

**UNIVERSITATEA TEHNICĂ A MOLDOVEI**

Cu titlu de manuscris  
C. Z. U: 681.5.013/681.511.26

**MARUSIC GALINA**

**MODELAREA EVOLUȚIEI SPAȚIO-TEMPORALE A  
CARACTERISTICILOR ECOSISTEMELOR ACVATICE DE TIP  
RÎU ÎN VEDEREA ESTIMĂRII PARAMETRILOR CALITĂȚII  
APELOR**

**122.03 – MODELARE, METODE MATEMATICE, PRODUSE PROGRAM.**

**Autoreferatul tezei de doctor în informatică**

**CHIȘINĂU, 2015**

**Teza a fost elaborată în cadrul catedrei „Informatică Aplicată”  
a Universității Tehnice a Moldovei**

**Conducător științific:**

**Moraru Vasile** – doctor în științe fizico-matematice, conferențiar universitar

**Referenți oficiali:**

**Bostan Viorel** – doctor habilitat în tehnică, profesor universitar, UTM,

**Căpățână Gheorghe** – doctor în tehnică, profesor universitar, USM.

**Componența Consiliului Științific Specializat:**

**Guțuleac Emilian** – doctor habilitat în tehnică, profesor universitar, UTM – **președinte CȘS,**

**Zaporojan Sergiu** – doctor în tehnică, conferențiar universitar, UTM – **secretar științific,**

**Lupașcu Tudor** – doctor habilitat în chimie, profesor universitar, membru corespondent al AȘM

**Ciufudean Călin** – doctor inginer, conferențiar universitar, Universitatea „Ștefan cel Mare” din Suceava, România,

**Puțuntică Anatolie** – doctor în geografie, conferențiar universitar, Serviciul Hidrometeorologic de Stat.

Susținerea va avea loc la 04 iulie 2015, ora 09.00, în Ședința Consiliului Științific Specializat D 31.122.03-02 din cadrul Universității Tehnice a Moldovei pe adresa: str. Studenților 9/7, blocul de studii Nr. 3, aud. 208, MD-2045, Chișinău, Republica Moldova.

Teza de doctor și autoreferatul pot fi consultate la Biblioteca tehnico-științifică a Universității Tehnice a Moldovei și pe pagina web a CNAA ([www.cnaa.md](http://www.cnaa.md)).

Autoreferatul a fost expediat la 02 iunie 2015

Secretar științific al Consiliului Științific Specializat,

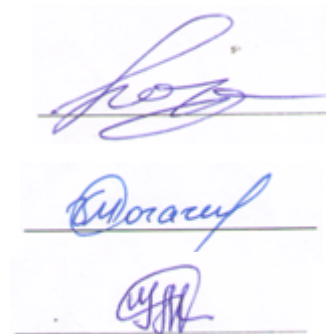
**Zaporojan Sergiu**, dr., conf. univ.

Conducător științific,

**Moraru Vasile**, dr., conf. univ.

Autor

**Marusic Galina**



## REPERE CONCEPTUALE ALE CERCETĂRII

**Actualitatea temei.** Calitatea apei constituie o problemă primordială pentru dezvoltarea durabilă a țării. La ora actuală în majoritatea regiunilor de pe Glob se resimte o degradare continuă a calității apei. Pentru a stopa acest proces este necesară inițierea unor studii și acțiuni complexe de către specialiști din diverse domenii.

În Republica Moldova folosința și protecția apelor sunt gestionate de către stat printr-un șir de acte legislative și normative. Cadrul legislativ național este armonizat continuu cu cele mai importante directive ale Consiliului Europei în domeniul resurselor de apă. Conform Directivei Cadru Apă 2000/60/EC, aprobată de către Comisia Europeană, este necesar să fie asigurată starea „foarte bună” pentru toate corpurile de apă.

În rezultatul activităților umane, calitatea apei s-a diminuat dramatic. Evaluarea calității mai multor corpuri de apă, în conformitate cu cerințele Directivei Cadru Apă, denotă o stare ecologică satisfăcătoare sau nesatisfăcătoare. În scopul reabilitării și menținerii sistemelor acvatice într-o stare „foarte bună”, apare necesitatea unei analize minuțioase a acestora.

În majoritatea cazurilor, pentru necesitățile umane se folosește apa din râuri, cum ar fi alimentarea cu apă, irigații, generarea energiei etc. În urma proceselor de eroziune și sedimentare, forma râului se află într-o continuă schimbare și influențează parametrii de calitate ai apei [15].

Calitatea apei din râuri tot mai frecvent este influențată și de poluarea cu diferite substanțe chimice, fizice și biologice. Conform literaturii de specialitate, există diferite metode analitice de determinare a calității apei, în funcție de parametrii și normele naționale stabilite în domeniu. De regulă, aceste metode cuprind: selectarea parametrilor, ajustarea unităților de măsură la aceeași scară, stabilirea ponderii fiecărui parametru și calculul indicelui calității apei [16].

În ultimul timp, pentru controlul poluării apei se implementează metode mai eficiente decât cele analitice utilizate anterior. Eficiența acestora rezidă în aplicarea sistemelor informaționale formate din două componente: modelarea matematică a sectorului de râu studiat și evaluarea calității apei prin intermediul modelelor numerice obținute [10, 21, 22].

Un instrument esențial în calcularea clasei de calitate a apei, precum și determinarea evoluției spațio-temporale a poluanților în scopul prevenirii situațiilor excepționale, îl constituie modelarea matematică și numerică a sistemelor de tip râu. Alegerea modelului matematic și al programului de simulare adecvate va permite evaluarea corectă a calității apei [22, 23].

Problema calității apei este foarte actuală și pentru Republica Moldova. Calitatea apelor din țară, în majoritatea cazurilor, nu corespunde standardelor naționale și internaționale [4, 5].

**Descrierea situației în domeniul de cercetare.** În multe regiuni ale lumii există o concurență acerbă pentru apă, iar suprasolicitarea și poluarea mediului contribuie la diminuarea surselor disponibile. Presiuni suplimentare creează și schimbările climatice. În plus, în următorii 30 de ani consumul global de apă ar putea să crească cu 50%, această situație fiind cauzată de mai mulți factori, inclusiv de creșterea, dezvoltarea și urbanizarea populației.

Dat fiind faptul că problema modelării calității apei este una foarte dificilă și complexă, aceasta implică conlucrarea specialiștilor din diverse domenii: fizică, chimie, matematică, informatică, biologie, hidrologie și medicină.

Totodată, există probleme ce țin de aplicarea modelelor elaborate pentru mai multe studii de caz, determinarea coeficienților de difuzie turbulentă, optimizarea coeficienților de dispersie ș. a.

Datele expuse evidențiază importanța soluționării problemelor menționate.

**Scopul lucrării constă** în estimarea parametrilor calității apei în sistemele de tip râu prin determinarea evoluției spațio-temporale a proceselor de transport și dispersie a poluanților în baza modelării matematice, metodelor numerice și produselor program cu aplicarea rezultatelor obținute pentru râul Prut, scop atins prin următoarele obiective:

- Determinarea aspectelor cu privire la regimul de curgere turbulentă în sistemele de tip râu.
- Modelarea matematică prin ecuațiile Navier-Stokes și a ecuației dispersiei a evoluției spațio-temporale a poluanților în sistemele de tip râu.
- Modelarea și simularea numerică care au la bază tehnologia CFD, tehnica medierii Reynolds și softuri specializate pentru determinarea parametrilor caracteristici transportului poluanților și a calității apei.
- Elaborarea produsului program în scopul determinării clasei de calitate a apei.
- Crearea bazei de date cu informații referitoare la concentrațiile mediei anuale ale parametrilor calității apei și depășirile concentrațiilor maxime admisibile (CMA) pentru opt sectoare ale râului Prut: s. Criva, s. Șirăuți, s. Braniște, or. Ungheni, s. Valea Mare, or. Leova, or. Cahul, s. Giurgiulești.
- Elaborarea geometriei și a rețelelor de calcul pentru sectoarele menționate.
- Simularea CFD a transportului și dispersiei poluanților în sectoarele studiate ale râului Prut.
- Calibrarea și validarea modelelor numerice pentru transportul și dispersia poluanților.
- Analiza rezultatelor simulărilor numerice.
- Implementarea rezultatelor obținute.

**Metodologia cercetării științifice** se bazează pe utilizarea modelelor matematice, metodelor numerice și tehnologii CFD pentru simularea numerică a curgerii turbulente și a proceselor de

transport și dispersie a poluanților în sistemele de tip râu: sistemul de ecuații Navier-Stokes sub forma Reynolds; ecuația fundamentală de advecție-dispersie; metoda RANS pentru rezolvarea numerică a ecuațiilor Navier-Stokes; metoda elementelor finite; pachetul de programe specializat Surface-water Modeling System (SMS).

**Noutatea și originalitatea științifică.** Au fost identificate și argumentate modele matematice de descriere a curgerii turbulente, a proceselor de transport și dispersia poluanților în sistemele de tip râu. În acest sens, au fost identificate și aplicate metode de simulare CFD a caracteristicilor poluanților, mai sus menționate, la sistemele de tip râu. Astfel, în baza modelelor matematice argumentate și a metodelor de simulare CFD stabilite, pentru prima dată au fost construite modele de calcul pentru evoluția spațio-temporală a transportului și a dispersiei poluanților pentru opt sectoare ale râului Prut. În premieră au fost simulate situațiile de alertă în sectoarele de râu studiate, cu valori ale concentrațiilor poluanților depășind CMA. Prin detalierea modelelor numerice elaborate s-a reușit simularea variației concentrației în timp și spațiu, ceea ce a permis determinarea caracteristicilor specifice fenomenului de dispersie a poluanților implicați în simulare. În baza rețelelor de calcul elaborate ale sectoarelor considerate au fost generate modele numerice pentru determinarea evoluției spațio-temporale a diferitelor tipuri de poluanți.

Reieșind din cercetările efectuate, a fost elaborată o nouă metodă de calibrare a modelelor numerice cu privire la simularea concentrației poluanților în timp și spațiu. Rezultatele cercetării pot fi aplicate altor râuri care preiau încărcarea chimică, fizică și microbiologică ca emisar din diverse puncte sau centre de poluare.

Rezultatele cercetării reprezintă un nucleu pentru elaborarea unei platforme integrate cu privire la managementul adecvat al calității apei, cu posibilitatea de a urmări și de a estima în timp real parametrii de calitate a apelor, precum și managementul riscului de poluare a apei.

**Problema științifică soluționată** constă în *elaborarea unei metodologii* privind estimarea parametrilor de calitate ai apei în ecosistemele de tip râu în baza modelării matematice, produselor program și metodelor moderne de simulare CFD, *fapt care a condus* la posibilitatea evaluării acestor parametri în nodurile rețelei de elemente finite ale sectorului de râu studiat, *ceea ce a permis* determinarea cu o mai mare exactitate a clasei de calitate a apei și predicția situațiilor excepționale de poluare a apei.

**Semnificația teoretică.** În baza modelelor matematice au fost descrise procesele de curgere turbulentă, transport și dispersie a diferitelor tipuri de poluanți în sistemele de tip râu. S-au cercetat, dezvoltat și obținut modele numerice bazate pe metodologia CFD pentru simularea numerică atât a transportului, cât și a evoluției poluanților.

