УДК 551.464

В.В.Лутковский, С.Н.Ягодинец

Украинский научно-исследовательский гидрометеорологический институт

“МЯГКАЯ” МОДЕЛЬ ВОДНОГО ТРАНСПОРТА ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ – РАСТВОРИМЫХ ФОРМ РАДИОНУКЛИДОВ ^{90}SR И ^{137}CS С УЧЕТОМ НЕЛИНЕЙНОГО МАССООБМЕНА С ДНОМ

Разработана модель конвективно-диффузионного транспорта поверхностными водами неконсервативного загрязнителя, взаимодействующего с твердой фазой согласно механизмам кинетики сорбции 1-го порядка с произвольной (нелинейной) изотермой сорбции. Концентрации загрязнителя в воде и в грунте представлены в виде непрерывно-дифференцируемых функций порядка n=7...10, что позволяет существенно повысить точность расчета в сравнении с классическим методом конечных элементов (МКЭ) с n=2. Определена соответствующая форма представления граничных и начальных условий. В первом приближении на тестовых примерах показано значительное повышение точности расчетов. Предложены способы оптимизации численных расчетов для достижения требуемой их точности.

Введение

Одна из областей, где применение математического моделирования совершенно необходимо, является экология, в частности задачи, связанные с распространением загрязнения в различных водоемах. Математические модели экологических процессов достаточно разнообразны. Это трех- и двухмерные нестационарные уравнения движения сжимаемой и несжимаемой жидкости, уравнения диффузии-конвекции. Гидродинамические задачи формулируются как некоторые краевые задачи. Эти задачи определяются системами уравнений в частных производных, отражающих основные физические законы, описывающие движение жидкости в водоеме и перенос в нем различных веществ. Они решаются совместно при заданном начальном состоянии среды, известной динамике протекающих в нем процессов и других внешних факторов. Характеристики на границах должны быть заданы с достаточной точностью. Кроме того, требуется указать метод решения уравнений. Совокупность этих элементов образует математическую модель изучаемого явления. Дискретные аналоги таких уравнений представляют собой, как правило, разностные или конечно-элементные схемы. Вычислительные алгоритмы, используемые для решения этих задач должны быть экономичными и обладать достаточной точностью. Большинство используемых моделей распространения примесей в водоеме включает в себя уравнения типа Навье-Стокса (уравнений движения «мелкой воды» Рейнольдса в предположении турбулентной вязкости) и уравнения конвекции-диффузии. Как правило, сначала решают уравнение гидродинамики, определяя поля скоростей и глубины, которое затем подставляют в уравнение конвекции-диффузии. В полученном таким способом поле скоростей решается задача распространения примеси в водной среде. Модель процесса распространения примеси в водоеме позволяет учитывать многие факторы, которые происходят при загрязнении водоема: консервативность или неконсервативность примеси, вид источника и его размещение в области расчета, учет движения границы “вода-суша”, а также возможные изменения во времени концентрации загрязнения вследствие сорбционного и иного массопереноса.

При моделировании переноса могут быть учтены следующие процессы взаимодействий в системе "вода – дно":

1. Сорбция:

- Линейная изотерма. Кинетика процесса определяется коэффициентом распределения.
- Изотерма Фрейндлиха. Кинетика процесса определяется постоянной изотермы Фрейндлиха и показателем степени.
- Изотерма Ленгмюра. Кинетика процесса определяется постоянной изотермы Ленгмюра и максимальной сорбционной емкостью грунта.

2. Неравновесная сорбция. Определяется коэффициентом распределения и коэффициентом обмена между сорбированной и растворенной фазой.

3. Радиоактивный распад и биодеградация. Определяется коэффициентами убывания растворённой и сорбированной фаз.

Целью работы являлась разработка математического аппарата и численная конечно-элементная реализация конвективно-диффузионных моделей на примере описания распространения примеси в мелком водоеме, в котором происходит конвективно-диффузионный перенос примеси в сочетании с обратимым сорбционным массообменом с дном.

Согласно современной классификации [1], подобные модели с параметрами, которые сами зависят от неизвестной величины, относят к мягким.

При этом решались следующие задачи:

- дискретизация исходной вертикально-усредненной двухмерной модели, описывающей уравнение конвективно-диффузионного переноса примеси в тестовой области (расчетная область – излучина речного русла синусоидальной формы);
- проведение расчетов, моделирующих действие постоянного протяженного источника правильной формы.

