

Rezumatul tezei de doctorat

(redactată original în limba engleză)

MSc. Elisabeta – Cristina Ani

**Modelarea transportului poluanților în
râuri: abordare din perspectiva ingineriei
de proces**

Îndrumător:

Prof. Univ. Paul Șerban Agachi, Babeş-Bolyai University, Cluj-Napoca, România

Referenți:

Prof. Univ. Andrzej Kraslawski, Lappeenranta University of Technology, Finlanda

Prof. Univ. Delia Perju, Universitatea “Politehnica” Timișoara, România

Conf. Simion Drăgan, Universitatea Babeş-Bolyai, Cluj-Napoca, România

Doctor Michael Hutchins, Centre for Ecology and Hydrology, Wallingford, Anglia

Data susținerii publice: 30 Septembrie 2010

Abstract

Această lucrare tratează problema importantă a poluării râurilor și a propagării poluanților, care trebuie abordată cu ajutorul unor unelte de predicție (modele pentru transportul poluanților) pentru a dezvolta sisteme de evaluare a poluării, de contracarare a acesteia și pentru luarea deciziilor de management corecte. Acest domeniu de cercetare a cunoscut un progres extraordinar, în special în ultimii 15 ani: campanile de monitorizare beneficiază de sprijin tehnologic performant, instrumente de prelucrare a datelor sunt în măsură să proceseze cantități impresionante de date; noi metode de calcul a parametrilor cu o precizie mai bună au fost propuse și, nu în ultimul rând, metodele de modelare au fost îmbunătățite. Cu toate acestea încă există probleme importante care necesită o atenție deosebită a cercetătorilor: de exemplu tehnicile de estimare a parametrilor; aplicabilitatea mai largă și transferabilitatea modelelor matematice între studiile de caz sau utilizarea de software nou. În plus, există și posibilitatea dezvoltării abordării actuale cu privire la modelarea calității apei utilizând cunoștințele și experiența din domeniul ingineriei de proces. Teza de față este menită să abordeze probleme de acest gen.

Obiectivul principal al tezei este acela de a dezvolta o abordare cuprinzătoare specifică ingineriei de proces privind modelarea transportului poluanților în râuri prin utilizarea de metode și instrumente din diferite domenii.

Principalele contribuții personale ar putea fi rezumate ca fiind compuse din mai multe instrumente și tehnici ce pot fi utilizate în modelarea transportului poluanților în râuri.

- Dezvoltarea de modele analitice și numerice pentru predicția transportului poluanților pentru trei studii de caz în care: există foarte puține studii axate pe calitatea apei (râul Someș); modele matematice detaliate nu sunt disponibile pentru predicția transportului poluanților (râul Swale), sau numai un scurt fragment de râu a fost investigat (pârâul Murray Burn). Modelele de advecție-dispersie dezvoltate au un nivel diferit de complexitate: de la modele simple conservative pentru un fragment scurt de pârâu (540 m), care prezintă un poluant; la un model complicat neconservativ pentru un segment mai mare de râu (50.4 km), incluzând poluanți multipli cu transformări interdependente. Modele pentru transportul poluanților sunt capabile să simuleze accidente și, de asemenea, poluarea în condiții normale.
- Două noi tehnici care permit utilizarea de parametri variabili de-a lungul râurilor în modelele analitice sunt implementate în aceste modele. Acestea permit includerea

influențelor (agenți poluatori, afluenți, abstracții de apă) la locația reală de-a lungul râului; reprezentarea neuniformității râului și aplicarea modelelor deja validate pentru alte râuri.

- Dezvoltarea unor modele pentru estimarea parametrilor caracteristici transportului poluanților (viteza, coeficientul de dispersie și constantele de transformare a nutrienților) ca funcții de debitul de apă, caracteristicile albiei și/sau sezonabilitate sunt, de asemenea, un rezultat important al acestei teze. Ele aduc cunoștințe suplimentare despre studiile de caz investigate, deoarece investigații detaliate similare nu au fost efectuate pentru cele trei râuri investigate.
- Mai mult decât atât cunoștințele existente și rezultatele sunt cuprinse într-o abordare cuprinzătoare caracteristică ingineriei de proces.

Principalele contribuții, împreună cu o analiză a literaturii din domeniul modelării calității apei sunt prezentate de-a lungul a trei secțiuni ale tezei, cuprinzând în total 13 capitole, la care se adaugă o secțiune suplimentară concluziile și contribuțiile personale. Referințele citate sunt enumerate la sfârșitul tezei împreună cu nomenclatura. Rezultatele obținute în cadrul acestei teze de doctorat, împreună cu alte rezultate legate de modelarea transportului poluanților (de exemplu, utilizarea tehnicilor de management al informației) au fost prezentate în nouăsprezece publicații, de asemenea, enumerate în teza.

Cuvinte cheie: modelarea transportului poluanților în râuri; parametrii de advecție-dispersie; coeficient de dispersie; transport convectiv-dispersiv; transformări nutrienți.

Cuprinsul tezei

Abstract	2	
Cuvinte cheie	3	
Mulțumiri	4	
SECTION 1. PREZENTARE GENERALĂ	8	
1. Prezentarea generală a tezei	8	
1.1. Problema abordată	8	
1.2. Obiectivele tezei și structura	9	
1.3. Publicații relaționate cu teza	10	
2. Scurt glosar al termenilor	14	
3. Segmente de râu investigate și date experimentale utilizate	7	
3.1. Specificații importante	17	
3.2. Pârâul Murray Burn (Scoția)	18	
3.3. Râul Swale (Anglia)	19	
3.4. Râul Someș (Romania)	23	
SECTION 2. SUPORT DE LITERATURĂ ȘI CONTRIBUȚIILE TEZEI	29	
4. Bazele modelării transportului poluanților în râuri	29	
4.1. Principale abordări în modelarea transportului poluanților	29	
4.2. Abordarea utilizată: advecție – dispersie Fickiană	31	
4.3. Modelarea deversărilor din diferite tipuri de surse	35	
4.4. Modelarea diferitelor tipuri de poluanți	45	
4.5. Parametrii hidraulici și ai transportului de masă	51	
4.6. Criterii adimensionale	73	
5. Realizări în domeniul modelării calității apelor râurilor	76	
5.1. Privire de ansamblu și principalele direcții de cercetare	76	
5.2. Parametrii de transport și sursele de poluare	77	
5.3. Modelarea transportului poluanților și unelte suport	79	
5.4. Software pentru modelarea transportului poluanților	82	
5.5. Studii bazate pe modelele și softurile existente	83	
5.6. Publicații referitoare la nutrienți	84	
6. Cercetarea relativ la cele trei studii de caz	87	
6.1. Murray Burn	87	
6.2. Râul Swale	87	
6.3. Râul Someș	90	
SECTION 3. CONTRIBUȚII PERSONALE	92	
7. Descrierea principalelor contribuții și a noutății tezei	92	
7.1. Privire de ansamblu	92	
7.2. Metodologia sistemică de modelare matematică	94	
7.3. Rezultate cu privire la tehnicile de modelare	96	
7.4. Estimarea parametrilor	99	
8. Noutate în descrierea râurilor investigate	100	
8.1. Abordarea clasică	101	
8.2. Abordarea nouă 1	102	
8.3. Abordarea nouă 2	102	
9. Modelarea și simularea transportului poluanților în Murray Burn	103	
9.1. Parametrizarea râului folosind abordarea clasică	103	
9.2. Metodologia de modelare	105	
9.3. Calculul ab-initio al parametrilor	107	
9.4. Valorile optime ale parametrilor	109	
9.5. Modele pentru estimarea parametrilor	111	
9.6. Rezultatele calibrării	118	
9.7. Rezultatele evaluării	120	
9.8. Concluzii	125	

10. Abordarea caracteristică ingineriei de proces aplicată asupra modelurii transportului poluanților în Murray Burn	127
10.1. Metodologie	127
10.2. Rezultatele modelelor de estimare a parametrilor	129
10.3. Rezultate pentru predicția concentrației	136
10.4. Concluzii	140
11. Modelarea și simularea transportului poluanților în râul Swale	141
11.1. Aplicarea QUESTOR pentru râul Swale	142
11.2. Metodologia pentru dezvoltarea ADModel	146
11.3. ADModel: rezultate și discuții	156
11.4. Rezultatele ADModel pentru compușii azotului: discuții largi	167
11.5. Concluzii	172
12. Modelarea și simularea transportului poluanților în râul Someș	174
12.1. Considerații de bază	174
12.2. Studiu de poluare a râului Someș	175
12.3. Selectarea segmentului de râu pentru modelare	178
12.4. Estimarea parametrilor pentru modelare	179
12.5. Modelarea analitică a transportului poluanților	180
12.6. Parametrii variabili vs. constanți în modele analitice	180
12.7. Verificarea abordării noi de parametrizare	184
12.8. Concluzii	186
13. Abordarea specifică ingineriei de proces: discuții pe larg	188
13.1. Modele analitice vs. modele numerice	188
13.2. Complexitatea și eficiența modelelor	190
13.3. Probleme legate de estimarea parametrilor	195
13.4. Utilizarea rezultatelor tezei și perspective	197
SECTION 4. CONCLUZII ȘI CONTRIBUȚII PERSONALE	200
Concluzii	200
Contribuții personale	201
BIBLIOGRAFIA	204
NOMENCLATURA	234
ANEXE	239

SECTION 1. PREZENTARE GENERALĂ

Prezentare generală a tezei

Problema abordată

În ultimii ani interesul general asupra menținerii calității mediului a crescut considerabil. Acest lucru se datorează o nevoii de a asigura disponibilitatea de resurse pentru generațiile viitoare, prin dezvoltarea durabilă. În domeniul apelor de suprafață multe probleme sunt cauzate de deversarea poluanților. Multe râuri și în special acelea care traversează zone locuite sunt supuse la descărcarea de substanțe poluante. Prin urmare, managerii au nevoie de sprijinul unor instrumente fiabile pentru evaluarea calității apei și pentru a anticipa consecințele deciziilor lor. Această problemă poate fi abordată prin utilizarea unor instrumente pentru estimarea computațională a concentrației poluanților. Ele sunt principala preocupare a acestei teze.

Acest domeniu de cercetare a cunoscut un progres extraordinar, în special în ultimii 15 ani: campaniile de monitorizare beneficiază de sprijin tehnologic performant, instrumente de prelucrare a datelor sunt în măsură să proceseze cantități impresionante de date; noi metode de calcul a parametrilor cu o precizie mai bună au fost propuse și, nu în ultimul rând, metodele de modelare au fost îmbunătățite. Cu toate acestea încă există probleme importante care necesită o atenție deosebită a cercetătorilor: de exemplu tehnicile de estimare a parametrilor; aplicabilitatea mai largă și transferabilitatea modelelor matematice între studiile de caz sau utilizarea de software nou. Pe de altă parte, există posibilitatea de a dezvolta abordarea actuală privind modelarea calității apei utilizând cunoștințele și experiența din domeniul ingineriei de proces.

Obiectivele tezei și structura

Obiectivul principal al tezei este acela de a dezvolta o abordare cuprinzătoare specifică ingineriei de proces privind modelarea transportului poluanților în râuri prin utilizarea de metode și instrumente din diferite domenii.

Obiectivele secundare sunt următoarele:

- O 1. Dezvoltarea, calibrarea și validarea de modele matematice pentru transportul poluanților în segmente de râu.
- O 2. Oferirea de instrumente pentru modelare (e.g. metode pentru descrierea râurilor; modele pentru estimarea parametrilor) pentru o varietate largă de studii de caz.

O 3. Înglobarea cunoștințelor existente și a rezultatelor într-o abordare cuprinzătoare specifică ingineriei de proces asupra modelării transportului poluanților.

Această teză este organizată în trei secțiuni, care cuprinde în total 13 capitole, la care se adaugă o secțiune suplimentară care conține concluziile și contribuțiile personale. Referințele citate sunt enumerate la sfârșitul tezei împreună cu nomenclatura.