Cercetările teoretice efectuate au condus la elaborarea unor soluții inovative privind determinarea câmpului de concentrații a poluanților în timp și spațiu în vederea estimării parametrilor de calitate ai apelor.

**Valoarea aplicativă a lucrării.** Au fost elaborate modele numerice pentru estimarea parametrilor caracteristici transportului poluanților în râul Prut. S-au calibrat și validat modelele de calcul cu privire la determinarea hidrodinamicii și a proceselor ce țin de evoluția spațio-temporală a transportului și dispersiei poluanților pentru opt sectoare ale râului Prut (o varietate largă de studii de caz): s. Criva, s. Șirăuți, s. Braniște, or. Ungheni, s. Valea Mare, or. Leova, or. Cahul, s. Giurgiulești. În baza rezultatelor cercetării pot fi elaborate rețele de calcul și pentru alte sectoare ale râului Prut, precum și ale altor râuri din Republica Moldova.

Rezultatele cercetării reprezintă un instrument util pentru elaborarea unei platforme integrate privind managementul adecvat al calității apei, cu posibilitatea de a urmări și estima în timp real parametrii de calitate ai apelor.

#### **Rezultatele științifice înaintate spre susținere:**

1. Metodologia determinării evoluției spațio-temporale a transportului și dispersiei poluanților în sistemele de tip râu.
2. Modele matematice moderne de descriere a curgerii turbulente, precum și ale proceselor de transport și dispersie a poluanților în sistemele de tip râu.
3. Produsul program pentru determinarea clasei de calitate a apei râului Prut.
4. Metode moderne de simulare CFD a hidrodinamicii și proceselor de transport și dispersie a poluanților în sistemele de tip râu.
5. Practici de generare a rețelelor de calcul.
6. Calibrarea modelelor de calcul.

**Implementarea rezultatelor științifice.** Modelele numerice obținute au fost implementate în cadrul *Serviciului Hidrometeorologic de Stat* al Republicii Moldova și firmei *S.C. Software, Sisteme Informatice Bucovina S.A.* din Suceava, România, precum și în cadrul *Sistemului de Gospodărire a Apelor* din Iași, România.

**Aprobarea rezultatelor cercetărilor.** Rezultatele tezei au fost validate în cadrul lucrărilor publicate în reviste internaționale și naționale:

- „Revista de Chimie”, București, 66, Nr. 4, 2015, **cotată ISI**; „WSEAS TRANSACTIONS on FLUID MECHANICS”, Nr. 2, V. 8, 2013, indexată în **SCOPUS**; „Meridian Ingineresc”, UTM – AIM, nr. 4, 2012; nr. 2, 2013; „Academos”, Nr. 3 (30), 2013.

De asemenea, rezultatele tezei au fost prezentate la diferite conferințe internaționale și publicate în culegerile de lucrări editate în finalul acestor conferințe:

- International Conference on Microelectronics and Computer Science: ICMCS-7, 2011; Universitatea Tehnică a Moldovei, Chișinău, Republica Moldova; Modelare Matematică, Optimizare și Tehnologii Informaționale, ediția a III-a, Chișinău, Academia de Transporturi, Informatică și Comunicații, 2012; The 11<sup>th</sup> International Conference on Development and Application Systems DAS 2012, Universitatea „Ștefan cel Mare” din Suceava, România; International Conference on Analytical and Nanoanalytical Methods for Biomedical and Environmental Sciences: IC-ANMBES-2, 2012, Universitatea din Brașov, România; World Scientific and Engineering Academy and Society (WSEAS) International Conference on Mathematical and Computational Methods in Science and Engineering (MACMESE '12), Sliema, Malta, 2012; WSEAS International Conference on Applied Mathematics (AMATH'12), Montreux, Switzerland, 2012; International Conference on Environment, Ecosystems and Development (EED '13), Romania, Brasov, 2013.

Sistemul propus de monitorizare a calității surselor de apă potabilă în cadrul cererii de brevet de invenție A/00922/2012 (împreună cu un colectiv de autori de la Universitatea „Ștefan cel Mare” din Suceava, România) a fost demonstrat în cadrul a patru Saloane Internaționale și a obținut următoarele distincții: Diploma de excelență și Medalia de Bronz la Salonul Internațional al Cercetării, Inovării și Invenției PROINVENT, ediția a XI-a, Cluj Napoca, 18-23.03.2013; Diploma de excelență și Medalia de bronz la Expoziția Europeană de Creativitate și Inovare EUROINVENT, Iași, 2013; Premiul I și Medalia de aur la Zilele Tehnice Studentești – 2013, Universitatea Politehnica Timișoara, 19-24.05.2013; Premiul III și Medalia de bronz la Salonul Național de Invenție și Creație Științifică pentru Tineret GAUDEAMUS, ediția a XI-a, București, 21-24 noiembrie 2013.

**Publicații la tema tezei.** La tema tezei au fost publicate 13 lucrări științifice: un articol într-o revistă internațională cotate ISI; un articol ca singur autor într-o revistă internațională cotate SCOPUS; trei articole în reviste recenzate de circulație națională, dintre care două ca singur autor; opt articole în culegeri de lucrări ale conferințelor internaționale. Împreună cu un colectiv de autori de la Universitatea „Ștefan cel Mare” din Suceava, România, a fost depusă o cerere de brevet de invenție la OSIM din România.

**Volumul și structura tezei.** Conținutul de bază al tezei este expus pe 120 de pagini și inserează 120 de figuri și 9 tabele. Teza este compusă din introducere, trei capitole, concluzii generale, bibliografie (106 titluri) și 6 anexe.

**Cuvinte-cheie:** Modelare; simulare CFD (Computational Fluid Dynamics); Surface - Water Modeling System (SMS); rîu; calitatea apei; transportul și dispersia poluanților.

## CONȚINUTUL TEZEI

În **Introducere** sunt prezentate actualitatea și importanța temei de cercetare, scopul și obiectivele lucrării, este argumentată noutatea științifică și valoarea practică a lucrării.

**Primul capitol, *Analiza situației în domeniul modelării calității apei în sistemele de tip râu***, prezintă o trecere în revistă a problemelor calității apei la nivel național și internațional și principalele abordări privind modelarea calității apei în baza metodelor matematice și a diferitor soft-uri. Se identifică cel mai frecvent utilizat pachet de programe în scopul simulării numerice a sistemelor de tip râu - SMS (Surface Water Modeling System). Se discută starea actuală a cercetărilor în domeniul modelării calității apei râului Prut.

Pentru a descrie într-un mod adecvat evoluția sistemului studiat, modelul matematic prin intermediul metodelor numerice se transformă într-un model numeric. Modelarea numerică se realizează prin tehnici CFD, cu ajutorul cărora ecuațiile cu derivate parțiale se transformă în sisteme de ecuații algebrice, soluțiile cărora reprezintă o aproximație a mărimilor de stare în nodurile definite ale domeniului de calcul.

În Republica Moldova principală sursă de asigurare a populației cu apă potabilă sunt apele de suprafață, între care și râul Prut – unul dintre cele mai mari din republică. Acest râu ocupă 24% din teritoriul rețelei hidrografice al Republicii Moldova [1, 9].

În perioada 2007-2010 râul Prut a fost poluat cu elemente biogene din grupul azotului, cu fenol, compuși ai cuprului și produse petroliere. În conformitate cu indicii hidrochimici, calitatea apei râului Prut în perioada menționată a corespuns claselor II-III (*curată – moderat poluată*); după elementele hidrobiologice – clasei a III-a (*moderat poluată*), iar conform indicilor perifitonului și zoobentosului (în com. Valea Mare), a fost determinată ca „*moderat poluată-degradată*” [9].

În scopul evaluării calității apei râului Prut periodic se organizează diverse expediții. În urma expediției comune româno-sovietice din anii 1964-1965 s-a constatat că Prutul este cel mai curat râu din Europa Mijlocie, însă între anii 1980-1990 situația s-a agravat.

Conform Raportului din 2004 „Starea mediului în Republica Moldova”, în anii 2000-2004 calitatea apei râului Prut conform indicilor organoleptici și hidrochimici s-a îmbunătățit în comparație cu anii 1980-1990 și nu depășește clasa a III-a [8].

În urma a 9 expediții organizate în anul 2008, s-a depistat poluarea cu substanțe organice greu degradabile, compuși ai azotului și cuprului pentru toți afluenții de stînga ai râului Prut. S-a înregistrat micșorarea esențială (de la 3 până la 10 ori) a conținutului de elemente biogene,



comparativ cu anii 80-90 ai secolului trecut. S-a înregistrat un conținut înalt al substanțelor tensioactive anionice, ceea ce demonstrează poluarea menajeră [7].

În urma expediției din anul 2011 s-a constatat că calitatea apei râului Prut corespunde claselor III și IV (moderat poluată și poluată), iar afluenții fluviului sunt puternic poluați cu ioni de amoniu, azotiți, compuși ai cuprului, produse petroliere, fenoli, nitriți și un regim nesatisfăcător de oxigen [3].

În cadrul expediției din 2013, în 15 sectoare ale râului Prut, precum și în gura de vărsare a principalilor afluenți ai săi, au fost realizate investigații privind calitatea apei. Probele de apă prelevate au fost investigate în baza a 53 de indicatori de calitate. Rezultatele obținute au demonstrat o concentrație mai mare a poluanților în aval de orașele mari și la confluența cu afluenții râului. În toate probele prelevate s-au înregistrat depășiri ale CMA pentru produse petroliere [2].

Modelarea matematică și numerică a transportului și dispersiei poluanților pe unele sectoare ale râului Prut au fost realizate de către autorul lucrării de față. Hidrodinamica râului a fost modelată cu ajutorul sistemului de ecuații Navier-Stokes sub forma Reynolds. La baza procesului de modelare a dispersiei poluanților se află forma bidimensională a ecuației fundamentale de advecție-dispersie, aplicată la curgerea în regim turbulent.

Rezultatele studiului privind tehnicile software de simulare dinamică a calității apei în sistemele de tip râu sunt prezentate în lucrarea [6]. Se discută pachetele software: WASP (Water Quality Analysis Simulation Program), QUAL2E, ANSYS CFX (Computational Fluid Dynamics Software), GWLF (Generalised Watershed Loading Function), MONERIS (Modelling Nutrient Emissions in River Systems), WQRRS (Water Quality for River Reservoir Systems), WMS (Watershed Modeling System), SMS (Surface-water Modeling System). A fost realizat un studiu de caz de modelare a evoluției spațio-temporale a produselor petroliere cu utilizarea SMS pe un sector al râului Prut din localitatea orașului Ungheni, unde pe data de 16.05.2013 s-a înregistrat depășirea CMA a poluantului respectiv [6].

Problema modelării matematice și simulării numerice a procesului de dispersie a fluorului în sistemele de tip râu este expusă în lucrările [18, 20]. Fluorul are un rol deosebit pentru sănătatea umană, fiind un element chimic necesar pentru dezvoltarea corectă a dinților și oaselor scheletului, dar sănătatea umană depinde de o cantitate optimă de fluor. Se prezintă efectele negative ale fluorului asupra organismului uman și rezultatele simulărilor numerice obținute cu ajutorul soft-ului SMS [18, 20].