Постановка задачи. Метод решения и его алгоритмизация

Рассмотрена задача о транспорте загрязнителя стационарным потоком воды и накопления его в грунте дна:

$$\frac{\partial C}{\partial t}+V_x(x,y)\,\frac{\partial C}{\partial x}+V_y(x,y)\,\frac{\partial C}{\partial y}=D_T\left\{\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}\right\}+\frac{a}{h(x,y)}(C_0-C) \qquad (1)$$

$$\rho\frac{\partial C_g}{\partial t}=-\frac{a}{h(x,y)}(C_0-C)\,. \qquad (2)$$

Обмен с дном идет согласно уравнению Ленгмюра:

$$C_g=C_\infty\frac{bC_0}{1+bC_0}\ \text{или}\ bC_0=\frac{C_\infty}{C_\infty-C_g}-1\,, \qquad (3)$$

где C – функция *(x,y,t)* объемной концентрации в потоке воды;

C_g – функция *(x,y,t)* массовой концентрации загрязнителя в грунте;

C_∞ – максимальная сорбционная емкость грунта;

C_0 – равновесная объемная концентрация загрязнителя в придонном слое воды, если его содержание в грунте равно C_g ;

$V_x(x,y)$ и $V_y(x,y)$ – компоненты вектора скорости потока в точке (x, y);

D_T – коэффициент турбулентной диффузии загрязнителя;

$h(x,y)$ – глубина потока воды в точке (x, y);

a – скорость массообмена;

ρ – плотность грунта.

В программе RMA4 из комплекса BOSS SMS для решения указанной задачи применен метод конечных элементов [2, 3] с приближением неизвестных функций квадратичным полиномом в пределах каждого треугольного элемента. При таком приближении, например, слагаемое от вклада диффузионного члена в уравнении (1) постоянное в пределах одного элемента. Поэтому ошибка решения этой задачи методом МКЭ пропорциональна первой степени среднего размера треугольного элемента (Err~dx). Объем вычислений (T) пропорционален количеству элементов (~1/(dx*dy)) и обратно пропорциональный шагу времени (dt~(dx*dy)) (из условия устойчивости к накоплению ошибки). Таким образом, для МКЭ T~1/(dx*dy)^2. Ниже предложен метод решения поставленной задачи, в котором ошибка Err~(dx*dy)^n (n=1,2,3..10 и более) при том же количестве вычислений.

Метод решения

Обозначим в уравнениях (1,2) через [A] и [B] линейные операторы координат и F_H – нелинейная функция от C_g:

$$[A] = K_d\left\{\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right\} + V_x(x,y)\,\frac{\partial}{\partial x} + V_y(x,y)\,\frac{\partial}{\partial y} - \frac{a}{h(x,y)};\quad [B] = \frac{a}{h(x,y)};\quad F_H = \frac{a}{h(x,y)}C_0 .$$

Уравнения (1-2) в этих обозначениях имеют вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = [A]C + F_H; \qquad (1a) \qquad\qquad k\frac{\partial C_g}{\partial t} = [B]C - F_H . \qquad (2a)$$

Рассмотрим **область определения** *G,* заполненную равномерной сеткой точек $x_i = i*dx + x_o$; $y_i = j*dx + y_o$ (i=1,..,N; j=1,..,M).

Обозначим $\vec{C}_{loc}$ и $\vec{C}_{gloc}$ – векторы (*i=1,2,..np*np*) локальных значений неизвестных функций для точки (x_o,y_o), отстоящих от нее не более чем на *np/2* узлов. Значения функций в узлах представим в виде полинома из ортогональных многочленов Чебышева первого рода:

$$C_t(x,y) = \sum_{i+j=0}^{nu,nu} p_{ij}T_i(\bar{x})T_j(\bar{y}); \qquad \bar{x} = \frac{x-x_o}{dx*np}; \qquad \bar{y} = \frac{y-y_o}{dy*np}, \qquad (3)$$

где $\bar{x}$ и $\bar{y}$ – локальные переменные, определены в пределах [-1..1]. Коэффициенты разложения p_{ij} определяются из условия наилучшего приближения (4) в узлах локальной окрестности точки (x_o,y_o):

$$\sum_{loc=1}^{np*np}\left(C_{loc} - \sum_{i+j=0}^{nu,nu} p_{ij}T_i(\bar{x})T_j(\bar{y})\right)^2 = \min, \qquad (4)$$

где *nu* – максимальная степень полиномов Чебышева.