- Prima secțiune oferă o imagine de ansamblu asupra tezei constând dintr-o prezentare generală a tezei (capitolul 1); un glosar scurt de termeni (capitolul 2); și prezentarea râu secțiunilor de râu investigate (Capitolul 3). O listă de publicații în care autorul a prezentat rezultatele din această teză de doctorat este de asemenea inclusă în această secțiune.
- A doua secțiune conține prezentarea fenomenologiei transportului poluanților în râuri (capitolul 4) și analiza literaturii de specialitate din domeniul modelării calității apei râurilor (Capitolul 5). De asemenea literatura ce are ca subiect cele trei studii de caz este și ea prezentată (Capitolul 6).
- A treia secțiune cuprinde contribuțiile personale. Primul său capitol (7) descrie pe scurt contribuțiile principale ale acestei teze și subliniază noutatea lor față de cercetările anterioare. Următoarele șase capitole descriu câte categorie de rezultate: tehnicile utilizate în parametrizarea râurilor (capitolul 8); modelarea analitică și numerică a transportului de poluanți în Murray Burn folosind mijloace clasice (capitolul 9); abordarea specifică ingineriei de proces aplicată pentru Murray Burn (Capitolul 10); folosirea acestor rezultate, împreună cu noile descoperiri pentru modelarea de transportului poluanților în râul Swale (Capitolul 11) și râul Someș (Capitolul 12); urmată de discuții mai ample privind abordarea specifică ingineriei de proces asupra modelării transportului poluanților (capitolul 13).

Publicații relaționate cu teza

Articole în jurnale cotate ISI

1. **Ani, E.C.**, Avramenko, Y., Kraslawski, A., Agachi, P.Ș., 2010. Identification of pollution sources in Romanian Someș River using graphical analysis of concentration profiles. *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, in press.
2. **Ani, E.C.**, Hutchins, M.G., Kraslawski, A., Agachi, P.Ș., 2010. Mathematical model to identify nitrogen variability in large rivers. *River Research and Applications*, 26, 1-21.
3. **Ani, E.C.**, Cristea, V.M., Agachi, P.Ș., Kraslawski, A., 2010. Dynamic Simulation of Someș River Pollution Using MATLAB and COMSOL Models. *Revista de Chimie*, 61.

4. **Ani, E.C.**, Hutchins, M.G., Kraslawski, A., Agachi, P.Ş., 2010. Assessment of pollutant transport and river water quality using mathematical models. *Revue Roumanie de Chimie*, 55, 4, 285-291.
5. **Ani, E.C.**, Wallis, S.G., Kraslawski, A., Agachi, P.Ş., 2009. Development, calibration and evaluation of two mathematical models for pollutant transport in a small river. *Environmental Modelling and Software*, 24, 10, 1139-1152.
6. Avramenko Y., **Ani, E.C.**, Kraslawski A., Agachi P.Ş., 2009. Mining of graphics for information and knowledge retrieval. *Computers and Chemical Engineering*, 33, 3, 618-627.

Lucrări la conferințe internaționale citate (ISI proceedings)

7. **Ani, E.C.**, Wallis, G., Kraslawski, A., Agachi, P.Ş., 2009b. Detailed mathematical model for pollutants transport in a natural stream. *Computer Aided Chemical Engineering*, 26, 731-736. (ISSN 1570-7946, 19th European Symposium on Computer Aided Process Engineering (ESCAPE 19), June 2009, Cracow, Poland).
8. **Ani, E.C.**, Avramenko, Y., Kraslawski, A., Agachi, P.Ş., 2009c. Selection of models for pollutants transport in river reaches using case based reasoning. *Computer Aided Chemical Engineering*, 27, 537-542. (ISSN 1570-7946, 10th International Symposium on Process Systems Engineering (PSE 2009), August 2009, Salvador, Bahia, Brazil).

Cărți

9. **Ani, E.C.**, 2009. *Minimization of the experimental workload for the prediction of pollutants propagation in rivers. Mathematical modelling and knowledge re-use.* Acta Universitatis Lappeenrantaensis 355, Lappeenranta teknillinen yliopisto, Digipaino, Lappeenranta, Finland, ISBN 978-952-214-829-2, pp. 189.

Rapoarte tehnice în cărți

10. **Ani, E.C.**, 2009. Research report: I. The identification of pollution sources from long term monitoring data. II. The reuse of knowledge in modelling pollutant transport in rivers. In: Ljung, M. (Ed.), *Yearbook 2009, Graduate School in Chemical Engineering.* Abo Akademi University, Turku, Finland, ISSN 1238-2647, 23-32.
11. **Ani, E.C.**, 2008. Research report: Propagation of pollutants and availability of high quality water in a river basin - case of Someș Basin Rivers. In: Ljung, M. (Ed.), *Yearbook 2008, Graduate School in Chemical Engineering.* Abo Akademi University, Turku, Finland, ISSN 1238-2647, 21-30.

12. **Ani, E.C.**, 2007. Research report: Propagation of pollutants and availability of high quality water in a river basin as supply chain management - case of Someș Basin rivers. In: Ljung, M. (Ed.), *Yearbook 2007, Graduate School in Chemical Engineering*. Abo Akademi University, Turku, Finland, ISSN 1238-2647, 19-27.

Articole publicate în volume la conferințe internaționale (Conference Proceedings)

13. **Ani, E.C.**, Hutchins, M.G., Agachi, P.Ș., 2010. Advection-dispersion model for nutrient dynamics in River Swale. In: Carrera, J., Sanchez-Vila, X., Fernandez-Garcia, D., Bolster, D. (Eds.), *Programme and Proceedings of the XVIII Conference on Computational Methods in Water Resources (CMWR 2010)*, June, 21-24, 2010, Barcelona, Spain, Dsignum Estudi Gràfic, ISBN 978-84-96736-93-1, p. 39, paper 276.
14. **Ani, E.C.**, Agachi, P.Ș., 2007. Numerical models to simulate pollution scenarios in Someș River. Paper 2029 in: Gani R. and Johannsen D.J, *6th European Congress of Chemical Engineering (ECCE-6) Proceedings book*, September, 16-21, Copenhagen, Denmark, ISBN 978-87-91435-57-9, <http://www.ecce6.kt.dtu.dk/>, Vol. 1, 985.

Articole prezentate la alte conferințe

15. Avramenko Y., **Ani, E.C.**, Kraslawski A., Agachi P.Ș., 2010. Identification of pollution sources in rivers using the graphical analysis of concentration profiles. 19 International Congress of Chemical and Process Engineering *CHISA 2010* and the 7 European Congress of Chemical Engineering *ECCE-7*. August 28 – September 1, Prague, no. 1392.
16. Avramenko Y., **Ani, E.C.**, Kraslawski A., Agachi P.Ș., 2009b. Mining of graphics for the assessment of pollution sources along the river. *Computer Aided Process Engineering Forum (CAPE Forum) 2009*, March, 27-28, Limerick, Ireland.
17. **Ani, E.C.**, Kraslawski, A., Hutchins, M.G., Agachi, P.Ș., 2009. The models for pollutant transport in rivers as decision support tools for the rational management of the river water quality. *International Forum-Competition of Young Researchers. Topical Issues of subsoil usage. WG 8*, April, St. Petersburg State Mining Institute, Russia.
18. **Ani, E.C.**, Kraslawski, A., Agachi, P.Ș., 2008. Pollutant transport characterization as a function of river characteristics and pollutant release type. OP. 3.5., *Computer Aided Process Engineering Forum (CAPE Forum) 2008*, February, 7-8, Thessaloniki, Greece.
19. **Ani, E.C.**, Cristea, V.M., Agachi, P.Ș., 2007. Dynamic simulation of Someș river pollution using MATLAB and COMSOL models. *10th Edition of Academic Days of Timișoara*, May, 24-25, Timișoara, Romania.

Segmente de râu investigate și date experimentale utilizate

Modelele complete și eficiente de transport a poluanților, în special cele bazate pe ecuația fundamentală de advecție-dispersie (convecție-dispersie) pentru transportul de masă în râuri (ADE), necesită o cantitate mare de date experimentale din râuri diferite. Pentru a îndeplini această cerință teza de față utilizează date experimentale colectate în trei râuri de mărime diferită, după cum se poate observa în Tabelul 1.

Tabelul 1. Caracteristici ale the investigated rivers stretches and available field data.

Râul	Murray Burn	Swale	Someș
Locația	Edinburgh, UK	Yorkshire, UK	Transylvania, RO
Lungimea investigată [km]	0.54	50.4	421
Lățimea [m]	2.4 – 3.9	26 – 43	4 – 115
Aspectul canalului	Canal de pârâu de deal cu aspect natural	Canal combinat: aspect natural și porțiuni betonate	
Surse de poluare	Infiltrarea apei prin maluri	Surse de poluare multiple și afluenți	
Campaniile de monitorizare	26 de experimente pentru deversare instantanee punctiformă	10 campanii pentru condiții normale (de la debit mic la furtună)	60 de campanii de monitorizare uzuale efectuate lunar
Puncte de monitoring	4 în albia principală	4 în albia principală 3 în afluenți	12 în albia principală
Parametrii monitorizați	Rodamină WT	4 nutrienți Debit, adâncime (uneori)	25 indicatori calitate Debit
Rezoluție monitoring	secunde	o oră	Lunar
Sursă date	Heriot Watt University, Edinburg, Scoția	Centre for Ecology and Hydrology, Wallingford, Anglia	Administrația Națională Apele Române – Administrația Bazinală de Apă Someș-Tisa, Cluj (ABAST)

Datele experimentale utilizate constau în: (1) șiruri de măsurători în timp și/sau spațiu pentru parametrii de calitate a apei (de exemplu: concentrația poluanților, pH-ul apei, oxigenul dizolvat) și (2) măsurători ale caracteristicilor albiei (de exemplu: debitul apei, panta râului, lățimea râului), care sunt folosite pentru a reprezenta canalul (profilul râului).

SECTION 2. SUPORTUL DE LITERATURĂ ȘI CONTRIBUȚIILE TEZEI

Abordarea Fickiană advection-dispersivă prezentată în teza de față se bazează pe transportul de masa convectiv-difuziv în apele curgătoare. Instrumentul utilizat pentru modelarea matematică este ecuația fundamentală de advecție-dispersie (ADE). ADE este o ecuație cu derivate parțiale (PDE) obținută prin aplicarea bilanțului de masă la o unitate de volum de masă din râu (Socolofsky și Jirka, 2005). Modelele de transport a poluanților dezvoltate în cadrul acestei teze se bazează pe forma uni-dimensională (1D) a ADE pentru direcția longitudinală (ecuația 1), care ia în considerare sursele și consumul de poluant, împreună cu mecanismele de transport.

$$1) \quad \frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial(cV_x)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + S_s \pm S_t$$

Evoluția concentrației poluantului (c [mg/L]) în timp (t [s]) de-a lungul râului (x [m]) este influențată de viteza convectivă a apei (V_x [m/s]), care poartă poluantul în aval, și de coeficientul de dispersie longitudinală (D_x [m²/s], de aici încolo folosit și sub numele de coeficient de dispersie), care este responsabil de împrăștierea poluantului în albia râului. S_s ([mg/L]) reprezintă sursele de poluant (ex: obiective industriale, stații de epurare, deversări de ape uzate); iar S_t ([mg/L]) înglobează transformările pe care le suferă poluantul în timpul transportului.

Această formă 1D a ADE este aplicabilă numai după ce perioada Fickiană este atinsă: speciile chimice sunt uniform amestecate în cele două direcții ale profilului transversal al canalului. D_x înglobează aici efectul combinat al difuziei (amestecarea produsă de mișcarea browniană și turbulențe), dispersiei (amestecarea prin variații ale vitezei) și variația în spațiu a advecției longitudinale (Wallis and Manson, 2004; Liu, 1977).

Modele matematice propuse în această teză (capitolele 8-11) au niveluri diferite de complexitate și sunt capabile să simuleze transportul poluanților proveniți din diferite tipuri de surse de poluare. Modele sunt de două feluri: (1) modele numerice, care implică rezolvarea PDE în sine (1D ADE) prin metode numerice, implementate în Comsol Multiphysics (care utilizează metoda elementelor finite); și (2) modele analitice, care utilizează soluțiile analitice ale ADE (soluții explicite din literatura de specialitate, de exemplu: Chin, 2006; Socolofsky și Jirka, 2005; Pujol și Sanchez-Cabeza, 2000), implementate în MATLAB. Pentru

exemplificare se prezintă ecuația 2 (Fischer et al., 1979) care este soluția analitică a ADE pentru o injecție instantanee a unei mase de traser.

$$2) \quad c(x,t) = \frac{M}{A\sqrt{4\pi t D_x}} \exp\left(-\frac{(x - (x_s + V_x t))^2}{4D_x t} - kt\right)$$

unde c este concentrația traserului în râu [mg/L]; x este distanța de-a lungul râului [m]; t este timpul scurs de la deversare [s]; M este masa deversată [g]; A este aria transversală udată a canalului [m²], D_x este coeficientul de dispersie [m²/s], V_x este viteza apei [m/s], x_s este locația sursei [m], iar k este constanta vitezei de transformare [1/s].