Stadiul actual al cercetărilor privind calitatea apei râului Prut a fost realizat de către autorul prezentei lucrări [19]. Acesta include o analiză minuțioasă a bibliografiei asupra calității apei

rîului Prut, fiind argumentată necesitatea dezvoltării și elaborării modelelor matematice de determinare și predicție a calității apei pentru sistemele de tip rîu. Este prezentat și un studiu de caz pentru determinarea dispersiei poluantului pentru un sector al rîului Prut din localitatea Ungheni, care a fost încărcat cu apă poluată cu produsele petroliere de la afluentul său rîul Delia. S-a constatat că în prezent rîul Prut este puțin studiat și necesită o investigație mai detaliată [19].

O amplă investigație cu privire la modelarea matematică a calității apei în sistemele acvatice de tip rîu este prezentată în lucrarea [21]. Sunt abordate problemele și sursele de poluare a sistemelor menționate; problema modelării matematice a proceselor de transport și dispersie a poluanților și se prezintă o clasificare a modelelor matematice folosite pentru modelarea mediului; se prezintă o analiză a lucrărilor științifice în domeniul abordat cu evidențierea modelelor matematice utilizate [21].

În baza analizei literaturii în domeniul modelării calității apei în sistemele acvatice de tip rîu, s-au formulat scopul și obiectivele lucrării.

În **capitolul doi, Modelarea matematică și numerică a transportului poluanților în sistemele de tip rîu**, sunt propuse spre examinare aspecte ce țin de mișcarea și poluarea apei în sistemele de tip rîu, se identifică modelele matematice, metodele numerice și tehnologiile CFD cu privire la determinarea evoluției spațio-temporale a dispersiei poluanților.

Curgerile turbulente ale fluidelor reale se descriu cu ajutorul ecuațiilor de mișcare Navier-Stokes și al ecuației de continuitate:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \mathbf{v} = \mathbf{f} - \frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \Delta \mathbf{v},$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v}) = 0,$$

unde  $\nabla$  este operatorul Hamilton;  $\Delta$  – operatorul Laplace;  $t$  – timpul;  $\nu$  – coeficientul de vîscozitate;  $\rho$  – densitatea;  $p$  – presiunea;  $\mathbf{v}$  – viteza fluidului;  $\mathbf{f}$  - forțele exterioare (pe unitatea de volum) care acționează asupra fluidului.

Pentru majoritatea curgerilor turbulente s-a stabilit că raportul dintre dimensiunile caracteristice ale vârtejurilor mari și mici pentru spectrul vârtejurilor turbulente este:

$$\frac{l}{\eta} \sim Re^{3/4},$$

unde  $l$  reprezintă cea mai mare scară a curgerii turbulente, care se numește scara integrală;  $\eta$  – scara cea mai mică (scara Kolmogorov);  $Re$  - numărul Reynolds [103].

Reieșind din acest fapt, identificarea tuturor soluțiilor pentru ecuațiile Navier-Stokes constituie o mare problemă care nu poate fi rezolvată, chiar dacă în acest sens ar fi utilizate supercalculatoare [24].

Pentru a reduce numărul gradelor de libertate spațio-temporale în scopul modelării curgerilor turbulente se folosesc două metode: soluționarea ecuațiilor Navier–Stokes conform abordării lui Reynolds și descompunerea filtrată a ecuațiilor Navier–Stokes [24, 11].

Pentru aplicarea sistemului de ecuații Navier-Stokes la sistemele de tip rîu au fost luate în considerație următoarele ipoteze simplificatoare:

- fluidul incompresibil newtonian cu suprafață liberă;
- neglijarea accelerației pe direcția verticală;
- echilibrul hidrostatic, conform căruia presiunea este echilibrată de forța gravitațională:

$$\nabla p + \rho g = 0,$$

unde  $p$  este presiunea;  $\rho$  – densitatea apei;  $g$  – accelerația căderii libere;

- acțiunea accelerației gravitaționale:

$$G = -g\nabla h,$$

componentele căreia în direcțiile  $x$  și  $y$ , respectiv, sunt:

$$G_x = -g \frac{\partial h}{\partial x}, \quad G_y = g \frac{\partial h}{\partial y},$$

unde  $h$  reprezintă adîncimea apei;

- rotația Pămîntului, care se ia în calcul prin efectul Coriolis, datorat forței Coriolis  $F_c$ .

Componentele accelerației Coriolis  $a_c$  în direcțiile  $x$  și  $y$ , respectiv, sunt:

$$a_{cx} = 2\omega u \sin\varphi, \quad a_{cy} = -2\omega v \sin\varphi,$$

unde  $\omega$  este viteza unghiulară de rotație a Pămîntului;  $u$  – viteza locală în direcția  $x$ ;  $v$  – viteza locală în direcția  $y$ ;  $\varphi$  – latitudinea locului;

- transferul de energie prin rugozitate. Schimbarea rugozității asigură un anumit control asupra vitezei rezultante și a direcției fluidului. Tensiunea de forfecare inferioară sau tensiunea tangențială  $\tau$  se definește ca:

$$\tau = \rho g R S,$$

unde  $R$  reprezintă raza medie hidraulică;  $S$  – panta (înclinarea) albiei.

Rugozitatea se calculează cu ajutorul ecuației Manning

$$V = \frac{R^{2/3} \cdot S^{1/2}}{n},$$

unde  $V$  este viteza medie a particulelor apei în secțiunea transversală, iar  $n$  – valoarea de rugozitate Manning.

Luînd în considerație că rază medie hidraulică  $R \approx h$  și rezolvînd ecuația Manning față de  $S$ , vom obține:

$$\tau = \rho g n^2 \frac{V^2}{R^{1/3}}$$

sau în direcțiile  $x$  și  $y$ :

$$\tau_x = \rho g n^2 \frac{u\sqrt{u^2 + v^2}}{h^{1/3}}, \quad \tau_y = \rho g n^2 \frac{v\sqrt{u^2 + v^2}}{h^{1/3}};$$

- efectele vântului, care se iau în calcul prin tensiunea de forfecare  $W$  a vântului. Tensiunea de forfecare a vântului la suprafața apei este cauzată de frecarea dintre aerul și apa în mișcare. În direcțiile  $x$  și  $y$ :

$$W_x = \xi V_a^2 \cos\psi, \quad W_y = \xi V_a^2 \sin\psi,$$

unde  $\xi$  este coeficientul empiric referitor la frecarea cu aerul;  $V_a$  – viteza vântului;  $\psi$  – direcția vântului.

Reieșind din aspectele menționate, ecuațiile Navier-Stokes devin:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + 2\omega u \sin\varphi &= \xi V^2 \cos\psi - g \frac{\partial h}{\partial x} + E_{xx} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \\ + E_{xy} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \rho g n^2 \frac{u\sqrt{u^2 + v^2}}{h^{1/3}}, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} - 2\omega v \sin\varphi &= \xi V^2 \sin\psi - g \frac{\partial h}{\partial y} + E_{yx} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \\ + E_{yy} \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \rho g n^2 \frac{v\sqrt{u^2 + v^2}}{h^{1/3}}, \end{aligned}$$

unde  $E$  sunt coeficienții de vîscozitate turbulentă.

Coeficienții de vîscozitate turbulentă reprezintă vîscozitatea moleculară și efectele turbulenței prin tensiuni turbulente sau tensiuni Reynolds:

$$\begin{aligned} E_{xx} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \overline{\delta u'^2}, \quad E_{xy} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial x} \overline{\delta u'v'}, \\ E_{yx} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} &= \nu \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial y} \overline{\delta v'u'}, \quad E_{yy} \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} = \nu \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial y} \overline{\delta v'^2}, \end{aligned}$$

unde  $\nu$  este vîscozitatea moleculară;  $u'$  – fluctuațiile vitezei turbulente în direcția  $x$ ;  $v'$  – fluctuațiile vitezei turbulente în direcția  $y$ ;  $\bar{\phantom{a}}$  – valoarea medie temporală.

În rezultatul aplicării ipotezelor simplificatoare, s-au obținut următoarele ecuații Navier-Stokes:

$$h \frac{\partial u}{\partial t} + hu \frac{\partial u}{\partial x} + hv \frac{\partial u}{\partial y} - 2hu\omega \sin\varphi - \xi V^2 \cos\psi + gh \left( \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{\partial h}{\partial x} \right) -$$

$$-h \left( E_{xx} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + E_{xy} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{\rho g u n^2}{(h^{1/6})^2} (u^2 + v^2)^{1/2} = 0,$$

$$h \frac{\partial v}{\partial t} + hu \frac{\partial v}{\partial x} + hv \frac{\partial v}{\partial y} + 2h\omega v \sin\varphi - \xi V^2 \sin\psi + gh \left( \frac{\partial H}{\partial y} + \frac{\partial h}{\partial y} \right) -$$

$$-h \left( E_{yx} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + E_{yy} \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{\rho g v n^2}{(h^{1/6})^2} (u^2 + v^2)^{1/2} = 0,$$

unde  $H$  este cota geodezică a patului albiei.

**Ecuatia de continuitate** rezultă din legea conservării masei. Pentru fluidul incompresibil newtonian cu suprafață liberă ecuația are forma:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + h \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + u \frac{\partial h}{\partial x} + v \frac{\partial h}{\partial y} = 0.$$

Ecuatiile Navier-Stokes reprezintă un sistem de ecuații diferențiale cu derivate parțiale de ordinul doi, neomogen și neliniar. Sursa principală de turbulență este considerat termenul de inerție  $v\nabla v$ , care reprezintă neliniaritatea sistemului. Rezolvarea acestor ecuații este posibilă doar pentru cazuri simplificate [12].

Fenomenul de transport și dispersie a poluanților se descrie cu ajutorul ecuației fundamentale de advecție-dispersie:

$$h \left( \frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} D_x \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} D_y \frac{\partial c}{\partial y} - \sigma + kc + \frac{R(c)}{h} \right) = 0,$$

unde  $c$  este concentrația de poluant;  $D_x$  și  $D_y$  – coeficienții de difuzie turbulentă în direcțiile  $x$  și  $y$ ;  $k$  – constanta de degradare;  $\sigma$  – termenul sursă locală de poluant;  $h$  – adâncimea apei;  $R(c)$  – precipitații/evaporație.

Relația dintre parametrii  $t$ ,  $D$  și  $u$  se stabilește prin numărul adimensional Peclet:

$$Pe = \frac{D}{u^2 t}$$

Pentru  $Pe \gg 1$  domină procesele de difuzie, iar pentru  $Pe \ll 1$  – procesele de advecție.

Coeficienții de difuzie turbulentă pot fi măsurati experimental, dar din cauza că secțiunea transversală a fluxului este rareori de adâncime uniformă, această măsurare adesea este complicată. Deseori acești coeficienți sunt determinați prin intermediul formulelor empirice.

Pentru a modela diferite procese de curgere a fluidelor, inclusiv curgerea turbulentă, și a determina parametrii curgerii, în ultimul timp se folosește pe larg analiza computațională a dinamicii fluidelor (CFD – *computational fluid dynamics*), care utilizează tehnici de calcul numeric aproximativ.

Rezolvarea unei probleme cu ajutorul CFD implică parcurgerea următorilor pași: modelarea geometriei domeniului studiat, discretizarea domeniului, definirea modelului, setarea proprietăților, stabilirea condițiilor inițiale și de limită, soluționarea, analiza rezultatelor [13, 14, 24, 17].