Перечислим некоторые замечательные свойства ортогональных многочленов Чебышева первого рода:

1) каждый из коэффициентов p_{ij} может быть вычислен независимо от других в виде линейной комбинации компонент вектора $\vec{C}_{loc}$;

2) т.к. модуль $T_i(x)$ не превышает 1, то по значению коэффициента можно судить о точности аппроксимации и вовремя остановить процесс вычисления членов ряда (3);

3) оператор дифференцирования и интегрирования функции вида (3) сводится к умножению набора p_{ij} как вектора на соответствующую матрицу.

На основе вышеизложенных свойств 1), 3), а также вида разложения (3) и процедуры минимизации (4) вычислены приближения матриц операторов пространственного дифференцирования $\frac{\partial}{\partial x}$, $\frac{\partial}{\partial y}$, $\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)$ для различных наборов параметров *nu, np*, такие, что:

$$\frac{\partial}{\partial y}U=\frac{\{A_y\}\vec{U}_{loc}}{dX*np}\,;\qquad \frac{\partial}{\partial y}U=\frac{\{A_y\}\vec{U}_{loc}}{dX*np}\,;\qquad \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)U=\frac{\{L\}\vec{U}_{loc}}{(dX*np)^2} \tag{5}$$

для **произвольных** непрерывно-дифференцируемых функций U(x,y).

Ошибка этого приближения при $np=nu=7$ составляет не более 10^{-14}.

Развитие решения во времени

Уравнения (1а-2а) с учетом (5) позволяют определить производные по времени в виде рекуррентного соотношения:

$$\frac{\partial^n C}{\partial t^n}=\{A\}\vec{C}_{loc}^{(n-1)}+\frac{\partial^{n-1}F_H(C_g)}{\partial t^{n-1}}=C^{(n)}\,;\qquad k\frac{\partial^n C_g}{\partial t^n}=\{B\}\vec{C}_{loc}^{(n-1)}-\frac{\partial^{n-1}F_H(C_g)}{\partial t^{n-1}}=kC_g^{(n)}\,. \tag{2б}$$

Для значений неизвестных функций в следующий момент времени:

$$C(t+dt)=C(t)+C^{(1)}dt+\frac{C^{(2)}dt^2}{2!}+\frac{C^{(3)}dt^3}{3!}+...=\sum_{0}^{nt}C^{(i)}(dt)^i\,. \tag{6}$$

Обеспечение граничных условий

Для каждой точки, у которой прямоугольник окрестности *np* занимает часть границы области *G*, матрицы *{A}* и *{B}* вычисляются с учетом граничных условий. Функционал (4) содержит слагаемое, которое задает вид неизвестной функции с условием $\frac{\partial C}{\partial \vec{n}}=0$:

$$\sum_{loc=1}^{np*np}\left(C_{loc}-\sum_{i+j=0}^{nu,nu}p_{ij}T_i(\bar{x})T_j(\bar{y})\right)^2+\alpha\int_G\left(\frac{\partial}{\partial\vec{n}}\sum_{i+j=0}^{nu,nu}p_{ij}T_i(\bar{x})T_j(\bar{y})\right)^2 dG=\min\,. \tag{7}$$

У входа водного потока в область *G* задана концентрация C_G:

$$\sum_{loc=1}^{np*np}\left(C_{loc}-\sum_{i+j=0}^{nu,nu}p_{ij}T_i(\bar{x})T_j(\bar{y})\right)^2+\beta\int_G(C-C_G)^2\,dG=\min\,. \tag{8}$$

Устойчивость решения к накоплению ошибки

С учетом формул (1а, 2а,б) и (6...8) можно представить приращение функции в виде линейной комбинации значений в текущий момент времени $C(t+dt)-C(t)=\{R\}C(t)$. На основе этого определено условие устойчивости: $dt<\beta\dfrac{(dx*np)^2}{D_T\{L\}_{norma}}$, где β=(0,1-3,0)–эмпирический коэффициент.