Această secțiune (2) a tezei se referă la aspecte fundamentale legate de transportul poluanților în râuri. Scurta prezentare a fenomenologiei împreună cu ecuațiile de bază și parametrii care o descriu sunt prezentate în primul capitol, în timp ce ultimele două capitole acoperă prezența sa în literatura de specialitate: realizările și nevoile legate de modelarea transportului poluanților în râuri, incluzând cele trei studii de caz considerate de teza de față. Studiul de literatură este unul extins datorită preocupărilor intense care există față de acest domeniu, dar și faptului că această teză prezintă o abordare complexă asupra modelării transportului poluanților cu ajutorul ADE. Capitolele oferă de asemenea o privire asupra realizărilor tezei comparativ cu rezultatele deja existente, deschizând calea pentru secțiunea următoare a tezei, care conține mai multe detalii despre rezultate și noutatea lor.

SECTION 3. CONTRIBUȚII PERSONALE

Noutate în descrierea lungimilor de râu investigate

Acest capitol prezintă răspunsul la mai multe provocări în ceea ce privește modelele analitice pentru transportul poluanților în râuri: (1) reprezentarea neuniformității albiei râului; (2) includerea influențelor (afluenți, surse de poluare, preluări de apă); și (3) aplicarea modelelor existente pentru alte râuri. Pentru a ține seama de neuniformitățile albiei râului investigat majoritatea modelelor analitice pentru transportul poluanților utilizează o abordare clasică pentru a descrie un râu. Acest lucru presupune divizarea lungimii în fragmente de râu (asemenea reactoarelor cu amestecare perfectă dispuse în cascadă) care sunt caracterizate prin valori medii constante ale parametrilor (Fig. 1).

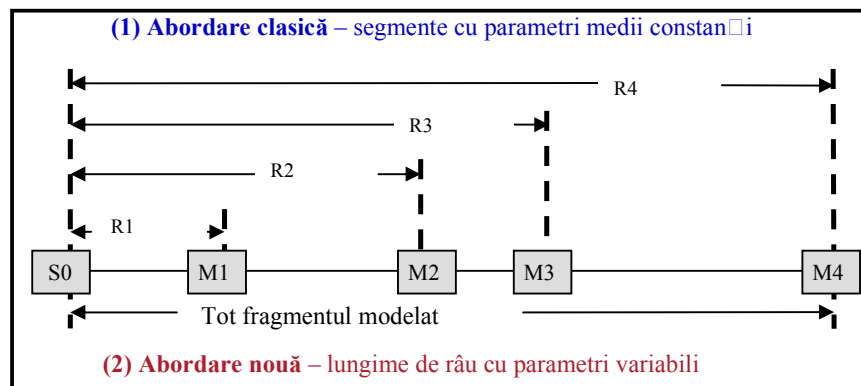


Fig. 1. Opțiuni pentru descrierea râului, în modelele analitice, exemplificate pentru Murray Burn (S0 = sursa de poluare; M1 to M4 = puncte de monitoring; R1 to R4 = segmente de râu).

În contrast cu modelele anterioare o caracteristică importantă a modelelor analitice prezentate în această teză este faptul că parametrii sunt variabili de-a lungul râului modelat, ca urmare a aplicării a două noi abordări utilizate pentru a parameteriza lungimea de râu investigată (Fig. 1). Acestea permit amplasarea influențelor la distanța reală de-a lungul râului și deschid posibilitatea implementare a surselor difuze de poluare utilizând modele deja validate pentru sursele punctiforme. Acesta este un avans important în modelarea analitică, deoarece datele experimentale referitoare la sursele punctiforme sunt mult mai ușor de colectat în comparație cu datele pentru sursele difuze.

Modelarea și simularea transportului poluanților în Murray Burn

Obiectivele acestui capitol sunt: (1) dezvoltarea, calibrarea și evaluarea a două tipuri de modele matematice pentru deversarea instantanee de poluant în Murray Burn; și (2) dezvoltarea unor modele de evaluare a vitezei și coeficienților de dispersie. Cele două modele matematice sunt: un model analitic în Matlab și un model numeric în Comsol. Ambele modele au fost calibrate și evaluate după metodologia prezentată în Fig. 2.

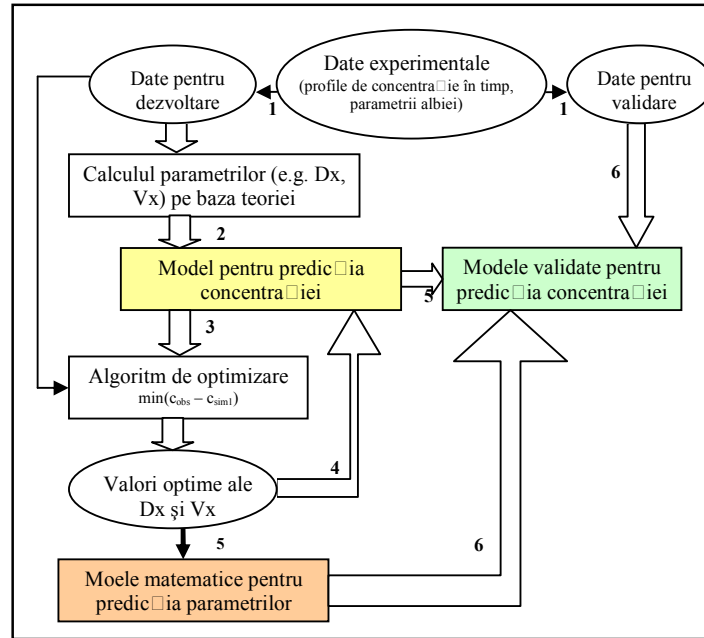


Fig. 2. Metodologia de modelare.

Această lucrare acordă o atenție deosebită metodologiei de estimare a vitezei și a coeficienților de dispersie din cauză că o predicție bună a concentrației poluanților în râuri se bazează foarte mult pe capacitatea de a estima cât mai bine parametrii caracteristici transportului. Valorile optime ale parametrilor obținute în faza de calibrare a modelului, folosite pentru elaborarea modelelor de estimare a parametrilor, au arătat tendințele de creștere neliniară cu debitul.

Modelele de estimare a parametrilor dau posibilitatea de a obține viteza și coeficientul de dispersie independent de experimentele cu trasori care sunt foarte greu accesibile. Modelul nelinear propus pentru V_x și D_x (Whitehead et al., 1986) a dovedit a face estimări satisfăcătoare (a se vedea Fig. 3 și Fig. 4) pentru primele trei segmente și mai puțin bune pentru al patrulea segment. Rezultatele unei analize comparative arată că există puține dovezi că un model mai sofisticat (de exemplu, Fischer et al., 1979) pentru estimarea coeficienților de dispersie poate oferi predicții în mod semnificativ mai bune decât modelul simplu nelinear.

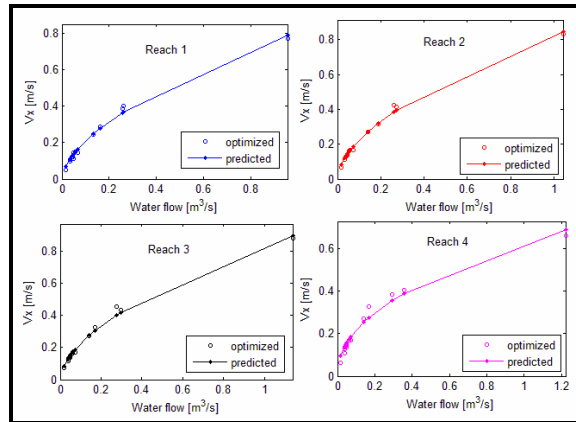


Fig. 3. Estimarea vitezei cu modelul simplu nelinear pentru segmentele de râu utilizate în modelul analitic.

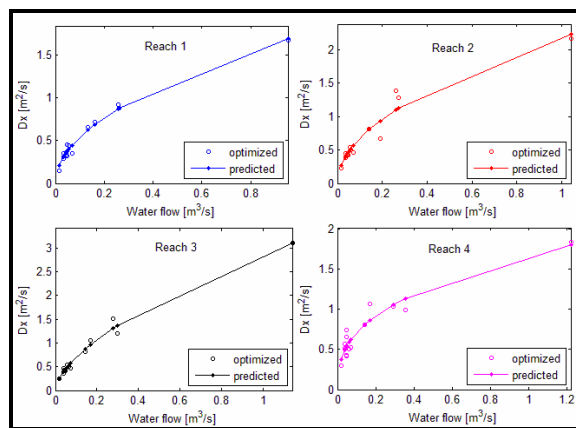


Fig. 4. Estimarea D_x cu modelul simplu nelinear pentru segmentele de râu utilizate în modelul analitic.

Rezultatele modelelor în fazele de calibrare și evaluare arată că ambele modele au fost capabile să reprezinte principalele caracteristici ale profilelor observate de concentrație în timp (de exemplu, Fig. 5 and Fig. 6).

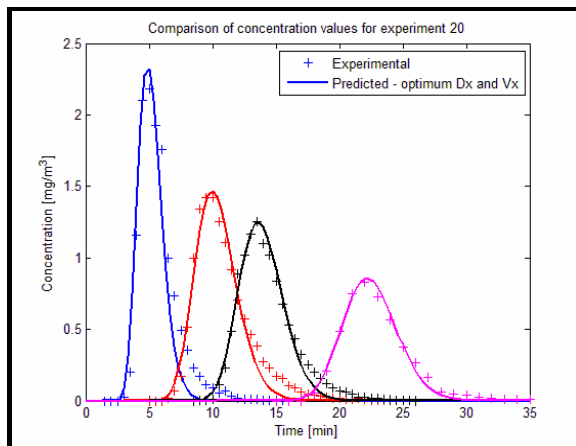


Fig. 5. Rezultatele calibrării modelului analitic pentru un experiment la debit mediu ($Q = 261$ L/s).

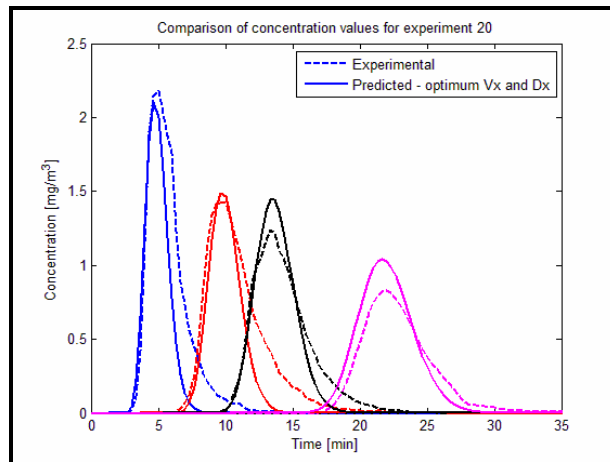


Fig. 6. Rezultatele calibrării modelului numeric pentru un experiment la debit mediu ($Q = 261$ L/s).

În ceea ce privește discuția obișnuită cu privire la faptul că un model ar trebui să se concentreze pe vârfuri sau pe cozile de profil ar trebui menționat faptul că modelele dezvoltate pentru Murray Burn sunt în măsură să facă predicții bune ale valorilor de vârf și, de asemenea, ale timpului de expunere la valori de concentrație medie și joasă, adică lățimea profilelor de concentrație este bine simulată (Fig. 5 and Fig. 6).