Pentru aproximarea ecuațiilor Navier-Stokes a fost utilizată metoda *Medierea Reynolds* (RANS). Discretizarea temporală și spațială a ecuațiilor Navier-Stokes a fost realizată cu ajutorul metodei elementelor finite.

Următorul pas în aplicarea CFD la modelarea curgerii turbulente în sistemele de tip râu este soluționarea prin rezolvarea numerică a ecuațiilor de curgere. Pentru aceasta se folosesc tehnici software de simulare dinamică. În studiile de caz prezentate în lucrarea de față a fost aplicat pachetul de programe SMS (Surface-Water Modeling System), care a fost ales în legătură cu faptul că permite gestionarea întregului proces de modelare: de la importul de date topografice și hidrodinamice până la vizualizarea și analiza soluțiilor. Reprezintă un pachet de programe performant, integrat cu modul de GIS, destinat procesului de modelare a apelor de suprafață. A fost conceput de către corpul de ingineri al armatei SUA și specialiști ai companiei *Aquaveo*. Pentru aplicarea SMS la determinarea dispersiei poluanților în sistemele de tip râu se parcurg două etape. La prima etapă se determină hidrodinamica sectorului modelat prin intermediul unui modul din SMS sub denumirea RMA2. La etapa a doua la hidrodinamica rezultată din RMA2 se aplică modulul RMA4 cu ajutorul căruia se determină evoluția cîmpului de concentrații a poluanților. Discretizarea sistemului de ecuații Navier-Stokes și a ecuației de advecție-dispersie în sistemul SMS se realizează prin metoda elementelor finite cu folosirea metodei Galerkin a reziduurilor ponderate.

În cel de-al **treilea capitol** al lucrării, *Modelarea și simularea numerică a dispersiei poluanților în râul Prut*, se realizează un studiu asupra calității apei râului Prut pentru perioada 2008-2013. În baza modelelor matematice și a metodelor numerice, precum și a tehnologiilor CFD identificate în capitolul al doilea, se realizează simularea numerică a dispersiei poluanților în opt sectoare ale râului Prut și se prezintă rezultatele simulărilor numerice. Se propune o nouă metodă de calibrare a modelelor numerice în baza valorilor optime ale numărului Peclet.

Toate simulările au fost realizate în baza datelor reale oferite de către *Serviciul Hidrometeorologic de Stat*. Au fost studiate opt sectoare ale râului Prut din localitățile Criva, Șirăuți, Braniște, Ungheni, Valea Mare, Leova, Cahul, Giurgiulești în perioada anilor 2008 - 2013. În baza valorilor indicelui de poluare a apei (IPA) a fost creat un program în limbajul Java conform schemei logice care ne permite să determinăm calitatea apei în râul Prut și în fiecare sector examinat (figura 1).

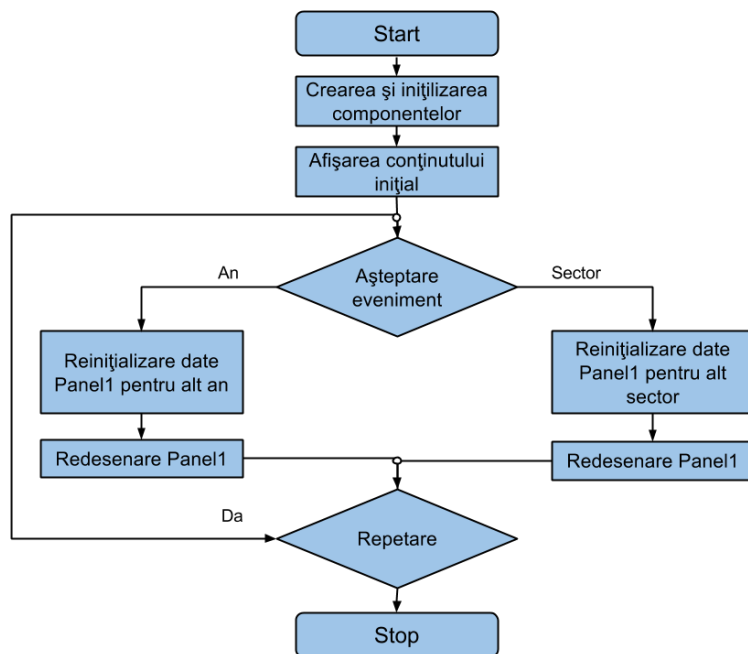


Fig. 1. Schema logică a programului.

Au fost depistați cei mai frecvenți poluanți în sectoarele considerate, reieșind din analiza buletinelor lunare ale SHS privind calitatea mediului ambiant pe teritoriul Republicii Moldova:

- s. Criva: produse petroliere, nitriți, fenoli și ioni de amoniu;
- s. Șirăuți: produse petroliere, nitriți, fenoli și ioni de amoniu;
- s. Braniște: produse petroliere, fenoli și nitriți;
- or. Ungheni: produse petroliere, compușii cuprului și fenoli;
- s. Valea Mare: nitriți, compușii cuprului, produse petroliere, fenoli;
- or. Leova: produse petroliere, fenoli și nitriți;
- or. Cahul: produse petroliere, nitriți, fenoli;
- s. Giurgiulești: produse petroliere, nitriți, compușii cuprului, ioni de amoniu, fenoli.

Pentru a prelucra informațiile cu privire la parametrii de calitate și de poluare a apei râului Prut a fost creată o bază de date cu ajutorul aplicației Microsoft Access. Datele din baza de date se vizualizează și se analizează cu ajutorul unui program ApelePrut elaborat în C++ Builder (figura 2).

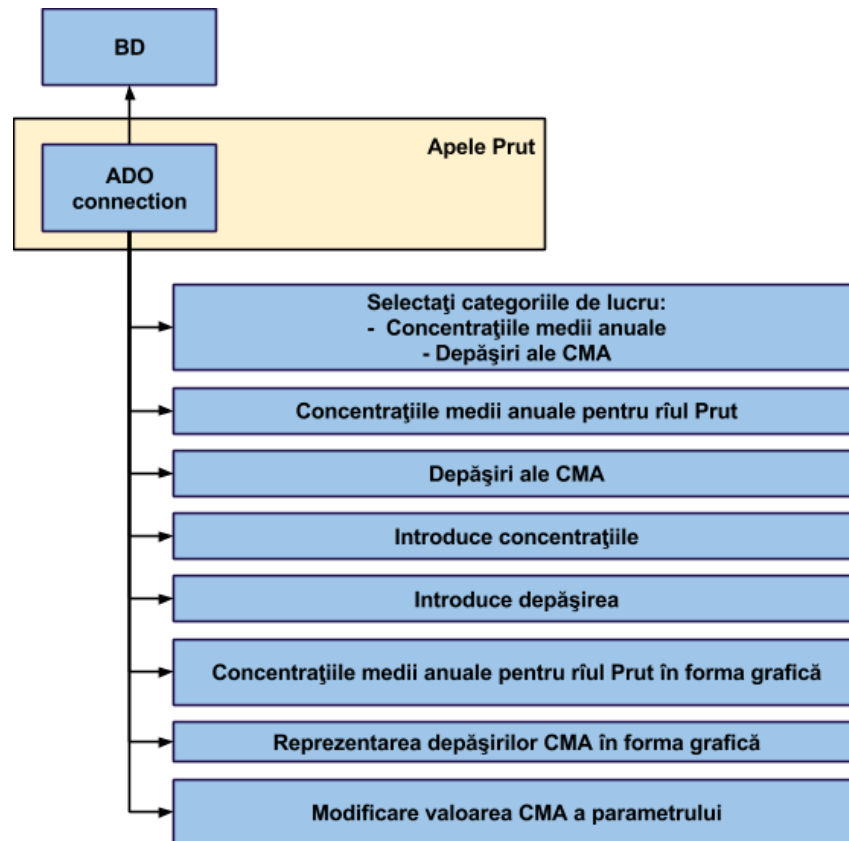


Fig. 2. Conectarea aplicației la baza de date.

Cercetările cu privire la determinarea transportului și dispersiei poluanților în sectoarele menționate au fost organizate conform schemei din figura 3.

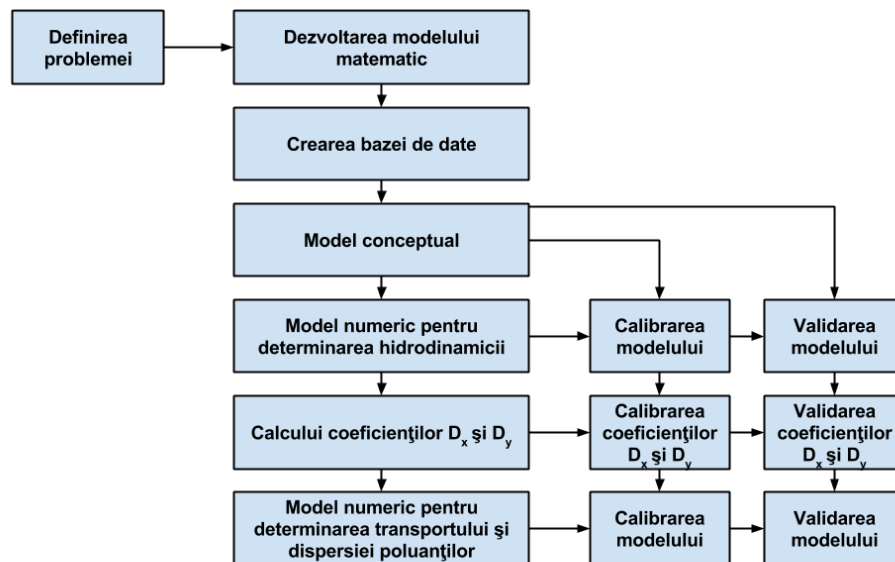


Fig. 3. Protocolul experimental utilizat în cercetare.

Următorul pas a fost examinarea informațiilor cu privire la poluarea apei și depășirile CMA ale parametrilor de calitate a apei în sectoarele studiate. Au fost identificați cei mai pronunțați poluanți în sectoarele studiate. S-a depistat că cel mai frecvent întâlnit poluant în toate



sectoarele studiate îl reprezintă produsele petroliere. Din aceste considerente pentru simulări numerice a fost ales poluantul menționat

A fost ales pachetul de programe SMS, în special modulele RMA2 și RMA4, care pot soluționa problemele de curgere a apei și a transportului de poluanți în sistemele de tip râu. Cu ajutorul pachetului de programe menționat au fost generate modele numerice în scopul estimării evoluției spațio-temporale a dispersiei produselor petroliere în sectoarele studiate.

Procesul de modelare numerică a fost realizat conform schemei din figura 4.

