CZU: 517.9:[54 + 574]
https://doi.org/10.59259/PRTEP20232_01

1. MODELAREA MATEMATICĂ A PROCESELOR CHIMICE ÎN MEDIUL AMBIANT

Gheorghe DUCA
Institutul de Chimie, Universitatea de Stat din Moldova

Rezumat. Lucrarea prezentă descrie metodologia și pune accent pe eficiența modelării matematice în chimie și mediui pentru reprezentarea și analizarea comportamentului sistemelor chimice complexe. Ecuațiile diferențiale și alte relații matematice ajută cercetătorii să obțină o înțelegere mai profundă a interacțiunilor și proceselor chimice în diferite condiții de mediu. Capitolul, de asemenea, modelarea migrației poluanților în mediile acvatice. Aceste modele iau în considerare factori precum viteza curgerii apei, proprietățile fizico-chimice ale poluanților și interacțiunile cu sedimentele și biota.

Cuvinte chee: Modelare matematică, mediu ambiant, ecuații diferențiale, modelare ecologică, migrația poluanților

MATHEMATICAL MODELING OF CHEMICAL PROCESSES IN THE ENVIRONMENT

Summary. *The present paper describes the methodology and emphasizes the effectiveness of mathematical modeling in chemistry and the environment for representing and analyzing the behavior of complex chemical systems. Differential equations and other mathematical relationships help researchers gain a deeper understanding of chemical interactions and processes under various environmental conditions. The chapter also presents modeling of pollutant migration in aquatic environments. These models take into account factors such as water flow velocity, physicochemical properties of pollutants, and interactions with sediments and biota.*

Key words: *Mathematical modeling, environment, diferential equations, ecological modeling, pollutantsmigration*

INTRODUCERE

Necesitatea modelării matematice a devenit un obiectiv integral a oricărei cercetari [1], iar modelarea matematică a proceselor chimice în mediul ambiant reprezintă un domeniu important a cercetărilor fizico-chimice și ecochimice. Cu avansul tehnologic rapid, capacitatea computerelor crește constant [2], dar dezvoltarea software-ului adecvat pentru aceste capacități nu a evoluat în aceeași măsură. Astfel, cererea de software pentru analiza

sistemelor complexe crește mai repede decât oferta, subliniind importanța dezvoltării și implementării de instrumente software pentru cercetarea și analiza proceselor redox.

Modelarea matematică a proceselor chimice în mediul ambiant reprezintă o unealtă esențială pentru dezvoltarea soluțiilor sustenabile și pentru gestionarea impactului activităților umane asupra mediului ambiant. Prin combinarea cunoștințelor chimice și matematice, se pot dezvolta modele precise și relevante, contribuind la protejarea mediului și la promovarea unor practici industriale mai sustenabile [3].

ROLUL MODELĂRII MATEMATICE ÎN CHIMIE

Modelarea matematică în chimie oferă o modalitate eficientă de a reprezenta și analiza comportamentul sistemelor chimice complexe [2]. Prin formularea ecuațiilor diferențiale și a altor relații matematice, cercetătorii care au prezentat unele articole din culegere au obținut o înțelegere mai profundă a interacțiunilor chimice și a proceselor care au loc în diverse condiții de mediu. Aceasta facilitează evaluarea impactului unor factori specifici asupra reacțiilor chimice, oferind astfel o bază solidă pentru proiectarea și optimizarea proceselor chimice.

MODELAREA PROCESELOR CHIMICE ÎN MEDIUL AMBIANT (CHIMIA ECOLOGICĂ)

Modelarea matematică a proceselor chimice în mediul ambiant are un impact semnificativ în dezvoltarea și optimizarea proceselor tehnologice, dar și în înțelegerea fenomenelor fundamentale chimice din mediu [4]. Acest domeniu interdisciplinar folosește ecuații matematice pentru a descrie și anticipa comportamentul sistemelor chimice în diverse condiții. Această monografie explorează importanța modelării matematice în chimie și modul în care aceasta poate contribui la soluționarea problemelor specifice mediului ambiant.

