Labe v podélném profilu programem QUAL 2. VÚV TGM, Praha.
LANGHAMMER, J., JANSKÝ, B. (1995): Modelování kvality vody v podélném profilu toku Labe v období 1993-94. PrF UK, Praha.
LANGHAMMER, J. (1996): Problematické úseky velkých toků – modelování kvality vody v Labi a Vltavě v období 1994-95. PrF UK, Praha.

- MEDULOVÁ, V., TOMANOVÁ, M. (1994): Modelování Vltavy a Labe programem QUAL 2. VÚV TGM, Praha.
- MIKE 11 – A Microcomputer based model system for rivers and channels. DHI, Horsholm, 1992.
- SYNÁČKOVÁ, M. (1994): Čistota vod; ČVUT, Praha.
- Zpráva o jakosti vody v Labi 1990-91. MKOL, Magdeburg, 1992.
- Zpráva o jakosti vody v Labi 1993. MKOL, Magdeburg, 1994.

Summary

ASSESSMENT OF WATER QUALITY AND ITS CHANGES: THE ROLE OF MATHEMATICAL MODELLING

Mathematical modelling of water quality is a relatively recent, yet rapidly developing method of assessment of water quality and its changes (both in cross- and lengthwise-profile). It is based on simulation of water movement in the river bed and on consequent modelling of changes and diffusion of pollutants. First, a morphometric image of the river bed – a simplified picture of existing water course or water network – is created. The water course is defined by a number of cross-profiles, by the slope of water body and by the morphology of weirs, reservoirs, etc. The water quality itself is then calculated on the base of hydrodynamic part of the model. The latter is defined by the network of pollution sources, their location, quantity of pollutants, and their chemical composition. The water quality results from a series of hydraulic and chemical equations which describe general conditions of diffusion of material elements in the water. Different coefficients are used in each specific case.

Mathematical modelling results in a continuous lengthwise-profile of water quality with desired parameters. It spots different pollution sources and their impact on water quality. Static models are calculated for one specific moment; dynamic models are based on repeated simulations over a certain period of time. The latter help to trace changing patterns of different phenomena.

The ability to simulate is among the best features of models. As a result, one can predict water quality changes under different external conditions (water level, quantity of pollutants released). Models show high reliability as concerns the estimated impact of implementation or abolition of sewage plants, etc. Hazardous situations can also be simulated.

The spread of mathematical modelling has been enabled by general progress in computing science. Thus, modelling is likely to become increasingly important. The modelling software will undergo changes, too; it will become more integrated. Various new applications, for instance in the field of GIS, are likely to emerge soon.

Fig. 1 – Lengthwise-profile of N-NH_4 concentration (the Elbe, 1994-95). X axis – distance (km); y axis – concentration (mg/l).

Fig. 2 – BCO_5 concentration over different periods of time, cross-profile (Vltava, Zelčín, 1995). X axis – months; y axis – concentration (mg/l).

Fig. 3 – BCO_5 concentration, lengthwise-profile (Vltava, August 16, 1995). X axis – distance (km); y axis: *left* – concentration (mg/l), *right* – altitude above sea level (metres).

(Pracoviště autora: katedra fyzické geografie a geoekologie Přírodovědecké fakulty UK, Albertov 6, 128 43 Praha 2.)

Do redakce došlo 14. 4. 1997

Lektorovali Bohumír Janský a Eva Skořepová