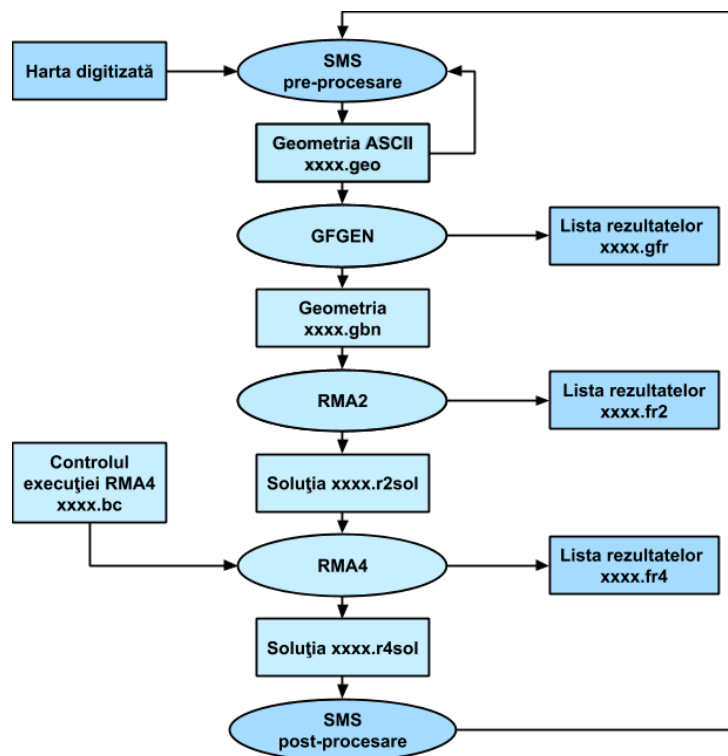


Fig. 4. Schema procesului de modelare.

Au fost obținute modele numerice pentru fiecare sector studiat. Pentru a putea fi utilizate în practică modelele numerice obținute trebuie să fie calibrate și validate. Calibrarea modelelor cu privire la simularea poluanților este dificilă, acuratețea modelului fiind afectată de complexitatea fenomenelor fizico-chimice care au loc în sistemele de tip râu. Prin urmare, calibrarea a fost realizată prin variația coeficienților de difuzie turbulentă  $D_x$  și  $D_y$ , care au fost calculați prin două modalități:

- 1) conform formulelor empirice;
- 2) în baza numărului Peclet.

Pentru fiecare sector studiat au fost calculați coeficienții menționați pentru malul stîng, malul drept și mijlocul râului. S-a constatat că varianta în care se utilizează numărul Peclet este mai bună, deoarece permite variația proprietăților locale de difuzie turbulentă în funcție de

cîmpul variabil de viteze, în comparație cu folosirea formulelor empirice, care au fost elaborate și dezvoltate în baza probelor prelevate din mai multe râuri cu diferiți parametri ai curgerii apei. În legătură cu complexitatea fenomenelor fizico-chimice care au loc în râuri, nu toate modelele pot fi aplicate unui anumit râu și există diferențe chiar și între aplicarea modelelor la același segment de râu. Erorile modelelor numerice calibrate prin cele două modalități menționate se prezintă în tabelul 1, din care se observă că erorile modelelor calibrate în baza numărului Peclet sunt mai mici comparativ cu erorile modelelor calibrate conform formulelor empirice.

Tabelul 1. Calibrarea modelelor

Denumirea sectorului	Calibrarea prin formule empirice (eroarea absolută)	Calibrarea prin numărul Peclet (eroarea absolută)
s. Criva	0,131	0,021
s. Șirăuți	0,124	0,018
s. Braniste	0,026	0,001
or. Ungheni	0,030	0,001
s. Valea Mare	0,241	0,035
or. Leova	0,312	0,065
or. Cahul	0,034	0,001
s. Giurgiulești	0,231	0,027

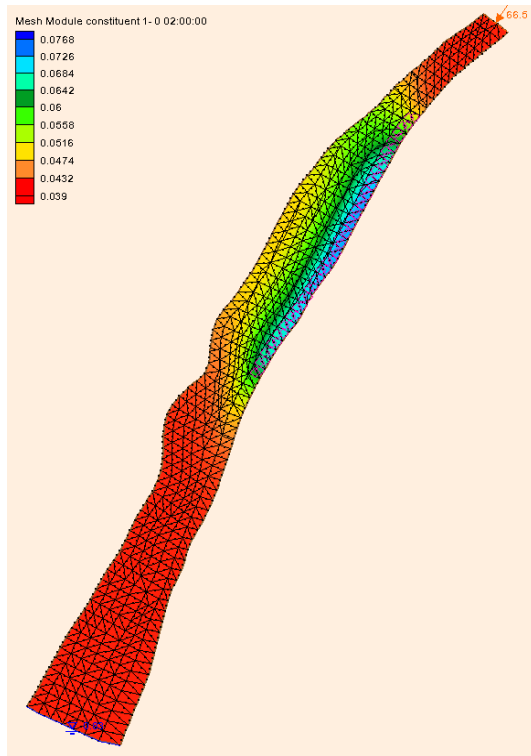
Modelele au fost calibrate pe un set de date prelevate în anul 2012. Pentru calibrare s-a folosit aceeași rețea de calcul folosită la modelare, cu aceleași dimensiuni și rugozitate. Efectuînd numeroase simulări numerice, au fost optimizați coeficienții  $D_x$  și  $D_y$ .

Pentru validarea modelelor s-a folosit aceeași rețea de calcul, folosită la calibrare, în aceleași condiții. Modelele au fost validate pentru un set de date prelevate în anul 2013.

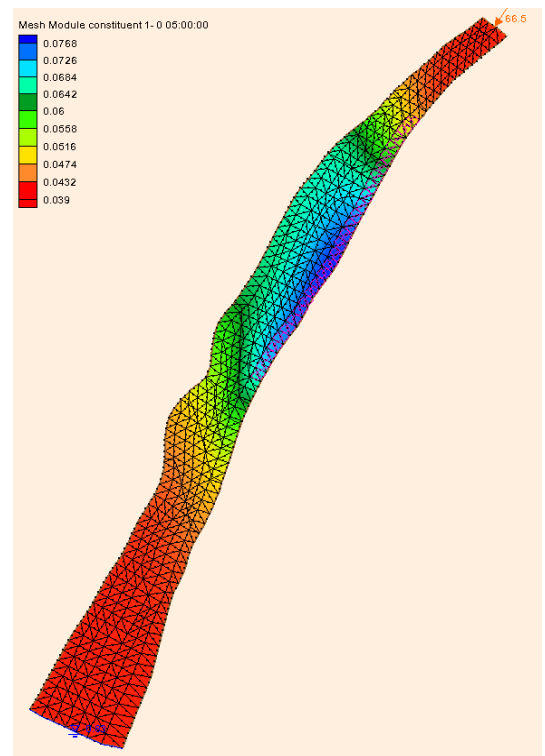
S-a constatat o bună corelare dintre datele măsurate cu cele calculate prin intermediul modelelor numerice.

Pentru fiecare sector studiat se prezintă modelele numerice obținute, precum și rezultatele simulărilor numerice.

Unele din rezultate obținute pentru sectorul râului Prut din localitatea Ungheni se prezintă în figurile 5-9. În primele 2 ore din momentul confluenței cu apa, poluantul cu concentrația de 0,075 mg/L preluat de curentul de apă s-a împrăștiat pe partea majoră a sectorului, ajungînd la malul drept cu valoarea de 0,053 mg/L și 90 m în aval față de zona de confluență cu valoarea de 0,046 mg/L. În următoarele 5 ore s-a observat procesul de transport și dispersie al poluantului în aval față de zona de confluență pe o distanță de 240 m cu micșorarea concentrației. Peste 12 ore concentrația s-a redus substanțial pe tot sectorul studiat.

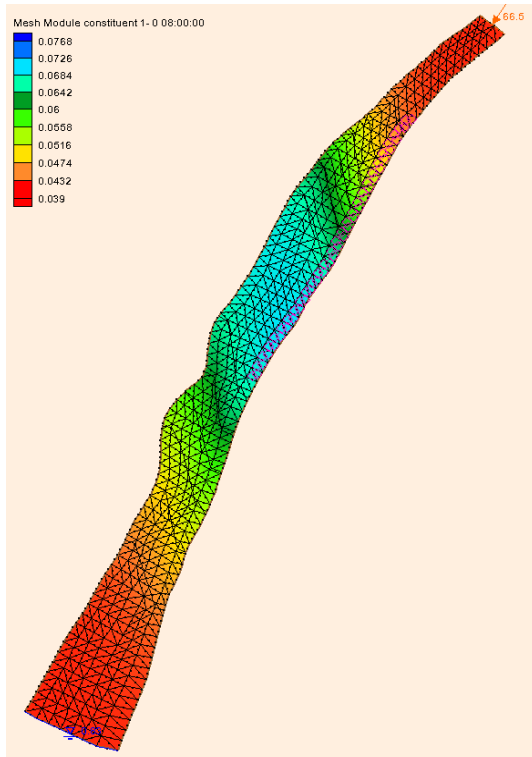


(a)

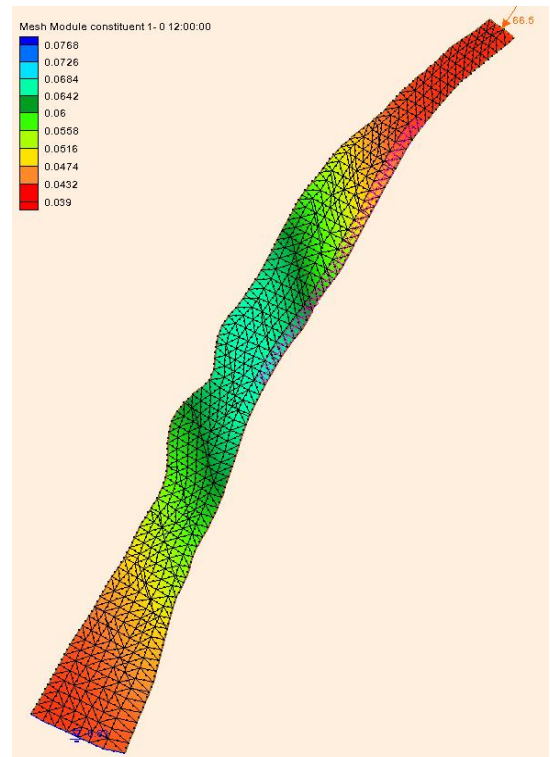


(b)

Fig. 5. Cîmpul de concentrații peste 2 ore (a) și 5 ore (b).

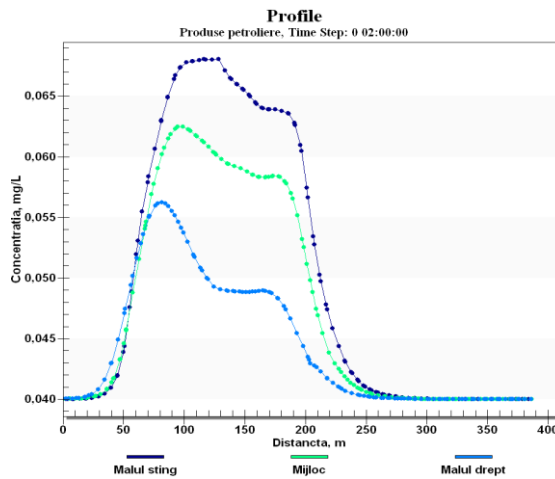


(a)

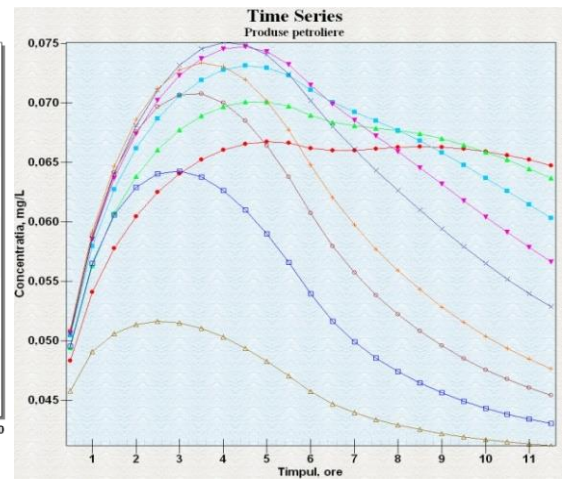


(b)

Fig. 6. Cîmpul de concentrații peste 8 ore (a) și 12 ore (b).