Численный эксперимент

Рассмотрим в качестве тестовой области синусоидальный участок русла с параболичным поперечным профилем. Область определения задачи *G(x,y),* где задан водный поток, имеет вид:

$$0<x<x_{max}\ ,\ w\left(\sin\frac{x}{x_R}-1\right)<y<w\left(\sin\frac{x}{x_R}+1\right), \tag{9}$$

где w – полуширина реки, x_R – параметр изгиба русла (рис. 1).

Глубина реки задана в виде: $h(x,y)=h_{\max}\left(1-\left(\dfrac{y}{w}-\sin\dfrac{x}{x_R}\right)^2\right)$. (10)

Компоненты вектора скорости потока $V_x(x,y)$ и $V_y(x,y)$ заданы в виде:

$$V_x(x,y)=V_{\max}\left(1-\left(\frac{y}{w}-\sin\frac{x}{x_R}\right)^2\right);\qquad V_y(x,y)=V_x(x,y)\frac{w}{x_R}\cos\frac{x}{x_R}. \tag{11}$$

Поле скоростей удовлетворяет уравнению неразрывности:

$$\frac{\partial V_x}{\partial x}+\frac{\partial V_y}{\partial y}=0 \tag{12}$$

Граничные условия задачи

На границе области *G* $y=w\sin\dfrac{x}{x_R}\pm w$ отсутствует поток загрязнителя в сторону берега, т.е. $\left.\dfrac{\partial C}{\partial\vec{n}}\right|_G=0$.

Начальные условия

Вначале при *t=0* загрязняющее вещество в воде отсутствует, т.е. $C(x,y)=0$. Начальное загрязнение дна задано в виде пятна $C_g(x,y)=1$ внутри прямоугольника ($|x-x_o|<0{,}25x_R$ и $|y-y_o|<0{,}25w$) и $C_g(x,y)=0$ снаружи (см. рис. 1). На этом рисунке показан вид функции начального загрязнения дна (далее w=1, x_R=1).

Необходимо отметить, что граничные условия задачи не являются полными, поскольку неизвестен диффузионный поток за пределы области *G* для $x<0$ и $x>x_{max}$. Формально граничные условия дополним условием отсутствия диффузии вне области *G*:

$$D_T=0,\qquad x<0 \text{ и } x>x_{max}$$

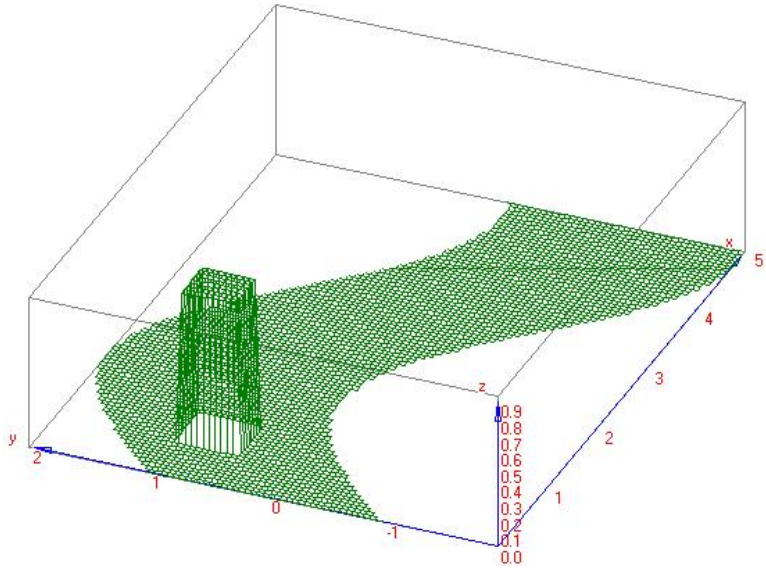
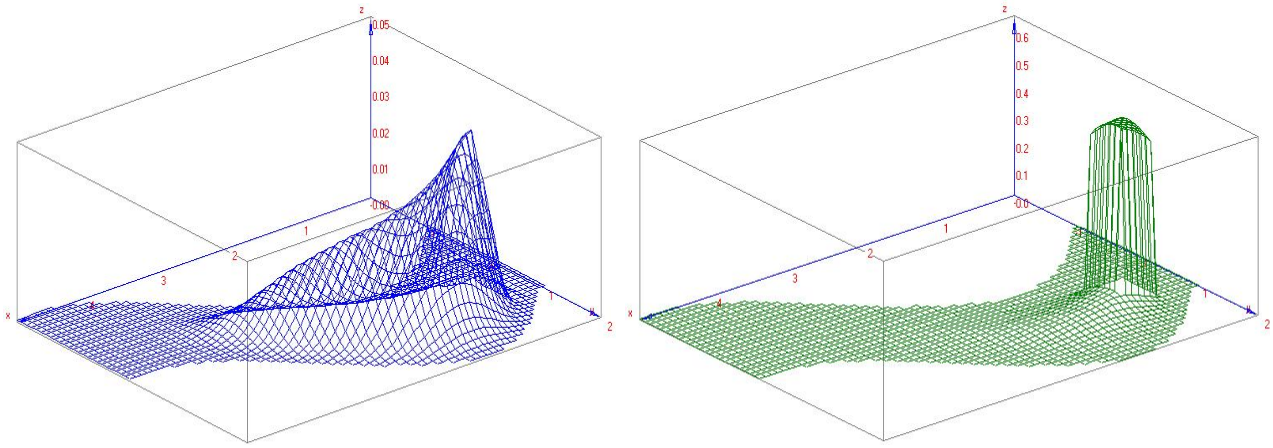