Modelarea proceselor chimice în mediul ambiant este crucială pentru abordarea provocărilor legate de sustenabilitate și protecția mediului. Aceste modele permit analiza ciclurilor de viață ale substanțelor chimice, evaluarea impactului asupra resurselor naturale și identificarea strategiilor pentru reducerea emisiilor și generarea deșeurilor [5].

Din acest motiv modelarea matematică a proceselor chimice în mediul ambiant reprezintă o ramură importantă a științelor chimic-ecologice, având un impact semnificativ în dezvoltarea și optimizarea proceselor tehnologice, dar și în înțelegerea fenomenelor fundamentale chimice și ecologice din mediul ambiant. Acest domeniu interdisciplinar implică utilizarea ecuațiilor matematice pentru a descrie și anticipa comportamentul sistemelor chimice în diverse condiții. În această carte și inclusiv acest articol, vom explora importanța modelării matematice în chimie și modul în care aceasta poate contribui la soluționarea problemelor specifice mediului ambiant.

Toate transformările chimice, indiferent de starea specifică de agregare sunt rezolvate sub formă de ecuații liniare pentru concentrațiile componentelor $x_{1,}...x_n$ [3]:

$$\frac{dx1}{dt} = F1(x_1,\ldots x_n) \quad (1)$$

$$\frac{dx2}{dt} = F2(x_1,\ldots x_n) \quad (2)$$

…

$$\frac{dxn}{dt} = Fn(x_1,\ldots x_n) \quad (3)$$

unde părțile din dreapta sunt în general supuse legii acțiunii maselor, adică ele reprezintă polinoame de gradul nu mai mare decât al treilea. Pentru a rezolva astfel de sisteme, avem nevoie numai de stabilirea condițiilor inițiale, adică a unui vector de concentrații la un anumit moment (inițial). În unele cazuri, nici măcar nu este necesar să se cunoască setul exact de constante de viteză, deoarece este de obicei suficient să cunoaștem constanta de viteză a reacției limită.

Pentru reacții mai rapide, o anumită valoare a constantei de viteză nu are niciun efect și nici un impact asupra vitezei de apariție a produsului final, deși joacă un rol semnificativ în stabilirea concentrațiilor cvasi-echilibrate sau cvasi-staționare ale substanțelor active intermediare. Noi am făcut simplificări evidente ale sistemelor reale acceptate pentru analiză din acest caz: concentrațiile sunt considerate a fi distribuite pe întregul volum al reactorului și este strict uniform, reacția are loc într-un regim izoterm, toate constantele de viteză nu depind în mod explicit de timp.

Modelarea proceselor chimice în mediul ambiant este crucială pentru a aborda provocările legate de sustenabilitate și protecția mediului. Astfel de modele permit analiza ciclurilor de viață ale substanțelor chimice, evaluarea impactului asupra resurselor naturale și identificarea strategiilor pentru reducerea emisiilor și generarea deșeurilor.

În cadrul acestei modelări [6], un aspect esențial îl reprezintă considerarea condițiilor ambientale variabile, precum temperatură, presiune și compoziția mediului ambiant. Ecuațiile care descriu reacțiile chimice trebuie adaptate pentru a reflecta schimbările în parametrii de mediu, asigurând astfel o predictibilitate cât mai precisă a comportamentului sistemelor chimice în diverse situații.

Examinăm exemplul de modelare matematică [5] a migrației poluanților în mediul acvatic care implică dezvoltarea de modele care să simuleze modul în care diferiți poluanți se deplasează și se distribuie în apele de suprafață și subterane. Aceste modele au fost utilizate in capitolele prezentate de cercetatorii de la Dpt de Chimie Industrială și Ecologica ”Academician Gheorghe Duca” de la Universitatea de Stat din Moldova pentru a evalua impactul potențial al poluanților asupra mediilor acvatice și pentru a ghida strategiile de gestionare a calității apei. Iată câteva aspecte cheie ale acestor modele [3,5,6]:

1. Modelarea se bazează adesea pe ecuații diferențiale parțiale care descriu transportul și dispersia poluanților. Aceste ecuații iau în considerare factori precum

viteza de curgere a apei, proprietățile fizico-chimice ale poluanților și interacțiunile cu sedimentele și biota.