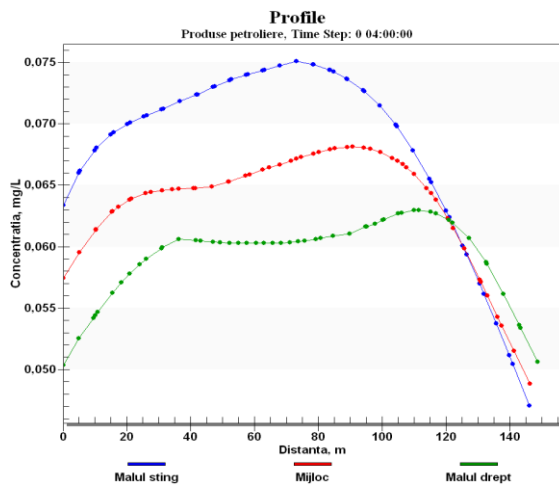


(a)

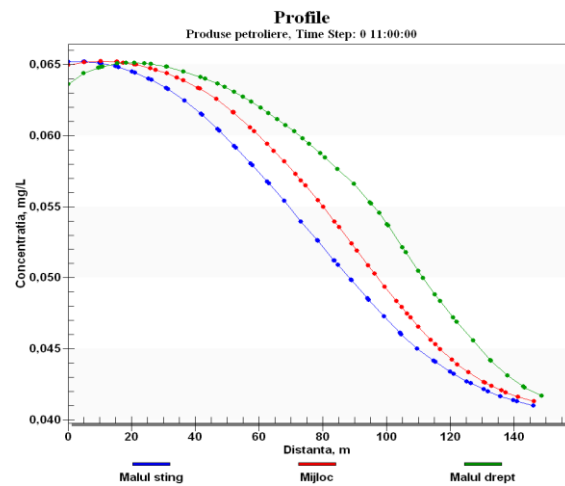


(b)

Fig. 7. Reprezentarea grafică a concentrației peste 2 ore (a) și în zona de confluență (b).

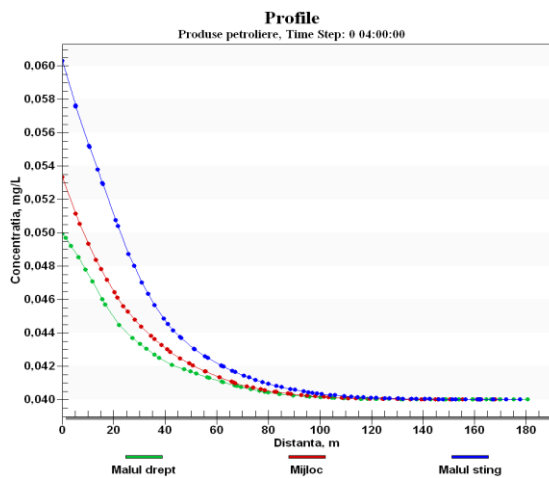


(a)

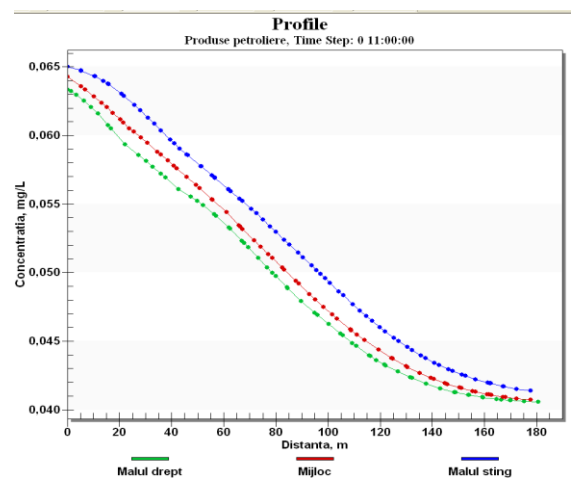


(b)

Fig. 8. Concentrația poluantului în secțiunea transversală pe distanța zonei de confluență peste 4 ore (a) și 11 ore (b).



(a)



(b)

Fig. 9. Concentrația poluantului în aval față de zona de confluență peste 4 ore (a) și 11 ore (b).

În baza simulărilor numerice CFD a transportului și dispersiei produselor petroliere a fost estimată concentrația în timp și spațiu a poluantului menționat pentru fiecare sector studiat. Procesul de transport și dispersie a poluanților s-a dovedit a fi mai rapid în cazul în care zona de confluență a poluantului cu apa este amonte al sectorului studiat, și mult mai lent dacă confluența poluantului cu apa este un sector al malului stîng, ceea ce se explică prin faptul că viteza particulelor apei este mai mare la mijlocul râului decît la maluri. S-a constatat că procesul de dispersie a poluanților diferă de la un sector la altul chiar și pentru același poluant și depinde de proprietățile fiecărui sector în parte. Această constatare se explică prin complexitatea fenomenelor fizico-chimice, care au loc în sistemele de tip râu.

În premieră, au fost obținute modele numerice pentru opt sectoare ale râului Prut și simulate situațiile de alertă în sectoarele de râu studiate, cu valori ale concentrațiilor poluanților depășind CMA, fiind stabilite:

- variația adîncimii apei în limitele 0,5 m – 4,8 m;
- variația vitezei rezultante în limitele 0,07 m/s – 4,31 m/s;
- cîmpul de viteze în direcțiile  $x$  și  $y$ ;
- cîmpul de concentrații în timp și spațiu.

Modelele numerice au fost calibrate și validate în baza datelor reale din teren. A fost elaborată o nouă metodă de calibrare a modelelor numerice în baza coeficienților de difuzie turbulentă, reieșind din valoarea optimă a numărului Peclet, care a fost stabilit pentru fiecare sector studiat.

A fost efectuată analiza erorilor în modelele numerice pînă și după calibrare. În urma calibrării modelelor numerice, erorile s-au micșorat semnificativ. De exemplu, pentru sectorul râului Prut din localitatea Ungheni acest fapt se poate vedea din figura 10.

Error Summary or. Ungheni - 05.05.2011		Error Summary or. Ungheni - 12.12.2012	
Mean Error:	0,020	Mean Error:	-0,001
Mean Abs. Error:	0,020	Mean Abs. Error:	0,001
Root Mean Sq. Error:	0,020	Root Mean Sq. Error:	0,002

Fig. 10. Erorile în modelele numerice cu privire la simularea produselor petroliere pînă și după calibrarea modelului.

Anexele conțin produsele program elaborate, informații din baza de date și unele dintre rezultatele simulărilor numerice pentru sectoarele studiate, actele de implementare a rezultatelor cercetărilor științifice, precum și aprecierea rezultatelor cercetărilor științifice.

## CONCLUZII GENERALE ȘI RECOMANDĂRI

Prin lucrarea de față autorul și-a propus să aducă partea sa de contribuție la investigarea ecosistemelor de tip râu și a evoluției spațio-temporale a proceselor de transport și dispersie a poluanților în sistemele respective, implicit în opt sectoare ale râului Prut – acest fluviu ocupă un sfert din suprafața rețelei hidrografice a Republicii Moldova și reprezintă principală sursă de asigurare a populației cu apă potabilă.

Făcînd lumină asupra celor mai semnificative aspecte ale cercetărilor sale în acest sens, autorul propune un set de recomandări și soluții originale pe care le-a identificat și implementat în propriile estimări ale parametrilor calității apei și pe care le recomandă spre implementare în cercetările ulterioare în domeniu, în baza acestora urmînd a fi elaborate rețele de calcul și pentru alte sectoare ale râului Prut, precum și pentru alte râuri.

Principalele concluzii:

1. Pe parcursul investigațiilor efectuate au fost identificate și argumentate modele matematice, metode numerice și tehnologii CFD, printre care:
  - sistemul de ecuații Navier-Stokes sub forma Reynolds;
  - ecuația fundamentală de advecție-dispersie;
  - metoda RANS pentru rezolvarea numerică a ecuațiilor Navier-Stokes;
  - metoda elementelor finite;
  - pachetul de programe specializat SMS,care au fost aplicate pentru simularea numerică a curgerii turbulente și a proceselor de transport și dispersie a poluanților în sistemele de tip râu.
2. În rezultatul cercetărilor cu privire la calitatea apei râului Prut pentru perioada anilor 2008-2013, bazate pe analiza concentrațiilor medii anuale a parametrilor fizico-chimici și a valorilor indicelui de poluare a apei (IPA), precum și a depășirilor CMA, s-au depistat cei mai frecvenți poluanți pentru opt sectoare ale râului Prut: s. Criva, s. Șirăuți, s. Braniște, or. Ungheni, s. Valea Mare, or. Leova, or. Cahul, s. Giurgiulești.
3. Analiza depășirilor CMA în cele opt sectoare cercetate ale râului Prut a arătat că cel mai des întîlnit poluant îl reprezintă produsele petroliere.
4. A fost elaborat un program în limbajul Java pentru determinarea calității apei, care a permis determinarea și vizualizarea calității apei în fiecare sector studiat, precum și în ansamblu pe râul Prut.
5. A fost creată o bază de date cu ajutorul aplicației Microsoft Access în scopul prelucrării informațiilor cu privire la parametrii de calitate și de poluare a apei râului Prut.

6. Pentru analiza informațiilor din baza de date a fost elaborat un program în C++ Builder, ceea ce a condus la vizualizarea și prelucrarea informațiilor într-o formă comodă – tabelară și grafică.
7. Au fost elaborate geometria și rețelele de calcul pentru toate sectoarele studiate.
8. În baza simulărilor numerice a mișcării apei în râuri și a proceselor de transport și dispersie a poluanților s-a stabilit:
  - câmpul de viteze și câmpul cu privire la adâncimea apei;
  - câmpul de concentrații în timp și spațiu, în baza căruia a fost estimată concentrația produselor petroliere în toate sectoarele de râu studiate;
  - procesul de transport și dispersie a poluanților s-a dovedit a fi mai rapid în cazul în care zona de confluență a poluantului cu apa este amonte al sectorului studiat, și mult mai lent dacă confluența poluantului cu apa este un sector al malului stîng, ceea ce se explică prin faptul că viteza particulelor apei este mai mare la mijlocul râului decît la maluri.
  - procesul de dispersie a poluanților diferă de la un sector la altul chiar și pentru același poluant și depinde de proprietățile fiecărui sector în parte. Această constatare se explică prin complexitatea fenomenelor fizico-chimice, care au loc în sistemele de tip râu.
9. Simulările numerice au fost realizate în baza datelor reale din teren. Discretizarea a fost realizată cu un număr suficient de mare de elemente finite, asigurînd astfel o eroare de calcul acceptabilă.
10. În premieră, au fost obținute modele numerice pentru opt sectoare ale râului Prut, care asigură posibilitatea simulării atât a poluării obișnuite, cît și a celei accidentale (referitoare la evoluția spațio-temporală a transportului și a dispersiei poluanților). Modelele obținute permit estimarea calității apei în fiecare element finit al sectorului studiat, și nu doar într-un singur punct de prelevare a probelor, cum se determina pînă acum de către *Serviciul Hidrometeorologic de Stat*.
11. Pentru prima dată, în sectoarele de râu studiate au fost simulate situații de alertă cu valori ale concentrațiilor poluanților depășind CMA, ceea ce a condus la cunoașterea procesului de împrăștiere a poluantului în timp și spațiu, precum și posibilitatea de a elabora scenarii de predicție a poluării apei.
12. Efectuînd numeroase simulări numerice, modelele obținute au fost calibrate pe un set de date reale prelevate în anul 2012 și validate pe un set de date prelevate în anul 2013.
13. A fost elaborată o nouă metodă de calibrare a modelelor numerice obținute în baza valorilor optime ale numărului Peclet pentru fiecare sector studiat, ceea ce permite

determinarea calității apei cu o exactitate mai mare față de modelele numerice calibrate în baza formulelor empirice.