Analizând profilele de concentrație simulate pentru toate experimentele de către ambele modele se observă că vârfurile sunt cel mai bine prezis element împreună cu marginile (cozile) anterioare. În plus segmentele 1 și 2 sunt cele mai bine simulate, în timp ce segmentul 4 este, în general cel mai slab simulat. Calitatea mai slabă a predicției concentrației pentru acest segment ar putea fi justificată de distanță lungă între sursă și acest ultim punct de monitoring de-a lungul canalului este foarte neuniformă. De asemenea, variația reală sau aparentă a debitului în spațiu ar putea avea o influență, împreună cu cantitatea mai redusă de date de monitoring la acest site în comparație cu celelalte trei site-uri.

Abordarea caracteristică ingineriei de proces aplicată asupra modelurii transportului poluanților în Murray Burn

Obiectivele acestui studiu sunt:

1. Îmbunătățirea predicției concentrației cu ajutorul modelului analitic prin modificarea algoritmului de optimizare;
2. testarea noii abordări pentru parametrizare pentru cazul pârâului Murray Burn;
3. investigarea posibilității utilizării unui model bazat pe timpi de parcurs pentru viteza apei;
4. investigarea posibilității de îmbunătățire a estimării coeficientului de dispersie prin utilizarea unui model bazat pe timpii de parcurs; și

5. compararea rezultatelor modelului analitic (estimare de parametri și predicția concentrației) în cazul folosirii a două modelități distincte de parametrizare a râului.

Acest studiu folosește modelul analitic pentru transportul poluant în Murray Burn dezvoltat, calibrat și evaluat înainte prin aplicarea abordării clasice de parametrizare. În acest pas de cercetare modelul analitic este destinat să utilizeze atât abordarea clasică cât și o abordare nouă pentru a descrie râul modelat.

Metodologia de modelare utilizată pentru dezvoltarea inițială și calibrarea modelului analitic (Fig. 2) a fost folosită în acest studiu, de asemenea. Puține modificări au fost necesare în vederea îndeplinirii obiectivelor mai sus prezentate:

1. Calculul parametrilor, calibrarea modelului și evaluarea sa au fost efectuate separat pentru fiecare abordare.
2. Calculul ab-initio al parametrilor pentru abordarea nouă a fost efectuat folosind fragmentele de râu delimitate în capitolul anterior pentru modelarea numerică a râului Murray Burn, deoarece acestea sunt adecvate în reprezentarea râului ca un domeniu continuu de calcul cu parametri variabili. În acest studiu fragmentele nu sunt caracterizate de valorile medii ale parametrilor. Valorile ab-initio la punctele de monitoring (M1 - M4) sunt cele pentru fragmentele numerice și sunt folosite pentru a aplica o abordare nouă, în timp ce cele pentru fragmentele analitice sunt folosite pentru a aplica abordarea clasică.
3. Algoritmul inițial de optimizare a fost modificat. Suma ponderată a abaterilor la pătrat (Rode et al., 2007) a fost setată să acorde o importanță mai mare punctelor de date din cozi (Ng și Perera, 2005) în scopul unei predicții mai bune a acestora, și pentru a îmbunătăți în ansamblu calitatea predicției modelului. Rezultatele au evidențiat îmbunătățirea preciziei de predicție la M4.
4. Valorile optime ale D_x și V_x rezultate prin folosirea noului algoritm sunt utilizate în continuare pentru a dezvolta modele pentru estimarea parametrilor. Modelele au aceeași formă pentru fiecare abordare de parametrizare, dar diferite valori pentru elementele specifice modelului (de exemplu coeficienții C_{1V} și C_{2V} iau valori diferite pentru fiecare abordare la M1 - M4).
5. Modelele de estimare a parametrilor au fost introduse în modelul de concentrație, pentru a termina calibrarea sa, și a face predicții pentru D_x și V_x pentru experimente din setul independent de date pentru evaluare. Evaluarea a fost realizată prin compararea profilelor de concentrație prezisă cu cele măsurate.

Rezultatele arată că: (1) estimarea vitezei este mult mai precisă decât estimarea coeficientului de dispersie; și (2), în general, abordarea nouă de parametrizare îmbunătățește predicția parametrilor. Avansul este vizibil mai ales pentru estimarea D_x la M4. Viteza este estimată mai bine de modelul simplu nelinear în raport cu modelul dependent de timpul de parcurs, chiar dacă diferențele între performanțele celor două modele sunt relativ reduse la primele trei puncte de monitoring. Coeficientul de dispersie beneficiază cel mai mult de pe urma utilizării noii abordări de parametrizare. Cele mai bune estimări, la toate site-urile în ambele abordări sunt date de modelul nelinear, urmat de Fischer modificat (Fischer et al., 1979) folosind viteza estimată cu modelul neliniar. Pentru cele două modele se observă că D_x este în general supraestimat la debite medii și ușor subestimat debite mari.

Chiar dacă rezultatele de calibrare a modelului de concentrație pentru abordarea nouă arată precizii mai mici, uneori, în comparație cu abordarea clasică, rezultatele evaluării arată îmbunătățiri atunci când se utilizează abordarea nouă. Interesant este faptul că abordarea inovatoare de descriere a râului aduce la evaluare îmbunătățiri în predicția concentrației la toate site-urile de monitoring.

Rezultate comparative ale simulării concentrației pentru evaluarea modelului atunci când se utilizează cele două tipuri de parametrizare sunt prezentate în Fig. 7 (pentru un experiment de debit scăzut) și Fig. 8 (pentru un experiment de debit mare).

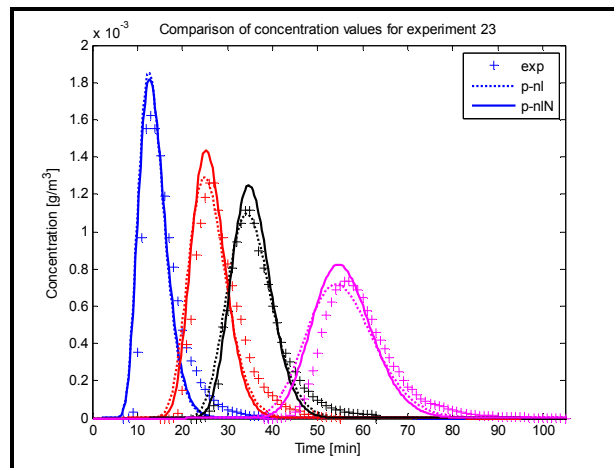


Fig. 7. Rezultatele evaluării pentru un experiment la debit mic (62.1 L/s).

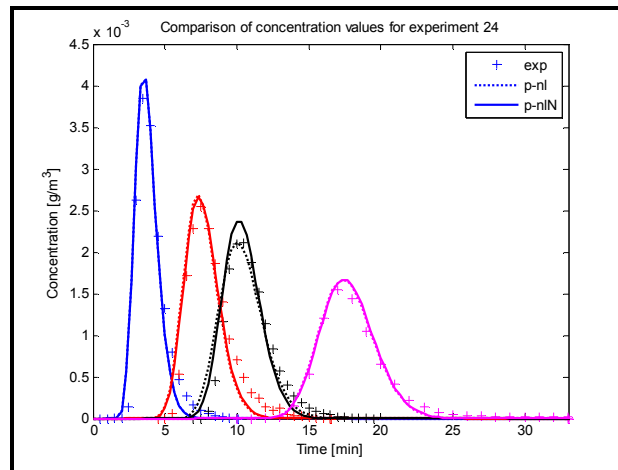


Fig. 8. Rezultatele evaluării pentru un experiment la debit mare (535.4 L/s).

Rezultatele globale arată că (1) abordarea inovatoare de parametrizare îmbunătățește performanțele de predicție ale modelului; (2) modificarea algoritmului de optimizare în ceea ce privește atenția acordată cozilor îmbunătățește, de asemenea, precizia de predicție per ansamblu; (3) iar modelul analitic este eficient pentru simularea transportului poluanților în Murray Burn. Exactitatea predicției concentrației depinde foarte mult de capacitatea de a face estimări de bună calitate pentru V_x și D_x . În mod evident, aceste instrumente de predicție sunt foarte importante în domeniul modelării calității mediului.

Modelarea și simularea transportului poluanților în râul Swale

Obiectivele acestui studiu (prezentat în mare parte în Ani et al., 2010a) sunt:

- (1) dezvoltarea unui model (ADModel) de predicție a concentrației nutrienților (nitrați, amoniu, fosfor reactiv solubil - SRP și fosfor organic - OP) transportați de-a lungul unei lungimi (50.4 km) a râului Swale în condiții de debit și descărcări nestaționare;
- (2) ADModel este conceput având la bază aceleași principii fenomenologice cu QUESTOR; pentru
- (3) a compara rezultatele ADModel când utilizează vitezele de transformare calibrate cu QUESTOR pentru Swale cu rezultatele obținute la utilizarea unor viteze de transformare noi, date de un model calibrat pentru ADModel;
- (4) a relaționa dinamica nutrienților în râu cu variabilitatea vitezelor de transformare; și
- (5) să ilustreze beneficiile pe care ADModel le aduce din perspectiva abilităților de modelare a transportului poluanților.

Investigații amănunțite ale datelor experimentale și ale literaturii au motivat dezvoltarea unui model pentru transportul nitraților, amoniului, SRP și PO, deoarece aceștia sunt nutrienți

foarte importanți pentru râul Swale. ADModel se bazează pe soluția analitică a ADE pentru deversarea continuă de poluanți (Pujol și Sanchez-Cabeza, 2000) și a fost dezvoltat folosind date experimentale de la râul Swale. Rezultatele modelului sunt discutate în legătură cu QUESTOR (Eatherall et al., 1998), un software cunoscut de modelare a calității râurilor, dezvoltat la Centrul pentru Ecologie și Hidrologie (CEH) Wallingford, Marea Britanie. QUESTOR a fost aplicat pe râul Swale de către cercetătorii de la CEH, iar rezultatele au fost oferite pentru utilizarea în prezentul studiu.

ADModel este dezvoltat, calibrat și evaluat prin luarea în considerare a parametrilor de transport și transformărilor nutrienților, în conformitate cu metodologia din Fig. 9.

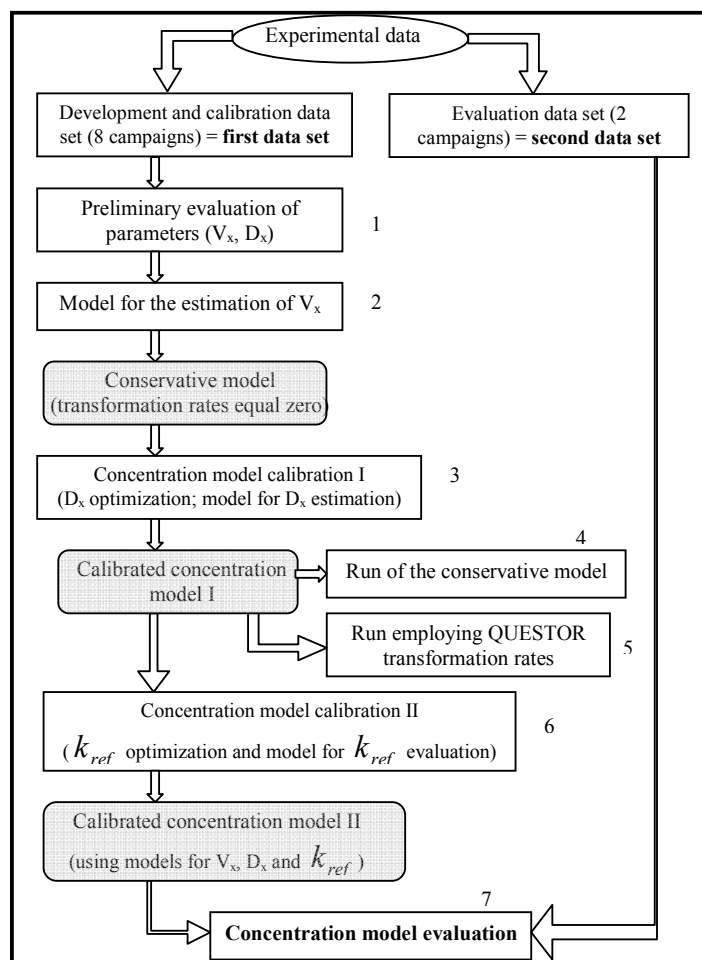


Fig. 9. Methodology used for ADModel building, calibration and evaluation.