2. Modelele trebuie să includă procesele hidrologice (cum ar fi precipitațiile, evaporarea, infiltrarea) și hidrodinamice (cum ar fi curgerea apei, valurile, și mișcările de maree) care influențează transportul poluanților.
3. Poluanții pot suferi transformări chimice și biologice în mediul acvatic, precum oxidarea, reducerea, adsorbția, desorbția și degradarea biologică. Modelele trebuie să includă aceste procese pentru a prezice corect comportamentul poluanților.
4. Datorită complexității proceselor implicate, modelarea numerică este frecvent utilizată. Aceasta implică discretizarea ecuațiilor și utilizarea algoritmilor computaționali pentru a simula comportamentul poluanților pe parcursul timpului și în spațiu.
5. Este esențial să se valideze modelele cu date experimentale pentru a asigura că acestea oferă predicții precise. Acest lucru poate implica ajustarea parametrilor modelului pentru a se potrivi mai bine cu observațiile de teren.
6. Modelele s-au utilizat pentru a rula scenarii diferite, de exemplu, pentru a evalua impactul unor noi surse de poluare, pentru a prezenta capacitatea de autopurificare a apelor naturale sau eficacitatea unor măsuri de remediere.
7. Au fost folosite numeroase pachete software disponibile pentru modelarea transportului de poluanți în mediul acvatic, fiecare cu propriile sale caracteristici și capabilități.

Aceste modele sunt instrumente valoroase în gestionarea resurselor de apă și protejarea mediilor acvatice de efectele nocive ale poluării.

Au fost utilizate ecuații cinetice pentru a descrie viteza de degradare a substanțelor poluante în aer, apă sau sol.

Au fost simulate procese de neutralizare a deșeurilor periculoase pentru a optimiza utilizarea reactivilor și minimiza generarea de deșeuri.

S-au folosit ecuațiile difuziei pentru a evalua răspândirea substanțelor chimice în sol și apă și pentru a preveni contaminarea mediului.

Modelarea matematică a proceselor chimice în chimia ecologică este o unealtă esențială pentru cercetători noștri în eforturile lor de a dezvolta soluții sustenabile [7,8] și de a gestiona impactul activităților umane asupra mediului ambiant. Prin integrarea cunoștințelor chimice și matematice, s-au crea modele precise și relevante, care au contribuit la protejarea mediului și la promovarea unor practici mai sustenabile.

Modelarea migrației poluanților în mediul acvatic a fost pentru a descrie transportul și dispersia acestora în apă. Există mai multe modele matematice diferite, dar în general, s-au utilizat ecuații de transport și dispersie advection-diffusion pentru a reprezenta acest

proces. Iată câteva ecuații matematice de bază folosite pentru modelarea migrației poluanților în mediul acvatic [2-4]:

1. ***Ecuația de transport advection-diffusion:***

Această ecuație descrie transportul unui poluant în apă datorită advecției (mișcarea fluidului) și difuziei (dispersia poluantului în apă). Ecuația este dată sub forma generală:

$$\partial C/\partial t + u\, \partial C/\partial x = D\, \partial^2 C/\partial x^2 \qquad (4)$$

unde:

C - este concentrația poluantului în apă (de obicei în unități de masă sau concentrație molară),

t - este timpul,

x - este distanța sau poziția în direcția fluxului apei,

u - este viteza advecției (mișcarea fluidului),

D - este coeficientul de dispersie (difuzie), care descrie cât de repede se răspândește poluantul în apă.

Această ecuație poate fi extinsă și ajustată în funcție de condițiile specifice ale mediului acvatic și ale poluantului.

2. ***Ecuația de sorbție:***

Această ecuație poate fi utilizată pentru a descrie modul în care poluanții se leagă de particulele solide din apă (sedimente, particule suspendate). Ea poate fi utilizată în combinație cu ecuația de transport advection-diffusion pentru a modela migrația poluanților care se adsorb pe particule. Ecuația de sorbție arată astfel:

$$\partial(Cp)/\partial t = Kd\, \partial C/\partial x \qquad (5)$$

unde:

Cp - este concentrația poluantului legat de particule,

Kd - este coeficientul de distribuție (care indică cât de puternic se leagă poluantul de particulele solide).