14. A fost demonstrată corectitudinea modelului matematic prin obținerea rezultatelor simulărilor numerice cu erori minime față de datele măsurate în teren.
15. Simulările numerice au demonstrat o bună capacitate a modelului matematic de a reproduce fidel procesele reale în sistemele acvatice de tip râu, fapt confirmat prin compararea datelor reale, prelevate în situ, cu datele obținute prin intermediul modelelor numerice elaborate.
16. În baza rezultatelor simulărilor numerice, s-a stabilit că modelele numerice obținute, calibrate și validate, pot fi utilizate direct pentru orice scenariu de poluare în sectoarele studiate, în situații de urgență și accidentale, dovadă fiind simularea unui scenariu de poluare accidentală în sectorul râului Prut din localitatea Giurgiulești.
17. Rezultatele cercetării sunt, de asemenea, utile pentru evaluarea evoluției calității apei râului Prut, precum și pentru alte râuri. În baza metodologiei propuse pot fi elaborate modele pentru oricare alt râu, folosind metoda de calibrare recomandată în teză.
18. A fost elaborat un nucleu pentru crearea unei platforme integrate cu posibilitatea de a urmări și a estima în timp real parametrii de calitate ai apelor, precum și managementul riscului de poluare a apei.
19. Rezultatele obținute au fost implementate în cadrul *Serviciului Hidrometeorologic de Stat* al Republicii Moldova, firmei *S.C. Software și Sisteme Informatice Bucovina S.A.* din Suceava, România, precum și în cadrul *Sistemului de Gospodărire a Apelor Iași*, România.

#### **Direcții de cercetare pentru viitor:**

1. Extinderea rezultatelor simulării numerice ale fenomenelor de transport al poluanților pentru alte sectoare ale râului Prut, care trece prin diferite regiuni cu diverse caracteristici de curgere.
2. Crearea unei platforme integrate pentru a putea realiza un management adecvat al calității apei, în baza estimării în timp real a parametrilor legați de impactul poluanților, precum și un management al riscului de poluare a apei.
3. Determinarea teoretică și experimentală a coeficienților ecuației de dispersie în funcție de viteză și de regimul de curgere pentru estimarea cantitativă a distribuției concentrațiilor poluantului în cazul schemei tridimensionale.
4. Extinderea rezultatelor simulării numerice ale fenomenelor de transport al poluanților pentru sectoarele de apă freatică de pe teritoriul Republicii Moldova, utilizând în acest scop sistemul care face obiectul propunerii de brevet de invenție A 00922/03.12.2012.



## BIBLIOGRAFIE

1. ANUAR. Starea calității apelor de suprafață conform elementelor hidrobiologice pe teritoriul Republicii Moldova în anul 2012, Chișinău, 2013, 145 p.  
[http://www.meteo.md/monitor/anuare/2012/anuarhidro\\_2012.pdf](http://www.meteo.md/monitor/anuare/2012/anuarhidro_2012.pdf)
2. ANUAR. Starea calității apelor de suprafață conform elementelor hidrobiologice pe teritoriul Republicii Moldova în anul 2013, Chișinău, 2014, 145 p.  
[http://www.meteo.md/monitor/anuare/2013/anuarhidro\\_2013.pdf](http://www.meteo.md/monitor/anuare/2013/anuarhidro_2013.pdf)
3. Boian I., Gîlcă G. Rezultatele expediției ecologice complexe „Prut 2011” În: Mediul ambiant, 2011, vol. 4, nr. 58, p. 36–40.
4. Duca Gh. Managementul apelor în Republica Moldova. Expertiza A.Ș.M. În: Akademos, nr. 2 (17), 2010, p. 26 -27.
5. Duca Gh., Porubin D. Managementul apelor. În: Akademos, nr. 1 (12), 2009, p. 61 - 62.
6. Marusic G. Simularea dinamică a calității apei în sistemele de tip ”rîu”. În: Akademos, 2013, Nr. 3 (30), p. 39-44.
7. Sandu M., Tăriță. A. ș. a. Indicatorii de calitate și capacitatea de autoepurare a apei afluenților de stînga ai râului Prut. În: Mediul Ambiant, 2008, Nr. 4(40), p. 20 – 23.
8. Starea mediului în Republica Moldova (Raport popular), 2004. Chișinău, 2004.  
[http://cim.mediu.gov.md/raport2004/ro/firstprobl/apa/apa\\_ro2.htm](http://cim.mediu.gov.md/raport2004/ro/firstprobl/apa/apa_ro2.htm)
9. Starea mediului în Republica Moldova în 2007-2010(Raport Național). Chișinău, 2011, 194 p.
10. Tertișco M., Găgescu R., Junie P., Eremia C. Asigurarea utilizării durabile a apei pe TERRA prin informatizarea monitotizării mediului. În: Revista Română de Informatică și Automatică, 2011, vol. 21, Nr. 3, p. 5-12.
11. Солодов В. Г. Моделирование турбулентных течений. *Монография*. Харьков:ХНАДУ, 2011. 168 с.
12. Темам Р. Уравнения Навье-Стокса. Теория и численный анализ. Москва: Мир, 1981. 408 с. (Пер. с англ. Новикова В. А., Франка А. М.).
13. Anderson. Computational Fluid Dynamics for Engineers. Cambridge:University Press, 2012. 2012 p.
14. Chung T. J. Computational Fluid Dynamics, Second edition. Cambridge:University Press, 2010. 1058 p.
15. Garde R. J. River Morphology. Publisher: New Age International (P), 2006. 502 p.
16. Ionuș O. Water quality index - assessment method of the Motru River water quality (Oltenia, Romania). In: University of Craiova, Series Geography, 2010, vol. 13, pp. 74-83.
17. Launder B.E., Spalding D.B. The numerical computation of turbulent flows. In: Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1974, vol. 3, Issue 2, pp. 269–289.
18. Marusic G., Sandu I., Moraru V., Filote C., Ciufudean C. ș. a. Fluoride Dispersion Modeling for „RIVER-TYPE” Systems. În: Meridian Ingineresc, 2012, Nr. 4, pp. 28 – 32.
19. Marusic G., Ciufudean C. Current state of research on water quality of Prut River, În: Proceedings of the 11th International Conference on Environment, Ecosystems and Development (EED '13), Romania, Brasov, June 1-3, 2013, pp. 177 – 180.
20. Marusic G., Sandu I., Filote C. ș. a. Modeling of Spacio–temporal Evolution of Fluoride Dispersion in “River-type” Systems. In: Revista de Chimie, 2015, 66, Nr. 4, pp. 503-506, cotată ISI.
21. Marusic G. A study on the mathematical modeling of water quality in "river-type" aquatic systems. In: Journal Wseas Transactions on Fluid Mechanics, Issue 2, Volume 8, April 2013, pp. 80 – 89, indexată în SCOPUS.
22. Marusic G. Study on numerical modeling of water quality in „river-type” systems. In: Meridian Ingineresc, 2013, Nr. 2, pp. 38 – 42.
23. Mannina G. Uncertainty Assessment of a Water-Quality Model for Ephemeral Rivers Using GLUE Analysis. In: Environmental Engineering, 2011, vol. 137, no. 3, pp. 177-186.
24. Wilcox D. Turbulence Modeling for CFD. California: DCW Industries, 1994. 456 p.

## LISTA LUCRĂRILOR PUBLICATE LA TEMA TEZEI

### Articole în diferite reviste științifice

1. **Marusic G.** A study on the mathematical modeling of water quality in "river-type" aquatic systems. In: Journal WSEAS Transactions on Fluid Mechanics, Issue 2, Volume 8, April 2013, pp. 80 – 89, **indexată în SCOPUS.**
2. **Marusic G.**, Sandu I., Filote C. ș. a. Modeling of Spacio – temporal Evolution of Fluoride Dispersion in “River-type” Systems. In: Revista de Chimie, 2015, 66, Nr. 4, pp. 503-506, **cotată ISI.**
3. **Marusic G.**, Sandu I., Moraru V., Filote C., Ciufudean C. ș. a. Fluoride Dispersion Modeling for „RIVER-TYPE” Systems. În: Meridian Ingineresc, 2012, Nr. 4, p. 28 – 32.
4. **Marusic G.** Study on numerical modeling of water quality in „river-type” systems. In: Meridian Ingineresc, 2013, Nr. 2, pp. 38 – 42.
5. **Marusic G.** Simularea dinamică a calității apei în sistemele de tip ”rîu”. În: Academos, 2013, Nr. 3 (30), p. 39-44.

### Articole în culegeri științifice

6. Beșliu V., Ciufudean C., Filote C., **Marusic G.**, Moraru V., Ștefănescu B. Modelarea matematică a hidrodinamicii și dispersiei poluanților chimici în râuri. În: Materialele Conferinței Internaționale „Microelectronics and Computer Science ICMCS – 2011”. Chișinău, 2011, vol.I, p. 160 -165.
7. Buzduga C., Benabou A., Beșliu V., **Marusic G.**, Filote C., Ciufudean C. Comportarea ferofluidelor în câmpuri magnetice de joasă intensitate. In: Proceedings of the 7th International Conference on Microelectronics and Computer Science ICMCS – 2011. Chișinău, vol.I, p. 15 -18.
8. **Marusic G.** Moraru V., Modelarea matematică a transportului poluanților pe un sector al râului Prut. În: Materialele Conferinței Internaționale „Modelare Matematică, Optimizare și Tehnologii Informaționale”, ediția a III-a, Chișinău, Academia de Transporturi, Informatică și Comunicații, 19 – 23 martie 2012, vol. III, p. 86 – 98.
9. **Marusic G.** Sandu I., Moraru V., Vasilache V. ș. a. Software for modeling spatial and temporal evolution of river-type systems. In: Proceedings of the 11th International Conference on DEVELOPMENT AND APPLICATION SYSTEMS, Suceava, Romania, May 17-19, 2012, p. 162 – 165.
10. **Marusic G.** Sandu I., Filote C., Moraru V. ș. a. The modeling of spacial-temporal evolution of fluoride dispersion in “river-type” systems. In: Book of abstracts, IC-ANMBES 2012 – May 24-27, Brasov, Romania, 2012, p. 46.
11. Filote C., Ciufudean C., Alaci S., **Marusic G.**, Cozgarea A. The Spline analysis of parameters and pollutants dispersion in river surface water. In: Proceedings of the 14th WSEAS International Conference on Mathematical and Computational Methods in Science and Engineering (MACMESE '12), Sliema, Malta, September 7-9, 2012, pp. 243 – 246.
12. **Marusic G.**, Filote C., Ciufudean C. The spatial - temporal evolution of iron dispersion in "river-type" systems. In: Proceedings of the 17th WSEAS International Conference on APPLIED MATHEMATICS (AMATH '12), Montreux, Switzerland December 29-31, 2012, p. 95 – 98.
13. **Marusic G.**, Ciufudean C. Current state of research on water quality of Prut River, În: Proceedings of the 11th International Conference on Environment, Ecosystems and Development (EED '13), Romania, Brasov, June 1-3, 2013, p. 177 – 180. **Distinctie: cea mai bună lucrare.**

### Brevete de invenții

1. Ciufudean Calin, Filote Constantin, Buzduga Cornel, Pata Sergiu, Orhei Liviu, Torac Abel, **MARUSIC Galina**, Sistem pentru monitorizarea calității surselor de apa potabilă (System for monitoring the quality of drinkable water sources), cerere de brevet de invenție A/00922/2012, OSIM, România.