Calibrarea a fost efectuată utilizând o metodologie originală, în două etape: (I) calibrarea I, atunci când coeficienții de dispersie au fost optimizați și (II) calibrarea II, atunci când constantele de referință ale vitezelor de transformare de au fost optimizate. În fiecare etapă este implicat un algoritm de optimizare original, în două sub-etape, folosind două funcții

obiectiv diferite. Calibrarea I a fost efectuată utilizând atât compușii de azot și compușii fosforului, în timp ce calibrare II a fost efectuată doar pentru compușii de azot în prezentul studiu.

Rezultatele după calibrarea I, utilizând modelul de conservativ (viteză de transformare nulă) și modelul neconservativ cu constantele de referință ale vitezelor de transformare calibrate pentru QUESTOR, arată că ADModel este capabil să reprezinte tendința principală a măsurătorilor de concentrație pentru cei patru nutrienți; și dezvăluie necesitatea de a îmbunătăți reprezentarea variabilității transformărilor.

Model pentru estimarea vitezelor de transformare a fost modificat, astfel că constantele de referință ale vitezelor de transformare sunt estimate în funcție de sezonalitate și/sau debit. Noul model a fost formulat în timpul calibrării II (vezi Tabelul 2), folosind valorile optime ale constantelor de referință (de exemplu, Fig. 10).

Tabelul 2. Dependența vitezelor de transformare de diferiți factori în modelul formulat.

Procesul	Nitrificare	Denitrificare	Mineralizare	Sedimentare	Re-suspensie
Cantitate transformată [mg/L]	k_{ref_nit} , T, c_{NH_4}	k_{ref_den} , T, c_{NO_3}	k_{ref_min} , T, c_{OP}	k_{ref_sed}	k_{ref_res}
Factori care influențează k_{ref}	Q, sezonalitate	Q, sezonalitate	Q, sezonalitate	Q	Q

T este temperatura măsurată a apei [°C]; Q este debitul râului [m³/s]; c_{NH_4} , c_{NO_3} , c_{SRP} și c_{OP} [mg/L] sunt concentrațiile NO₃, NH₄, SRP și OP; k_{ref_nit} , k_{ref_den} și k_{ref_min} [1/zi] sunt constantele de referință pentru vitezele de nitrificare, denitrificare și mineralizare; k_{ref_sed} și k_{ref_res} [mg/L] sunt constantele de referință pentru vitezele de sedimentare and re-suspensie.

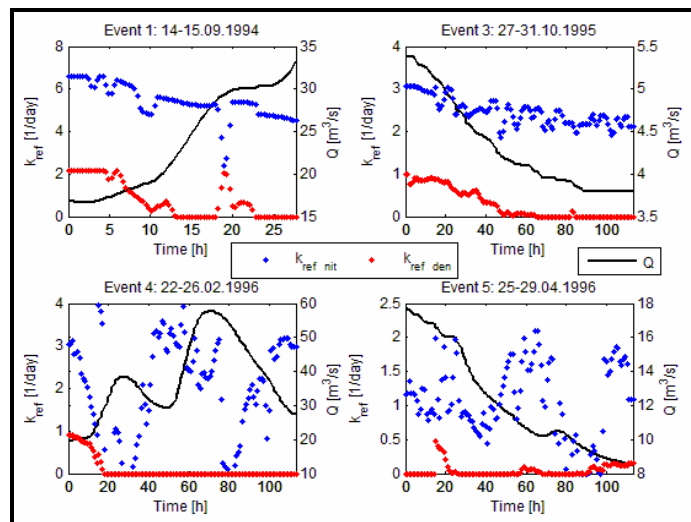


Fig. 10. Constante de referință optime (k_{ref}) și debitul (Q) corespunzător pentru campanii utilizate în calibrare.

Acest model pentru transformări a îmbunătățit reprezentarea dinamicii transformărilor și a variabilității între campanii și, într-o anumită măsură (față de QUESTOR), în cadrul

campaniilor, deși procedura de estimare a vitezelor de transformare are nevoie de dezvoltare în continuare în vederea unei mai bune reprezentări a variabilității în cadrul aceleiași campanii. La patru site-uri de-a lungul râului Swale ADModel reprodus tendința principală a datelor experimentale (cu rezoluție de o oră) pentru de amoniu și nitrați (vezi Fig. 11).

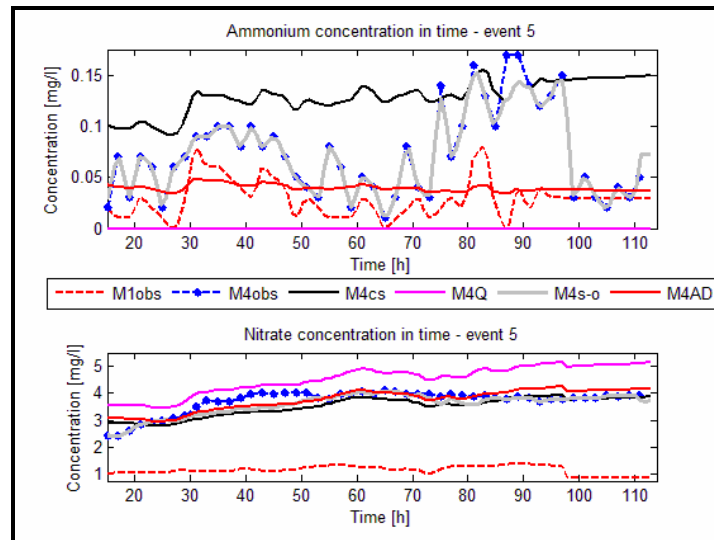


Fig. 11. Rezultate comparative ale ADModel pentru simularea transportului conservativ și neconservativ în timpul campaniei 5 (condiții normale de debit) (obs = date experimentale; cs = folosind modelul conservativ; = Q simulare folosind modelul neconservativ cu k_{ref} din QUESTOR; s-o = simulare folosind valorile optime ale k_{ref} ; AD = simulare folosind modelul neconservativ cu k_{ref} din modelul dezvoltat în timpul calibrării II).

Astfel modelul își dovedește capacitatea de predicție a concentrației pentru simularea de deversări normale și accidentale, dar și pentru orice alt studiu detaliat al transportului de poluanți de-a lungul râului. Aceasta capacitate este absentă în modelul existent aplicat râului Swale (QUESTOR), care este proiectat pentru predicția calității apei pe perioade lungi, în pași de o zi și este mai potrivit pentru rețele hidrografice mai mari (sute de kilometri), oferind o valoare medie a concentrației pentru fiecare segment de râu.

Deși, în general, modelul neconservativ folosind vitezele de transformare pentru nitrificare, denitrificare și mineralizare din QUESTOR dă rezultate mai bune decât un model conservativ, acest model utilizând viteze calibrate din date bilunare colectate pe lungi perioade de timp a dovedit a fi nepotrivit pentru simularea de schimbări ale calității apei pe termen scurt. Modelarea răspunsului calității apei la schimbările sezoniere rapide ale debitului și încărcării cu nutrienți este mult mai complexă și cere mult mai multe informații decât ceea ce se poate capta din seturile de date periodice care conțin medii ale concentrației colectate pe perioade lungi de timp. Cu toate acestea, în ceea ce privește schimbările relativ scurte ale încărcării cu nutrienți randamentele ADModel cu noile viteze de transformare are rezultate bune, similar cu cele ale QUESTOR relativ la oferirea unei predicții medii pentru pași mari de timp și spațiu.

Din rezultatele ambelor tipuri de modelare, pe termen lung (QUESTOR) și pe termen scurt (ADModel), se poate sugera necesitatea îmbunătățirii acurateții predicției concentrației nutrienților. Unele posibilități sunt discutate în detaliu, oferind și perspective pentru cercetări viitoare: de exemplu, reprezentarea fenomenelor existente (transformări microbiologice mediate); îmbunătățirea reprezentării surselor; introducerea de surse suplimentare și de procese care au loc în râu; sau îmbunătățirea în ceea ce privește datele colectate.

Modelarea și simularea transportului poluanților în râul Someș

Modelarea transportului de poluanți în râul Someș a fost realizată în mai multe etape.

- (1) În primul rând parametrii râului au fost analizați și prelucrați pentru împărțirea în cinci segmente de râu de diferite lungimi în funcție de neuniformitatea canalului.
- (2) Un studiu privind poluarea râului a fost efectuat. Rezultatele acestuia arată că nutrienții și metalele grele sunt printre cei mai importanți poluanți, evacuați printr-o gamă largă de tipuri de surse de poluare. Segmentul de râu dintre Cluj-Napoca (în amonte) și aval Dej a fost identificat ca fiind critic, iar în continuare va fi supus modelării.
- (3) Caracteristicile canalului și parametrii de transport al poluanților au fost estimați pentru acest segment de râu. Datele experimentale au fost utilizate pentru elaborarea de modele matematice.
- (4) Trei modele analitice au fost aplicate în scopul simulării transportului poluanților. Modelele sunt în măsură să facă predicția concentrației după deversările accidentale și de rutină a poluanților provenite (1) din surse de poluare continue punctiforme; (2) din surse instantanee punctiforme; și (3) din surse instantanee nepunctiforme.
- (5) Rezultatele modelelor analitice sunt furnizate pentru două cazuri: (a) utilizarea de parametrii constanți pentru râu și (b) utilizarea de parametrii variabili pentru râu. Parametrii variabili pot fi utilizați în modelele analitice cu ajutorul unei tehnici noi pentru parametrizarea râului care presupune reevaluarea concentrației la fiecare pas.
- (6) Model analitic este comparat cu un model numeric (dezvoltat în altă parte, nu în teza de față), în scopul testării noi abordări de parametrizare.

Modele folosesc parametrii variabili de-a lungul râului pentru că datele experimentale au evidențiat caracteristici neuniforme ale canalului. Parametrii au fost estimați, după caz, folosind date experimentale și/sau de modele sau valori propuse în literatura de specialitate. Parametrii caracteristici ai canalului (spre exemplu: pantă, lățime, adâncime) și debitul de apă

au fost calculați pe baza datelor măsurate. Viteza este estimată ca funcție de debitul de apă și profilul transversal. Coeficientul de dispersie longitudinală a fost estimat cu ajutorul a două modele:

- (1) formula McQuivey-Keffer (1974) aleasă cu ajutorul software-ului de reutilizare a informației (knowledge re-use) descris de Avramenko et al. (2009). Valoarea coeficientului empiric (0.058) poate varia între râuri/segmente de râu pentru a ține cont de neuniformitate.
- (2) formula Iwasa și Aya (1991) propusă de Chendrean (2009) cu ajutorul metodologiei elaborate de identificare a coeficienților de dispersie.

Vitezele de transformare se exprimă prin cinetica de ordinul I, care ia în considerare transformările biologice, chimice, fizice și orice alte procese care conduc la schimbarea de concentrație a poluantului în timpul transportului. Valoarea utilizată pentru viteza totală a transformărilor este dată de constanta de viteză (k) egală cu 10^{-5} s^{-1} și reprezintă un consum poluant. Acest parametru se presupune a fi independent de parametrii caracteristici ai apei râului (de exemplu, temperatura, CBO, DO, pH-ul).

Datele utilizate relativ la sursele de poluare: localizarea; poluantul deversat; debitul și concentrația; au fost, de asemenea, specificate. Modelele au fost utilizate pentru a simula transportul poluanților evacuați din sursele de poluare identificate de Ani et al. (2010b), de-a lungul Someșului cu metoda de analiză grafică.

Scenariul prezentat în scop ilustrativ mai jos privește o sursă de poluare nepunctiformă situată între km 95 și km 100 de-a lungul unui mal al râului Someș. Fig. 12 și Fig. 13 arată rezultate de simulare ale aceluiași model utilizând parametrii constanți (Fig. 12) și parametrii variabili (Fig. 13) pentru descrierea râului. Timpul total de simulare este de 15 de ore, iar distanța de râu reprezentată în figuri începe la locația sursei (km 95 aval de izvor) și se extinde 80 km în aval.