Рис.1. Вид поверхностного донного источника загрязнения (начальное состояние)

Результаты решения

Для решения поставленной задачи применен описанный выше алгоритм при различных наборах параметров *np, nu, nt, dX=dY*.

Общий вид решения в некоторый момент времени изображен на рис. 2.



а) б)

Рис. 2. Концентрация загрязнителя в воде (а) и в поверхностнос слое дна (б) (t=2,3, np=7, nu=6, nt=3, dX=0,08, dt=0,002)

Как видно, за время t начальный уровень загрязнения пятна снизился с 1,0 до 0,6, а десорбированная в воду и вторично сорбированная дном часть загрязняющего вещества распределена в воде и в грунте дна вниз по течению.

Результаты вычислений показывают, что решение качественно описывает заложенные в уравнениях физические процессы переноса, диффузии и адсорбции загрязнителя. С целью дальнейшего применения этих вычислений в задачах с реальной картиной водного потока необходимо оценить точность решения.

Точность решения

Ошибка оценивалась асимптотически. Например, ошибку по параметру ***np*** для $C_{np} \equiv C(x,y,t,np)$ определяли косвенно как $Err(np,t) = \max\limits_{x,y}\left(C_{np} - C_{\max}\right)$, где C_{max} – решение при значениях независимых параметров, которые обеспечивают наибольшую точность. Были вычислены зависимости от времени функций $Err(param,t)$ для некоторых параметров (см. график на рис. 3).

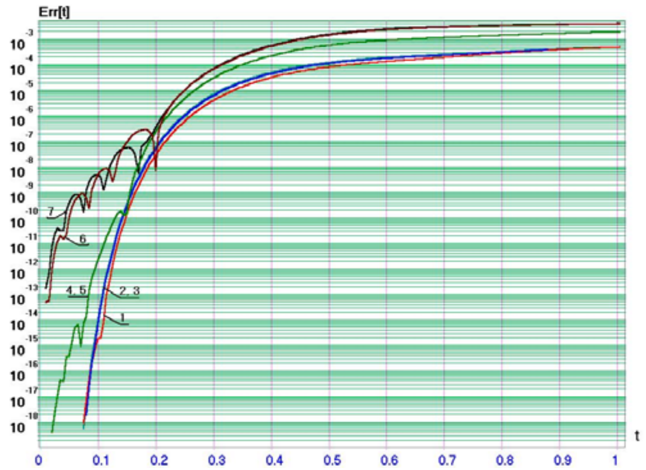


Рис. 3. Зависимость от времени абсолютного отклонения решения от асимптотического

Параметры каждой кривой представлены в таблице.

№ кривой	np	nu	nt	dx	dt
0 (асимпт.)	7	6	3	0,005	0,00232
1	7	6	3	0,01	0,00928
Неустойч.	7	6	2	0,01	0,00928
2	9	8	3	0,01	0,00366
3	11	10	3	0,01	0,00517
4	7	6	3	0,025	0,00580
5	7	6	2	0,025	0,00528
6	7	6	3	0,05	0,02320
7	9	8	3	0,05	0,00550

Из результатов тестовых расчетов следует, что до момента, пока возмущение не достигло берегов (время 0,3-0,4), ошибка растет экспоненциально, далее влияние граничных условий сдерживает этот рост. При степени *nt=4* точность превышает ошибку округления 10^{-18}, а увеличение шага по времени с целью повысить скорость вычисления приводит к неустойчивости решения во времени.