Această ecuație poate fi folosită pentru a evalua transferul poluanților între apa lichidă și particulele solide.

3. ***Ecuația de difuzie,*** care descrie cum se schimbă concentrația unei substanțe în timp și spațiu datorită procesului de difuzie:

$$\partial C/\partial t = D\nabla^2 C \qquad (6)$$

în care :

$\partial C/\partial t$ - este o derivată parțială a concentrației C în raport cu timpul t. Ea reprezintă rata de schimbare a concentrației în timp.

D - este coeficientul de difuzie, care măsoară cât de repede se răspândește substanța în mediu.

$\nabla^2 C$ (sau ΔC) - este operatorul Laplacian aplicat concentrației C, care prezintă o măsură a ratei de schimbare a unei cantități în spațiu.

4. Ecuația matematică de descompunere a poluanților în apă poate fi reprezentată sub forma unei ecuații cinetice de descompunere. Iată o formă generală a unei astfel de ecuații:

$$\partial[C]/\partial t = -k[P] \qquad (7)$$

unde:

$\partial[P]/\partial t$ - reprezintă rata de schimbare a concentrației poluantului în timp (exprimată în unități de concentrație pe unitate de timp, de obicei, mol/l sau mg/l pe secundă);

[P] - reprezintă concentrația poluantului în apă la un moment dat (exprimată în mol/l sau mg/l);

k - este constanta de viteză a descompunerii, care descrie cât de rapid are loc procesul de descompunere a poluantului (exprimată în unități de timp inverse, de obicei, secunde inverse sau ore inverse).

REFERINȚE BIBLIOGRAFICE

1. SMITH, J. K.; & JOHNSON, A. B. "Mathematical Modeling of Chemical Processes." Ed.: Wiley, 2018.
2. БРИН, Э.Ф.; ТРАВИН, С.О. Моделирование механизмов химических реакций Химическая физика. 1991, 10(6), 830.
3. TRAVIN, C.O. Математические методы анализа и моделирования физико-химических и экологических процессов. Autoreferat, 2023, Moscova.
4. ТРАВИН, С.О. Современные методы математического моделирования химических и биологических процессов в окружающей среде, Химическая безопасность. 2018,. 2(1), 22-49.
5. ТРАВИН, С.О.; РОЩИН, А.В.; ДУКА, Г.Г. Применение метода Монте-Карло в решении задач экологической химии. *Химическая безопасность (Chemical Safety Science)*. 2020, 4(2), 34-35. - DOI: 10.25514/CHS.2020.2.18003.

6. DUCA, Gh.; TRAVIN, S.; VASEASHTA, A.; GLADCHI, V.; KOZLOV, Yu. Global Warming - Pro and Contrary Interpretations Using Modelling and Analysis of Two Cities. Int. J. Gloval Warming. 2021, 24(2), 108-130.
7. ЯЛТЫЧЕНКО, О.В.; ДУКА, Г.Г.; ГОРИНЧОЙ, Н.Н. Моделирование кинетики иммунной реакции организма на вирусную нагрузку. In: The 13th International scientific and practical conference “Modern directions of scientific research development”, June 15-17, 2022, Chicago, USA. 2022, 65-70.
8. АБРАМОВ, С.М.; ДУКА, Г.Г.; ТРАВИН, С.О. Модель упущенных возможностей - новый подход к мониторингу, анализу и прогнозу государственной статистики об эпидемии коронавируса в России. Доклад на общероссийском семинаре "Информатика, управление и системный анализ", Заседание №61, 20.04.2021, Москва, Российская Федерация. https://www.dropbox.com/s/47tjjhb8kllj1nq/2021-04-06 ОНИТ РАН доклад Модель упущенных возможностей .pptx?dl=0&fbclid=IwAR1gJGJd9JpzCg2TfbihVBYayaCD7fSsrOw3zKotQqe3TWAmMojAeSDL2Qg