Chiar dacă aceeași cantitate de poluant este evacuată în cele două simulări profilul de concentrație are forme diferite. Rezultate simulării bținute prin utilizarea parametrilor constanți și variabili arată valori semnificativ diferite ale concentrației și a lungimii de râu afectate. Acest lucru relevă faptul că variabilitatea parametrilor trebuie să fie corect reprezentată în modele. Modelele care utilizează parametrii variabili au făcut predicții bune a concentrației atât pentru Murray Burn cât și pentru Swale. În plus s-au comportat bine și la exercițiul de verificare prezentat mai jos pentru râul Someș. Utilizarea parametrilor variabili

este recomandată ținând seama de aceste considerente, precum și faptul că parametrii constanți transformă râul într-o zonă de studiu idealizată, și simplifică caracterizarea hidraulică și hidrodinamică a canalului.

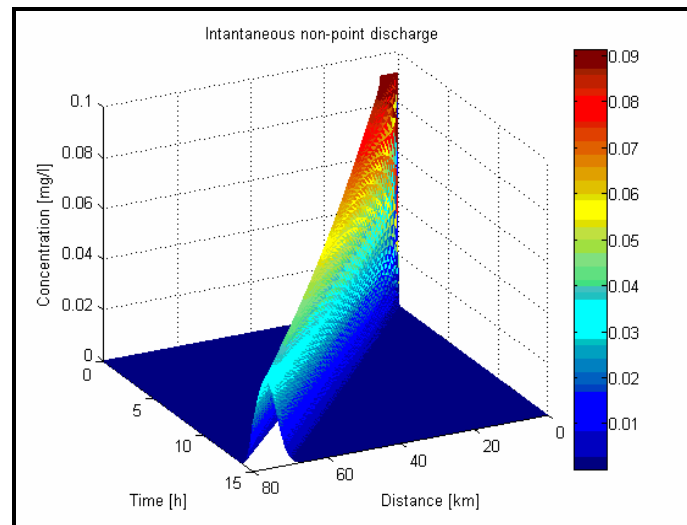


Fig. 12. Transportul poluanților descărcați de o sursă nepunctiformă: parametrii de râu constanți.

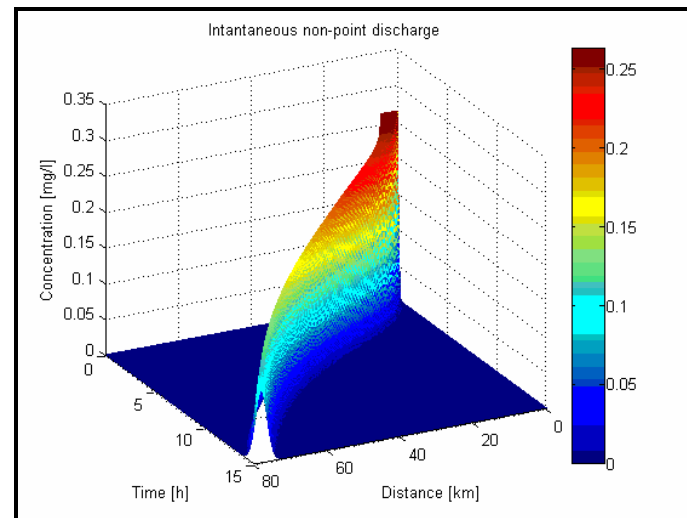


Fig. 13. Transportul poluanților descărcați de o sursă nepunctiformă: parametrii de râu variabili.

Modelul analitic dezvoltat în această teză pentru deversarea continuă punctiformă, care utilizează parametri variabilă, a fost în continuare evaluat în raport cu un model numeric, dezvoltat în afara acestei teze. Scopul acestei evaluări este (1) acela de a testa a doua nouă abordare de parametrizare a râului și (2) de a compara aspecte legate de dezvoltarea și utilitatea modelelor analitice și numerice.

Ambele modele (1) țin cont de aceiași parametri ai râului; (2) prezintă același scenariu de poluare; (3) au fost dezvoltate pe baza aceluiași ipoteze pentru condițiile inițiale, condițiile la

limită și de cinetică de transformare; și (4) iau în considerare efectele combinate ale transportului convectiv-dispersiv, împreună cu transformarea poluantului. Sursa este situată în zona industrială a orașului Cluj-Napoca la 90 km în aval izvor. Eliberarea a 5g/s de poluant neconservativ provenind de la o conductă de evacuare a apelor uzate este presupus a fi distribuită instantaneu în secțiunea transversală a râului.

Evaluarea distanței râului afectată de poluant în anumite momente de timp după începerea deversării de poluant este prezentată în Fig. 14 și Fig. 15, care evidențiază rezultatele similare ale celor două modele.

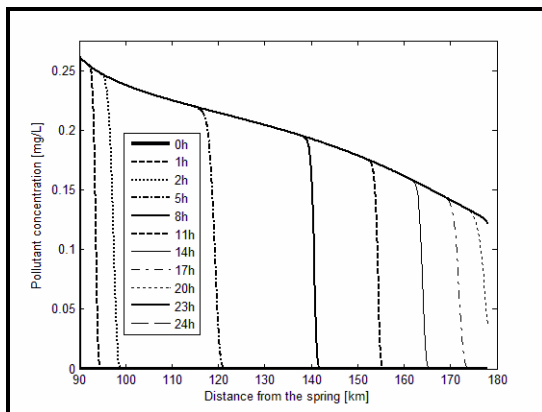


Fig. 14. Rezultatele simulării modelului analitic.

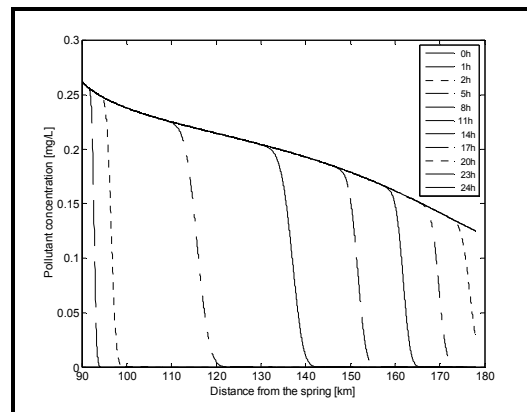


Fig. 15. Rezultatele simulării modelului numeric.

Timpul de calcul necesar pentru obținerea soluției numerice (24 ore de proces real) este de 142 secunde, față de 43 secunde necesare pentru modelul analitic. Abordare analitică arată a fi mai puțin costisitoare și capabilă a oferi rezultate de simulare în timp mai scurt.

Modele de simulare a concentrației poluanților în râul Someș sunt o mare realizare a lucrării de față, mai ales în situația actuală, când foarte puține studii similare au fost efectuate (de exemplu, Cristea et al., 2010; Rosca-Bocancea și Agachi, 2001 și 2000). Ele sunt valoroase datorită capacității lor de predicție, dar și pentru că deschid noi posibilitati pentru dezvoltarea unor noi instrumente informatice și de calcul eficiente pentru managementul calității apei și contracarare în timp real a poluării în bazinul râului Someș, pentru că modelele pot sta la baza unor sisteme automate de monitoring și neutralizare a poluanților.

Abordarea specifică ingineriei de proces: discuții pe larg

Modele analitice vs. Modele numerice

Pentru simularea deversării punctiforme continue de poluanți în râul Someș au fost aplicate două modele matematice, utilizând Matlab (pentru modelul analitic) și Comsol (pentru modelul numeric) (Ani et al., 2010c). Două modele matematice asemenea, au fost dezvoltate pentru simularea deversării punctiforme instantanee în Murray Burn: model analitic în Matlab și model numeric în Comsol (a se vedea Ani et al., 2009). Pentru ambele râuri cele două tipuri de modele au fost concepute ca sisteme cu elemente constitutive (sub-sisteme) similare care au capacitatea de predicție a concentrației poluanților conservativi și neconservativi atât în spațiu (de-a lungul râului) cât și în timp.

În cazul ambelor râuri cele două tipuri de modele utilizează aceleași condiții inițiale și de frontieră și parametrii variabili de-a lungul segmentului de râu investigat. Modelele oferă rezultate similare pentru estimarea în timp și spațiu a evoluției concentrației poluanților. Abordarea analitică a dovedit a fi mai puțin costisitoare și capabilă a oferi rezultate de simulare în timp mai scurt decât abordarea numerică.

Un avantaj principal al modelelor numerice este abilitatea de a satisface o gamă largă de condiții inițiale și de frontieră. Acest lucru face posibilă utilizarea lor și pentru alte tipuri de deversări de poluanți, pe lângă cele pentru care modelele au fost evaluate inițial. Acest fapt este unul dintre principalele motive care stau la baza dezvoltării unor modele numerice, alături de interesul de a vedea cum se comportă astfel de modele numerice din moment ce foarte puține astfel de modele au fost implementate în Comsol pentru transportul poluanților în râuri (de exemplu, Cristea et al., 2010).

Modelele numerice sunt mai flexibile comparativ cu cele analitice. Adăugarea, modificarea sau excluderea influențe (de exemplu, o sursă de poluare de orice tip) este posibilă și ușor de implementat. Baza modelului numeric (ecuația PDE) rămâne același, iar elementele care urmează să fie specificate sunt: localizarea sursei, distribuția spațială a sursei, durata deversării, natura descărcării de poluant, condițiile inițiale și condițiile la limită. Pentru cazul modelului analitic, în scopul simulării unei deversări de poluant provenită de la un alt tip de sursă este necesară utilizarea în model soluția PDE corespunde aceluși tip specific de deversare de poluant.

În cazul ambelor tipuri de modele împărțirea râului în segmente în abordarea clasică descrisă mai sus influențează aplicarea modelului pe alte râuri, pentru că necesită unele modificări

suplimentare. Spre exemplu înainte de adaptarea și aplicarea modelului este necesară redefinirea segmentelor de râu în concordanță cu neuniformitatea noului caz studiat, pentru că râurile sunt diferite unele de celelalte. În Comsol fragmentele de râu (fragmente numerice) ar putea fi schimbate cu ușurință prin suprimarea sau adăugarea de granițele interne în domeniul de calcul. De asemenea, este ușor să se reducă sau să se majoreze numărul de segmente în modelul analitic. Cu toate acestea, această teză se propune tehnici noi pentru descrierea râurilor studiate în scopul utilizării de parametri variabili în modelele analitice. Zona de studiu este reprezentată ca o întindere râu unică cu influențele la locul real de-a lungul râului. Prin urmare, modelul este mai ușor de pus în aplicare pentru alte râuri, comparativ cu modelele analitice utilizând abordarea clasică de descriere a râului prin împărțirea în segmente.

Complexitatea și eficiența modelelor

Parametrii ce caracterizează transportul poluanților în apele de suprafață sunt variabili de-a lungul coordonatelor spațiale, reprezentate de lungimea râului, lățimea canalului și adâncimea apei. Încercarea de a include toate variabilele în spațiul 3D ar putea duce la modele foarte complexe pentru dezvoltarea și evaluarea cărora care apar dificultăți legate de disponibilitatea de date experimentale. Alternativa este utilizarea de modele 1D și 2D care sunt, de asemenea, în măsură să reprezinte sistemul modelat într-un mod satisfăcător.

În general, modelele 1D sunt mai ușor de utilizat, precum și toate datele necesare pentru a construi și evalua acest tip de modele sunt mai accesibile, cu costuri experimentale mai mici în comparație cu datele 2D sau 3D. Pentru studiile din prezenta teză datele de concentrație 1D au fost disponibile la rezoluție înaltă de monitorizare (pași de ordinul secundelor până la două ore) pentru Murray Burn și Swale, și la rezoluție mai mică (lunar) pentru râul Someș. Limitele unui model 1D pot fi de asemenea investigate.

Un model 2D reprezintă mai multe caracteristici ale sistemului, dar este nevoie de mai multe date. Unele dintre aceste date nu sunt disponibile, de exemplu profile dinamice transversale a câmpului de concentrație pentru a calcula coeficienții de dispersie transversală. De cele mai multe ori datele de monitoring sunt colectate dintr-un singur loc (mijlocul albiei) pentru întreaga secțiune, presupunându-se că trasorul sau poluantul monitorizat este bine amestecat (Wallis și Manson, 2004). O opțiune alternativă ar fi folosirea de formule empirice, însă s-a divedit că valorile coeficienților ar putea fi puțin fiabile în cazul utilizării formulei nepotrivite,

datorită limitărilor unor astfel de metode, care sunt similare cu cele pentru estimarea coeficienților de dispersie longitudinală.