Были проведены также вычислительные эксперименты при *nt>3* и *nu>12.* Для этого были использованы программные модули, позволяющие проводить вычисления с заданным количеством знаков после запятой. При этом была достигнута точность решения $Err=10^{-40}$ и выше.

Отметим, что ошибка решения рассматриваемой задачи растет экспоненциально по временной координате, поэтому при любых значениях *nt* и *nu* с течением времени *t* раньше или позже ошибка превысит единицу. Однако не следует считать это решение неверным, если не имела место временная неустойчивость решения. Следует скорее говорить об ошибке фазы или сдвига времени, поэтому относительная ошибка этого сдвига ко всему времени также остается мизерной.

Выводы

Предложенная модель транспорта загрязнителя Sr-90 отработана на тестовом примере, служащем грубой имитацией поймы речки Припять, как водного объекта, наиболее полно обеспеченного экспериментальными и натурными данными на протяжении длительного времени.

Концентрации загрязнителя в воде и в грунте представлены в виде непрерывно-дифференцируемых функций порядка n=7...10. Это обеспечивает их дифференцируемость по времени вплоть до порядка n=5...7 и позволяет существенно повысить точность расчета в сравнении с классическим методом конечных элементов (МКЕ n=2).

Представленная мягкая модель является альтернативой относительно RMA4 (BOSS SMS) и предназначена для использования вместе с RMA2(BOSS SMS), поскольку использует поля скоростей и глубин, полученные с помощью последней. В отличие от RMA4, где мощность источника загрязнения есть жесткая функция лишь пространственных координат, данная модель способна учитывать процессы массопереноса в системе “вода – дно”, которые описываются законами кинетики 1-го порядка не только с линейной (Генри), но с произвольной нелинейной изотермой сорбции, то есть с учетом мгновенного градиента концентрации загрязнителя в придонном контактном слое с изотермами сорбции типа Ленгмюра и Фрейндлиха (существенны прежде всего для ^{137}Cs). Благодаря такому учету двунаправленного массопереноса модель приобретает статус «мягкой» универсальной и может обеспечить не только высокую точность расчетов, но и отобразить все детали сложного пространственного паттерна (структуры) распределения загрязнителей в двухфазной природной среде. Заметим, что нелинейность изотермы сорбции может иметь место при значительных локальных концентрациях загрязнителя в растворе ($>10^{-5}$ Ки/л), например, в застойных зонах.

Нам представляется несомненной полезность применения разработанной модели вместе с моделями RMA2 и SED2D, входящими в состав комплекса BOSS SMS. Хотя в существующем на данный момент виде модель способна производить расчет процесса массопереноса в 2-фазной системе "вода-дно", путем несложной доработки она может быть превращена в 3-фазную "вода-дно-взвешенные наносы" (существенно для ^{137}Cs), что представляет значительный практический интерес с точки зрения долгосрочного прогнозирования радиоэкологического состояния реальных многокомпонентных гетерогенных водных объектов.

* *

Розроблено модель конвективно-дифузійного транспорту поверхневими водами неконсервативного забруднювача, що взаємодіє із твердою фазою відповідно до механізмів кінетики сорбції 1-го порядку з довільної (нелінійною) ізотермою сорбції. Концентрації забруднювача у воді та у грунті подані у вигляді безперервно-диференційованих функцій порядку n=7...10, що дозволяє істотно підвищити точність розрахунку порівняно з класичним методом кінцевих елементів (МКЕ n=2). Визначено відповідну форму представлення граничних і початкових умов. У першому наближенні на тестових прикладах показане значне підвищення точності розрахунків. Запропоновано засоби оптимізації чисельних розрахунків для досягнення необхідної їх точності.

* *

1. *Арнольд В. И.* Теория катастроф. – Г.: Наука, 1990. – 128 с.
2. *Wait R.* Finite element algorithms and approximations. Edited by Liverpool University, 1996.
3. *Лутковский В.В., Мингалева Е.С.* Применение современной моделирующей системы с распределенными параметрами BOSS SMS для расчетов смыва и транспорта радионуклидов на пойме р. Припять // Тр. УкрНИГМИ. – 1999. – №247. – С.171-183