## ADNOTARE

**la teza „Modelarea evoluției spațio-temporale a caracteristicilor ecosistemelor acvatice de tip râu în vederea estimării parametrilor calității apelor” prezentată de către Galina Marusic pentru conferirea gradului științific de doctor în informatică, Chișinău, 2015.**

**Structura tezei:** introducere, 3 capitole, concluzii, bibliografia cu 106 titluri, 6 anexe, 120 de pagini text de bază, inclusiv 120 de figuri și 9 tabele. Rezultatele sunt publicate în 13 lucrări.

**Cuvinte-cheie:** Modelare; simulare CFD (Computational Fluid Dynamics); Surface-water Modeling System (SMS); râu; calitatea apei; transportul și dispersia poluanților.

**Domeniul de studiu:** modelare matematică, produse program, metode de simulare CFD pentru dinamica evoluării răspândirii poluanților în sistemele acvatice de tip râu.

**Scopul tezei:** Estimarea parametrilor calității apei în sistemele de tip râu prin determinarea evoluției spațio-temporale a proceselor de transport și dispersiei poluanților în baza modelării matematice, metodelor numerice și produselor program.

**Obiective:** Determinarea aspectelor privind regimul de curgere turbulentă în sistemele de tip râu; identificarea, argumentarea și aplicarea modelelor matematice, metodelor numerice și de simulare CFD a transportului și dispersiei poluanților în sistemele de tip râu; elaborarea produsului program în scopul cercetării și determinării gradului de calitate a apei.

**Noutatea și originalitatea științifică:** Au fost identificate, argumentate și aplicate modele matematice și metode de simulare CFD a curgerii turbulente și a proceselor de transport a poluanților în sistemele de tip râu. Au fost generate modele de calcul pentru determinarea evoluției spațio-temporale a oricărui poluant. Rezultatele cercetării permit elaborarea unei platforme integrate pentru managementul adecvat al calității apei, cu posibilitatea de a urmări și estima în timp real parametrii de calitate ai apelor.

**Problema științifică soluționată** constă în elaborarea unei metodologii privind estimarea parametrilor de calitate ai apei în ecosistemele de tip râu în baza modelării matematice, produselor program și metodelor moderne de simulare CFD, fapt care a condus la posibilitatea evaluării acestor parametri în nodurile rețelei de elemente finite ale sectorului de râu studiat, ceea ce a permis determinarea cu o mai mare exactitate a clasei de calitate a apei și predicția situațiilor excepționale de poluare a apei.

**Semnificația teoretică:** În baza modelelor matematice au fost descrise curgerea turbulentă, procesele de transport și dispersie a poluanților în sistemele de tip râu. Modelarea numerică a condus la elaborarea soluțiilor inovative pentru determinarea cîmpului de concentrații a poluanților în timp și spațiu în vederea estimării parametrilor de calitate ai apelor.

**Valoarea aplicativă:** În premieră au fost construite modele de calcul numeric pentru evoluția spațio-temporală a transportului și a dispersiei poluanților pentru opt sectoare concrete ale râului Prut. A fost creat un nucleu pentru elaborarea unei platforme integrate și estimarea în timp real a parametrilor de calitate ai apelor. Rezultatele cercetării pot fi aplicate ecosistemelor de tip râu care preiau diverse tipuri de încărcare: chimică, fizică, microbiologică.

**Implementarea rezultatelor științifice** a avut loc în cadrul *Serviciului Hidrometeorologic de Stat* al Republicii Moldova, firmei *S.C. Software și Sisteme Informatice Bucovina S.A.* din Suceava, România, precum și în cadrul *Sistemului de Gospodărire a Apelor Iași*, România.

## ABSTRACT

**to thesis „Modelling the spatio-temporal characteristics of river type ecosystems to optimize water quality parameters”, presented by Galina Marusic for conferring a PhD Degree in Computer Science, Chişinău, 2015.**

**The thesis structure:** introduction, three chapters, conclusions, bibliography containing 106 titles/sources, 6 Annexes, 120 pages of basic text, including 120 figures and 9 tables. Results are published in 13 scientific papers.

**Key words:** modelling, CFD (Computational Fluid Dynamics) simulation, Surface-water Modeling System (SMS), river, water quality, transport and dispersion of pollutants.

**The field of the investigation** is related to mathematical modelling, software programs and CFD modelling methods for the dynamic of pollutant spread evolution in river type aquatic systems.

**The thesis aim:** estimation of water quality parameters in river type systems by determining the spatio-temporal evolution of transport and dispersion of pollutants processes based on mathematical modelling, numerical models and software programs.

**The objectives:** determination of aspects related to turbulent flow regime in river type systems, identification, reasoning and application of mathematical models, numerical methods, and CFD simulation methods of transport and dispersion of pollutants in river type systems, software product development for the purpose of research and determination of water quality level.

**Scientific novelty and originality of the results:** mathematical models and CFD simulation methods of turbulent flow and pollutant transport processes in river type systems were identified, argued and applied. Calculation models for determination of spatio - temporal evolution of any pollutant were generated. Research results allow development of an integrated platform for appropriate management of water quality, with the possibility of real-time tracking and estimation of water quality parameters.

**The scientific problem solved** is to establish a methodology for estimating water quality parameters of river type ecosystems on the basis of mathematical models, software programs and modern methods of CFD simulation, which led to the possibility of assessing these parameters in the finite elements network nodes of the studied river sector, which has allowed to determine more accurately the water quality level and water pollution emergencies.

**The theoretical importance:** based on mathematical models, turbulent flow and processes of transport and dispersion of pollutants in river type systems were described. Numerical modelling resulted in elaboration of innovative solutions for concentration field determination of pollutants through time and space to estimate water quality parameters.

**The applied value of the thesis:** models for numerical calculations of transport spatio-temporal evolution and pollutants dispersion for Prut river eight sectors were constructed in premiere. A nucleus for elaborating an integrated platform for real-time estimation of water quality parameters was created. Research results can be applied in river type ecosystems that take chemical, physical and microbiological charging.

**The scientific results implementation** took part in the *State Hydrometeorological Service* of the Republic of Moldova, *SC Software and Informational Systems Bucovina* from Suceava, Romania and *Water Management System, Iaşi*, România

## АННОТАЦИЯ

диссертации на соискание ученой степени доктора наук в информатики  
„Моделирование эволюции пространственно-временных характеристик водно-  
речных экосистем в целях оценки параметров качества воды”,  
автор: Марусик Галина, Кишинэу, 2015.

**Структура диссертации:** введение, 3 главы, выводы, библиография из 106 наименований, 6 приложений, 120 страниц основного текста, в том числе 120 рисунков и 9 таблиц. Результаты опубликованы в 13 работах.

**Ключевые слова:** моделирование; симулирование CFD (Computational Fluid Dynamics); Surface-water Modeling System (SMS); река; качество воды; перенос и рассеивание загрязняющих веществ.

**Областью исследования** диссертации является математическое моделирование, программное обеспечение и методы моделирования CFD динамики эволюции распространения загрязняющих веществ в водно-речных системах.

**Цель диссертации:** Оценка параметров качества воды в речных системах путем определения пространственно-временной эволюции процессов переноса и рассеивания (дисперсии) загрязняющих веществ на основе математического моделирования, численных методов и программных продуктов.

**Задачи работы:** Определение аспектов режима турбулентного течения в речных системах; выявление, обоснование и применение математических моделей, численных методов и методов моделирования CFD процессов переноса и рассеивания загрязняющих веществ в речных системах; разработка программного продукта с целью исследования и определения степени качества воды.

**Научная новизна и оригинальность результатов:** Были выявлены и применены математические модели и методы моделирования CFD для турбулентного течения и процессов переноса загрязняющих веществ в водно-речных системах. Были сгенерированы расчётные модели для определения пространственно-временной эволюции любого загрязнителя. Результаты позволяют разработать интегрированную платформу для надлежащего управления качеством воды с возможностью отслеживания и оценки параметров качества воды в режиме реального времени.

**Решенная научная проблема** состоит в разработке методологии для оценки параметров качества воды в водно-речных системах на основе математического моделирования, программных продуктов и современных методов моделирования CFD, это привело к возможности оценки указанных параметров в узлах расчетной сетки исследуемого участка реки, что позволило более точно определить степень загрязнения воды и прогнозирования чрезвычайных ситуаций.

**Теоретическая значимость работы:** На основе математических моделей были описаны турбулентное течение, процессы переноса и дисперсии загрязняющих веществ в водно-речных системах. Численное моделирование привело к разработке инновационных решений для определения поля концентраций загрязнителей во времени и пространстве при оценке параметров качества воды.

**Практическая значимость работы:** Впервые были построены модели численного расчета для пространственно-временной эволюции переноса и рассеивания загрязняющих веществ по восьми участкам реки Прут. Было создано ядро для разработки интегрированной платформы для оценки в режиме реального времени параметров качества воды. Результаты исследований могут быть применены к речным экосистемам, которые подвержены химическому, физическому и микробиологическому воздействию.

**Научные результаты работы были внедрены** в Государственной Гидрометеорологической Службе Республики Молдова, фирме S.C. Программное обеспечение и Информационные системы Буковины S.A. г. Сучава и в Системе Водного Хозяйства г. Яссы, Румыния.

**MARUSIC GALINA**

**MODELAREA EVOLUȚIEI SPAȚIO-TEMPORALE A  
CARACTERISTICILOR ECOSISTEMELOR ACVATICE DE TIP  
RÎU ÎN VEDEREA ESTIMĂRII PARAMETRILOR CALITĂȚII  
APELOR**

**122.03 – MODELARE, METODE MATEMATICE, PRODUSE PROGRAM.**

**Autoreferatul tezei de doctor în informatică**

---

Aprobat spre tipar: 29.05.2015

Formatul hîrtiei 60x84 1/16

Hîrtie offset. Tipar RISO.

Tiraj 60 ex

Coli de tipar: 2,0

Comanda nr. 55

---

UTM, 2004, Chișinău, bd. Ștefan cel Mare, 168

Editura "Tehnica UTM",

MD 2045, mun. Chișinău, str. Studenților 9/9