Un alt argument pentru folosirea unor modele mai simple este faptul că un model 2D este adecvat în zona adectivă (unde are loc amestecarea transversală), dar dincolo de această distanță modelul 1D poate fi folosit deoarece procesul de amestecare dominant este dispersia longitudinală (Fischer et al., 1979; Chin , 2006; Wallis și Manson, 2005). În cazul râurilor investigate în această teză amestecarea este bine făcută de la sursa până la primul site de monitoring al concentrației, datorită lungimii mari a segmentului în comparație cu lățimea și înălțimea lui (mai mult de 100 de ori).

Principalele caracteristici ale profilurilor concentrației în timp care trebuie să fie simulate de modele de transport a poluanților sunt vârfurile (valoarea cea mai mare a concentrației) și cozile (marginile de profil anterioare și posterioare, care arată sosirea și plecarea unei de poluare de la un punct de monitoring). Atunci când se lucrează cu modele de transport a poluanților, există o discuție cu privire la care sunt cele mai importante caracteristici care ar trebui redate în profilele concentrației în timp: margini vs. vârf? Dintr-un punct de vedere vârful este important deoarece oferă informații despre amploarea evenimentului. Pe de altă parte, marginile sunt importante pentru că arată cât timp este prezent poluantul la un anumit punct. În orice râu flora și fauna ar putea rezista, eventual, la o expunere de scurtă durată la o concentrație mare, dar ar putea fi deteriorată foarte mult în timpul unei lungi expuneri la o concentrație mai mică.

În această teză de modele de transport a poluanților au capacitatea de anticipa amploarea și timpul de sosire al vârfului la un punct și marginile cu o eroare acceptabilă, ceea ce este un mijloc de a evalua performanța modelului. Aceasta este o modalitate de asigurare că modelele sunt capabile să prevadă cu precizie concentrația unui poluant de-a lungul unui râu, după deversarea acestuia. Pentru toate studiile de caz modele au reușit să capteze principalele caracteristici ale profilelor de timp ale concentrației observate. Predicțiile cele mai bune sunt făcute în general pentru timpul de expunere la valori medii de concentrație.

Multe modele disponibile pentru transportul poluanților țin seama de deversările de poluant provenite de la o singură sursă. În realitate, de-a lungul unui râu, există mai multe surse de poluare, iar suprapunerea lor în timpul modelării este absolut necesară (Socolofsky și Jirka, 2005).

Pentru a răspunde acestei preocupări teza de față a propus modalitățile noi de reprezentare a lungimii de râu, ce dă posibilitatea implementării mai multor surse la locația reală. Pe de altă parte se exemplifică și dezvoltarea unui model pentru simularea mai multor tipuri de deversare de poluant. Acesta se bazează pe modelul validat deja (ADModel) pentru râul Swale. Modelul este format din două module: (A) un modul pentru deversarea variabilă continuă punctiformă; și (B) un modul pentru deversarea instantanee punctiformă; implementate în Matlab. Primul modul constituie nucleul și este validat deja (ADModel). Acesta poate servi drept sprijin pentru dezvoltarea unui model mai complex bazat pe module deoarece modele pentru estimarea parametrilor de transport care vor fi folosite de ambele module au fost elaborate și verificate odată cu ADModel.

Concentrația de poluanți în sursă și în râu (în vicinitatea sursei) au valori diferite pentru fiecare sursă de poluare și pentru fiecare nutrient modelat; condițiile inițiale și de frontieră sunt, de asemenea, diferite în funcție de sursă și modul de descărcare. V_x , D_x și parametrii de transformare sunt comuni pentru ambele module, și depinde de debitul de apă, parametrii canalului și alți parametri specifici. În consecință, noul modul poate fi aplicat pentru râul Swale fără ca validarea suplimentară să fie necesară, deoarece se bazează pe aceiași parametrii de canal și de transport ca ADModel (de exemplu, viteza, coeficientul de dispersie și ratele de transformare). Metodologia utilizată este prezentată în Fig. 16.

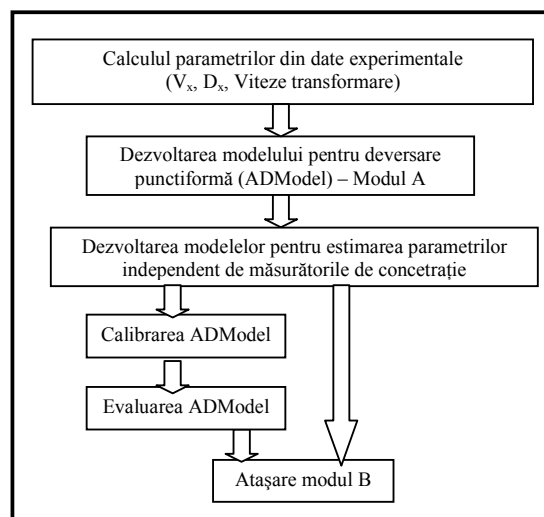


Fig. 16. Metodologia pentru dezvoltarea modelului bazat pe module.

Modelul bazat pe module este capabil să simuleze concentrația de poluanți în situații obișnuite și în cazul deversărilor accidentale de la mai multe tipuri de surse de poluare. Este util pentru a înțelege de propagarea poluanților de-a lungul râului, pentru a evalua calitatea apei și, de asemenea, pentru a efectua managementul poluării.

Probleme legate de estimarea parametrilor

În modelarea transportului poluanților estimare parametrilor hidraulici și a celor de transport de masă poate fi efectuată în două moduri: folosind date experimentale și utilizând modele matematice/empirice. Datorită dificultăților ridicate de colectarea datelor cercetătorii au tendința de a utiliza modele pentru estimarea parametrilor, modele care au fost dezvoltate și validate înainte (aproape întotdeauna pe alte râuri). Modelele sunt ușor de utilizat; oferă rezultate în timp mai scurt în comparație cu metodele bazate pe datele experimentale și de cele mai multe ori nu sunt mijloace scumpe de estimare, deoarece nu necesită date detaliate măsurate în râu. În același timp, utilizarea lor este foarte periculoasă, deoarece pentru unii parametri există mai multe opțiuni de calcul, care dau rezultate diferite (vezi Ani et al., 2009). Utilizarea unui model inadecvat poate conduce la estimarea inexactă a parametrilor. Prin urmare, selectarea celui mai adecvat model este foarte importantă și a fost investigată în afara acestei teze de către autorul tezei și colegii (Avramenko et al., 2009; Chendrean, 2009). Au fost dezvoltate un software pentru reutilizarea informației pentru studiul mecanismelor de proces și o metodă pentru identificarea de modele pentru estimarea parametrilor. Rezultatele lor au fost folosite în această teză pentru modelarea râului Someș, pentru care datele experimentale sunt destul de sărace, comparativ cu celelalte două râuri studiate.

Se exemplifică aici cazul coeficientului de dispersie care este foarte dificil de estimat, chiar și atunci când datele experimentale este disponibile (din cauza problemelor în șirurile de date sau a lipsei de date care ar putea afecta serios rezultatele). Acesta este parametrul cu cel mai mare număr de modele matematice/empirice disponibile. Cele mai multe dintre aceste modele au fost dezvoltate pe baza datelor dintr-o mare varietate de canale de râu, cu neuniformitate longitudinală și transversală, cu intenția de a oferi un instrument aplicabil la scară largă (Wallis și Manson, 2004). Cu toate acestea, de cele mai multe ori, așa cum se arată și în această teză, nu toate modelele sunt aplicabile unui anumit râu. Rezultatele arată diferențe majore între aplicarea modelelor chiar și la același râu sau segment de râu. Coeficientul de dispersie longitudinală se modifică de-a lungul unui râu (chiar dramatic unori) și chiar variază între râurile cu același debit (de exemplu, Wallis și Manson, 2004).

Prin urmare, fiecare segment de râu ar trebui tratat individual la alegerea modelului pentru estimarea corectă a D_x , deoarece modele mai precise asociate unui segment sunt de preferat unui instrument unic imprecis asociat întregului râu. Pentru cazuri mai complexe și neuniforme chiar regimurile diferite pentru condițiile hidrodinamice ar trebui asociate cu modele diferite pentru estimarea acestui parametru.

În această teză abordarea fost aceea de a testa modele pentru evaluarea parametrilor și de a alege modele adecvate pentru fiecare râu studiat. Modele corespunzătoare selectate pentru un anumit caz sunt menite să asigure estimarea exactă a parametrilor, în timp ce utilizarea oricărei formule aleasă aleatoriu dintre cele existente ar putea duce la rezultate inexacte.

Utilizarea rezultatelor tezei și perspective

Rezultatele tezei de doctorat sunt utile din punct de vedere academic, dar și pentru practicienii din domeniul calității apei râurilor.

Din perspectivă academică teza oferă mai multe tehnici și instrumente importante pentru a fi utilizate în modelarea transportului poluanților. Unele tehnici sunt inovative (de exemplu, parametrizarea luginii râurilor) și ar putea fi baza pentru dezvoltarea de noi metode utile în modelarea calității apelor curgătoare (de exemplu, punerea în aplicare a surselor difuze în modele proiectate pentru sursele punctiforme) sau pentru aplicarea modelelor deja validate pentru alte râului (de exemplu, modele de estimare a parametrilor împreună cu tehnicile inovative de parametrizare). Modelele sunt utile pentru a studia fenomenologia transportului poluanților, interdependența parametrilor și ar putea reprezenta un sprijin pentru dezvoltarea de noi instrumente pentru a anticipa și a contracara efectele poluanților deversați în râuri. În acest sens, modelele numerice pot fi folosite pentru construirea unor sisteme active pentru neutralizarea poluanților din albie în timp real.

În practică modelele de calitate a apei sunt de ajutor managerilor de calitate a apei atunci când au de-a face cu scenarii de poluare, dar și să ia decizii de rutină în ceea ce privește calitatea apei. De exemplu, atunci când o poluare accidentală se întâmplă undeva de-a lungul râului utilizatorul trebuie să precizeze coordonatele spațiale ale sursei de poluare, cantitatea de poluant, tipul deversării și alți parametri specifici. Programul va afișa informații grafice despre concentrația poluanților în râu, care să permită utilizatorului să decidă cu privire la măsurile de monitorizare și contracarare.

Impactul schimbărilor tehnologice sau demografice asupra calității apei râului ar putea fi evaluat în mod similar, folosind modelele pentru a prezice distribuția poluanților de-a lungul râului atunci când crește populația, un nou obiectiv industrial trebuie deschis, sau unei industrii existente i se operează îmbunătățiri tehnologice care conduc la modificarea efluenților. Zonele critice de-a lungul unui râu pot fi, de asemenea, identificate, precum și cauza necunoscută a unor deversări uzuale sau accidentale de poluanți.

Utilizarea modelelor drept instrumente de sprijin pentru luarea deciziilor cu privire la calitatea apei, și ca instrumente de învățare sau de formare profesională reprezintă o realizare realistă a tezei de față.

SECTION 4. CONCLUZII ȘI CONTRIBUȚII PERSONALE

Concluzii

Obiectivul principal al tezei este acela de a dezvolta o abordare cuprinzătoare specifică ingineriei de proces privind modelarea transportului poluanților în râuri prin utilizarea de metode și instrumente din diferite domenii.

Cercetarea se bazează pe cantități mari de date experimentale colectate de-a lungul a trei râuri europene de diferite lungimi și magnitudini: (1) Murray Burn, un scurt pârâu de munte (monitorizat pe o lungime de 0.54 km) din Edinburgh, Scoția; (2) râul Someș, un râu lung (monitorizat pe o lungime de 421 km pentru teza de față) din România, foarte neuniform, începând din munți ca pârâu și evoluând în aval când ajunge în zonă de câmpie; și râul Swale (monitorizat pe o lungime de 50.4 km) din nord-estul Angliei, un râu mare sub presiunea activității umane. Aceste râuri au fost alese datorită disponibilității de date experimentale, care a permis dezvoltarea și evaluarea (pentru Murray Burn și Swale) de modele pentru transportul poluanților și, de asemenea, din cauza naturii diferite a sistemelor lor, care a oferit posibilitatea aplicării a diferite tipuri de modele.

Modelele de advecție-dispersie dezvoltate au un nivel diferit de complexitate: de la modele simple, conservative, pentru Murray Burn, reprezentând un poluant; la modele neconservative pentru un singur poluant în râul Someș; la un model complicat, neconservativ, pentru râul Swale considerând patru poluanți cu transformări interdependente. Modelele sunt capabile să simuleze accidente și, de asemenea, poluare obișnuită.

Cercetarea celor trei râuri diferite și dezvoltarea modelelor au aratat că studiile referitoare la calitatea apei, și în special modelarea transportului poluanților, sunt foarte dificile și anevoios de desfășurat. Pentru că râurile implică fenomene complexe studiul lor necesită o cantitate mare de date experimentale și suport tehnic. Chiar și cel mai simplu caz din această teză (Murray Burn pentru care experimentele descriu o descărcare de poluant conservativ provenit de la o sursă punctiformă instantanee) s-a dovedit a fi un exercițiu de modelare a transportului poluanților foarte provocator, necesitând mult timp și date experimentale amănunțite.

Dezvoltarea de modele pentru cazuri foarte diferite a fost posibilă prin abordarea sistemică a modelării și utilizarea unor metode de inginerie de proces și instrumente specifice (de exemplu, abordările inovative pentru descrierea râurilor, folosirea de algoritmi de optimizare originali elaborați pentru fiecare studiu de caz).

Interesul nu a fost doar acela a avea cele mai bune instrumente de predicție a transportului poluanților, însă și de a utiliza parametri fiabili, și de a face modele aplicabile pentru alte studii de caz (râuri similare). Aceste obiective au fost realizate prin intermediul unor studii ample asupra parametrilor și prin prezentarea de modele pentru estimarea parametrilor caracteristici transportului (coeficientul de dispersie, viteza, constantele vitezelor de transformare) și, de asemenea, prin utilizarea metodelor noi de parametrizare (pentru utilizarea de parametri variabili în modelele analitice și includerea influențelor la locația reală).

Instrumentele de modelare dezvoltate în această teză sunt de interes pentru agenții economici, agențiile de mediu și universități. Astfel de sisteme oferă sprijin și deschid noi posibilitati pentru noi metode de modelare, facilitățile de monitorizare, precum și pentru instrumente de management a calității apei râului (de exemplu, sisteme de contracarare în timp real a poluării). Ele sunt utile, de asemenea, pentru estimarea impactului asupra mediului a unor posibile modificări tehnologice, deoarece pot fi aplicate în etapa de proiectare și în utilizarea practică a proceselor.

Utilizarea modelelor drept instrumente de sprijin pentru luarea deciziilor cu privire la calitatea apei, și ca instrumente de învățare sau de formare profesională reprezintă o realizare realistă a tezei de față.

Contribuții personale

Literatura de specialitate din domeniul modelării calității apelor curgătoare este destul de bogată în studii privind Murray Burn și Swale, în timp ce o cantitate foarte mică de astfel de studii sunt referitoare la râul Someș. **Realizările acestei teze** legate de fiecare dintre cele trei râuri sunt prezentate în Tabelul 3.

Tabelul 3. Contribuțiile tezei pentru cele trei râuri cercetate.

Râul	Contribuțiile tezei
Murray Burn	<p>Studiu comparativ al modelelor matematice pentru evaluarea vitezei și coeficientului de disepie</p> <p>Dezvoltarea modelelor pentru estimarea parametrilor pentru un palier mare de debit</p> <p>Dezvoltarea unui model analitic în Matlab pentru transportul trasorului conservativ provenit dintr-o sursă instantanee punctiformă</p> <p>Dezvoltarea unui model numeric în Comsol pentru transportul trasorului conservativ provenit dintr-o sursă instantanee punctiformă</p> <p>Calibrarea și validarea modelelor</p> <p>Investigarea mai multor variante pentru algoritmul de calibrare în vederea obținerii de rezultate mai robuste</p> <p>Dezvoltarea și verificarea noii abordări pentru parametrizarea râului care permite folosirea de parametri variabili în modelele analitice</p>
Swale River	<p>Modele pentru estimarea vitezei și coeficientului de dispersie pentru un palier mare de debit</p> <p>Modele pentru estimarea constantelor de referință pentru vitezele de transformări ale nutrienților</p> <p>Dezvoltarea unui model analitic în Matlab (ADModel) pentru transportul a 4 nutrienți neconservativi proveniți din multiple surse de poluare și afluenți caracterizați de debit și concentrație variabile în time</p> <p>Implementarea influențelor la locația reală de-a lungul râului, nu la începutul segmentelor de râu ca în modelele existente (ex: QUESTOR)</p> <p>Calibrarea și validarea ADModel</p> <p>Algoritm original folosit în timpul calibrării</p>
Someș River	<p>Dezvoltarea de modele pentru descrierea variabilității în spațiu a parametrilor albiei râului</p> <p>Identificarea de modele pentru estimarea parametrilor de transport prin utilizarea unor ustensile de inginerie de proces</p> <p>Dezvoltarea de modele analitice în Matlab pentru trei tipuri de surse de poluare: continue punctiforme, instantanee punctiforme și instantanee nepunctiforme</p> <p>Implementarea și verificarea unei a doua noi abordări pentru parametrizarea râului</p> <p>Studiu de poluare al râului Someș cu identificarea segmentului critic și a poluanților și surselor de poluare importante</p>

Rezultatele acestei teze rezultă într-o abordare specifică ingineriei de proces asupra modelării transportului poluanților în râuri. Acestea contribuie la domeniul de cercetare a transportului poluanților în râuri prin următoarele **contribuții principale**.

- Dezvoltarea calibrarea și evaluarea de modele pentru transportul poluanților folosind soluții analitice ale ADE. Modele detaliate capabile să simuleze concentrația în pași de timp mici (până la o oră) nu au fost implementate anterior într-un mod similar pentru studiile de caz investigate.
- Investigarea metodelor de estimare a parametrilor de transport a poluanților (viteza, coeficientul de dispersie longitudinală și constantele vitezelor de transformare).
- Identificarea unor noi tehnici și metode utile pentru modelarea transportului poluanților în râuri cu utilizarea de soluții analitice ale ADE: de exemplu, abordările inovative

pentru parametrizarea lungimilor de râu; algoritmi originali de optimizare pentru a fi utilizați în timpul calibrării modelelor.

- O caracteristică importantă a acestei teze este abordare sistemică caracteristică ingineriei de proces, aplicată pentru cercetarea unor studii de caz foarte diferite. Aspecte relaționate sunt: metodologia sistemică de modelare; reprezentarea cât mai bună a fenomenelor; flexibilitatea modelelor; utilizarea ulterioară a rezultatelor (de exemplu, aplicarea pentru alte studii de caz).
- Nivelul de detaliu al reprezentării caracteristicilor râurilor aduce, de asemenea, valoare adăugată acestei cercetări, în comparație cu lucrările anterioare publicate pentru cele trei studii de caz.

Cantitatea de studii de caz, varietatea lor și, de asemenea, importante contribuții personale fac prezenta teză valoroasă pentru domeniul calității apei atât în practică cât și în cercetare.

BIBLIOGRAFIE SELECTIVĂ

1. **Ani, E.C.**, Hutchins, M.G., Kraslawski, A., Agachi, P.Ș., 2010a. Mathematical model to identify nitrogen variability in large rivers. *River Research and Applications*, 26, 1-21.
2. **Ani, E.C.**, Avramenko, Y., Kraslawski, A., Agachi, P.Ș., 2010b. Identification of pollution sources in Romanian Someș River using graphical analysis of concentration profiles. *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, in press.
3. **Ani, E.C.**, Cristea, V.M., Agachi, P.Ș., Kraslawski, A., 2010c. Dynamic Simulation of Someș River Pollution Using MATLAB and COMSOL Models. *Revista de Chimie*, 61.
4. **Ani, E.C.**, Wallis, S.G., Kraslawski, A., Agachi, P.Ș., 2009. Development, calibration and evaluation of two mathematical models for pollutant transport in a small river. *Environmental Modelling and Software*, 24, 10, 1139-1152.
5. Avramenko Y., **Ani E.C.**, Kraslawski A., Agachi P.Ș., 2009. Mining of graphics for information and knowledge retrieval. *Computers and Chemical Engineering*, 33, 3, 618-627.
6. Chendrean, G., 2009. *Transportul poluanților în Someșul Mic pe tronsonul amonte-aval Cluj-Napoca: modele pentru evaluarea parametrilor de transport și predicția concentrației poluanților*. BSc. Thesis, Faculty of Chemistry and Chemical Engineering, Babes-Bolyai University, Cluj-Napoca, pp. 107.

7. Chin, D.A., 2006. *Water-quality engineering in natural systems*. John Wiley & Sons, Inc., 91-191.
8. Cristea, V.M., Bagiu, E.D., Agachi, P.S., 2010. Simulation and Control of Pollutant Propagation in Someş River Using Comsol Multiphysics. In: Pierucci S., Buzzi Ferraris G. (Eds.), *20th European Symposium on Computer Aided Process Engineering – ESCAPE20*, Ischia, Italy, Elsevier, 985-990.
9. Eatherall, A., Boorman, D.B., Williams, R.J., Kowe, R., 1998. Modelling in-stream water quality in LOIS. *Sci. Total Environ.*, 210/211, 499-517.
10. Fischer, H.B., Liet, E., Koh, C., Imberger, J., Brooks, N., 1979. *Mixing in Inland and Coastal Waters*. Academic Press, New York, 1-147.
11. Iwasa, Y., Aya, S., 1991. Predicting longitudinal dispersion coefficient in open-channel flows. *Proceedings of the International Symposium on Environmental Hydraulics*, Hong Kong, 505-510.
12. Liu, H., 1977. Predicting dispersion coefficients of streams. *Journal of the Environmental Engineering Division*, 103, EE1, 59-69.
13. McQuivey, R.S., Keefer, T.N., 1974. Simple Method for Predicting Dispersion in Streams. *Journal of the Environmental Engineering Division*, 100, EE4, 997-1011.
14. Ng, A., Perera, B.J.C., 2005. River Water Quality Calibration. In: Lehr, J. (Ed.). *Water Encyclopedia: Water Quality and Resource Development. Volume 1. Domestic, Municipal, and Industrial Water Supply and Waste Disposal*, John Wiley & Sons, Inc., 331 – 336.
15. Pujol, Ll., Sanchez-Cabeza, J.A., 2000. Use of tritium to predict soluble pollutants transport in Ebro River waters (Spain). *Environmental Pollution*, 108, 257-269.
16. Rode, M., Suhr, U., Wriedt, G., 2007. Multi-objective calibration of a river water quality model – Information content of calibration data. *Ecological Modelling*, 204, 129–142.
17. Rosca-Bocancea, E., Agachi, P.S., 2001. Distribution of contaminant concentration in rivers: numerical simulation, testing and practical applications. *12th Romanian International Conference on Chemistry and Chemical Engineering (R.I.C.C.C.E '12)*, 13-15 September, Bucharest, Web: <http://www.cael.pub.ro/SiteulCAEL/cicic/engleza/rezumate.htm>.
18. Rosca-Bocancea, E., Agachi, P.S., 2000. River water pollution simulation program. *14th International Congress of Chemical and Process Engineering (Chisa 2000)*, Prague, Web (11/2005): <http://www.chisa.cz/2000/chisa-scipgm-p7.html>, P7.118.

19. Socolofsky, S.A., Jirka, G.H., 2005. *Special Topics in Mixing and Transport Processes in the Environment*. Engineering – Lectures. 5th Edition. Coastal and Ocean Engineering Division. Texas A&M University, pp. 184.
20. Wallis, S.G., Manson, J.R., 2005. On the theoretical prediction of longitudinal dispersion coefficients in a compound channel. In: Czernuszenko, W. and Rowinski, P.M. (Eds.), *Water Quality Hazards and Dispersion of Pollutants*, Springer, New York, 69-84.
21. Wallis, S.G., Manson, J.R., 2004. Methods for predicting dispersion coefficients in rivers. Proceedings of the Institution of Civil Engineers. *Water Management*, 157(WM3), 131-141.
22. Whitehead, P.G., Williams, R.J., Hornberger, G.M., 1986. On the identification of pollutant tracer sources using dispersion theory. *Journal of Hydrology*, 84, 273-286.