

КОМП'ЮТЕРНІ ЗАСОБИ, МЕРЕЖІ ТА СИСТЕМИ

A. Kalenchuk-Porkhanova

MATHEMATICAL MODELLING OF THE TRANSFER POLUTIONS IN THE WATER-WAYS

The creation of the imitation modelling systems is discussed on the example of one modelling subsystem.

Key words: mathematical modelling, imitation systems, water-ways, modelling subsystem.

Розглядається проблема створення однієї з проблемно-орієнтованих підсистем у складі Системи імітаційного моделювання водних об'єктів (СИМВО).

Ключові слова: математичне моделювання, імітаційні системи, водні об'єкти, підсистеми моделювання.

Рассматривается проблема создания одной из проблемно-ориентированных подсистем в составе Системы имитационного моделирования водных объектов (СИМВО).

Ключевые слова: математическое моделирование, имитационные системы, водные объекты, подсистемы моделирования.

© А.А. Каленчук-Порханова,
2015

УДК 681.3:574.5

А.А. КАЛЕНЧУК-ПОРХАНОВА

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ЗАГРЯЗНЕНИЙ В ВОДОТОКАХ

Введение. Проводимые в Институте кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины работы по созданию имитационных систем моделирования состояний природных объектов в условиях техногенных нагрузок направлены на разработку проблемно-ориентированных подсистем моделирования для получения комплексной оценки экологического состояния конкретных экообъектов. Получение комплексной оценки состояний того или иного экообъекта требует системного подхода и разработки новых методов математического и имитационного моделирования с использованием аппаратно-программных комплексов автоматизации этих исследований [1, 2]. На основе этих работ в Институте впервые создана Система имитационного моделирования водных объектов (СИМВО), в состав которой входят такие проблемно-ориентированные подсистемы:

- моделирования изменений кислородного режима в водотоках WODA;
- моделирования переноса загрязнений в водотоках STREAM;
- моделирования процессов в подземных водоносных горизонтах FEFLOW;
- моделирования стационарных стокво-ветровых течений в водоемах «мелкой» воды на отдельных глубинных горизонтах РОТОК;
- интеллектуализированного способа обработки, сжатия и восстановления с гарантированной точностью массивов числовых данных с использованием аппарата наилучшей чебышевской аппроксимации APPROXIMATION [3, 4].

Следует заметить, что получение комплексных оценок состояний водных объектов в СИМВО обеспечивается взаимным использованием результатов моделирования подсистем, например, подсистем WODA и STREAM, STREAM и РОТОК. Кроме этого, подсистема APPROXIMATION – инвариантная составляющая во всех подсистемах и используется для предварительной обработки числовых массивов исходных данных.

Наряду с СИМВО в Институте кибернетики имени В.М. Глушкова также выполнялись работы по определению и уточнению структур и оценок параметров численных реализаций отдельных моделей внутриводоемных процессов при наличии соответствующей исходной информации по методу группового учета аргументов (МГУА) [5, 6].

Особенностью всех моделей гидродинамических состояний водных объектов является то, что они должны быть ориентированы только на конкретные водные объекты и не пригодны для использования на других объектах. Поэтому, все известные на то время аналогичные модели других авторов не могли быть использованы в Украине, так как они были ориентированы только на некоторые водные объекты вне Украины.

Эффективность, новизна и актуальность СИМВО обосновывается тем, что разработанные в Институте кибернетики имени В.М. Глушкова модели были *впервые* реализованы и использованы для исследования состояний водоемов и водотоков Украины.

Система моделирования – «открыта» для включения новых моделей и объектов.

Описания проблемно-ориентированных подсистем в составе СИМВО начата публикацией подсистем WODA [7], FEFLOW.

В данной статье приводится описание подсистемы STREAM как продолжение публикаций подсистем в составе СИМВО.

В дальнейшем будут опубликованы описания остальных перечисленных подсистем.

Описание подсистемы STREAM. В результате антропогенного воздействия осуществляется загрязнение речной воды посредством промышленных и бытовых стоков, в результате смыва загрязнений с окружающих территорий во время снеготаяния и дождевых стоков, путем инфильтрации через подземные водоносные горизонты и т. д. В зависимости от количества и вида загрязнений в водотоке происходят процессы разбавления, распада, выпадения в донные наносы, биохимического окисления, взаимодействия с гидробионтами и т. д.

Основное назначение комплекса прикладных программ STREAM состоит в расчете изменений по длине водотоков концентраций загрязняющих веществ, поступающих с промышленными и бытовыми стоками.

В отличие от водоемов, имеющих соизмеримые длину и ширину и требуют, как правило, двумерных и трехмерных моделей, математические модели процессов в водотоках допускают усреднение по площади поперечных сечений, что приводит к одномерным и ноль-мерным (камерным) моделям. Учитывая это STREAM выделена в отдельную подсистему в СИМВО.

Комплекс программ STREAM предназначен для расчета изменений концентраций загрязняющих веществ вниз по речному руслу при изменениях режимов поступления этих веществ как в отдельных створах в виде сосредоточенных сбросов, так и по длине отдельных участков в виде инфильтрационных расходов.

Система выбранных створов должна разбивать участок русла на более-менее однородные отсеки. В эту систему должны входить:

- хорошо изученные створы, например, створы водпостов;
- створы резкого изменения морфометрии русла;
- створы, вблизи которых расположены сосредоточенные притоки и места сбросов (в том числе и возможных) промышленных стоков;
- замыкающие створы участков характерной инфильтрации (фильтрации) и ливневого стока.

По этим створам нужно собрать подробную информацию: отметки дна русла, профили сечений и данные одновременных замеров расходов (скоростей) и уровней для получения регрессионных зависимостей. Подробно система моделей описана далее.

В основе моделей, входящих в комплекс программ STREAM, лежат одномерные уравнения гидравлики, продольной дисперсии и баланса веществ. Набор моделей реализован и оформлен в виде однотипных процедур и открыт для дальнейших расширений. Вычислительные алгоритмы составляют хорошо изученные разностные схемы, привязывающиеся к совокупности неравноотстоящих друг от друга по длине водотока створов.

Краткое описание алгоритмов массопереноса. Для реализации процесса массопереноса используется основная математическая модель для расчета транспорта загрязняющих веществ речным потоком. В настоящей работе принято классическое одномерное уравнение продольной дисперсии.

$$\frac{d}{dT}(A \cdot C) + \frac{d}{dx}(Q \cdot C) = \frac{d}{dx} \left(K \cdot A \cdot \frac{dC}{dx} \right) - b \cdot A \cdot C + C_q \cdot q, \quad (1)$$

где $C(x, T)$ – концентрация растворенного или взвешенного вещества в потоке;

$C_q(x, T)$ – концентрация того же вещества в распределенном притоке (в случае оттока $C_q = C$);

$A(x, T)$ – площадь поперечного сечения русла;

$Q(x, T)$ – расход потока в сечении;

$q(x, T)$ – плотность распределенного притока (оттока);

$K(x, Q, C)$ – коэффициент продольной дисперсии;

$b(Q, C)$ – коэффициент неконсервативности (распада);

x – координата по линии русла;

T – время.

Уравнение (1) – это линейное параболическое дифференциальное уравнение в частных производных и справедливо на участке русла без сосредоточенных притоков (оттоков), когда нет точек разрыва решений в местах притоков (оттоков).

В рамках одномерных математических моделей гидравлики и массопереноса поступления в реку промышленных и бытовых стоков могут быть рассмотрены как сосредоточенные возмущения, приводящие к разрыву решений соответствующих уравнений. Как отмечалось выше, створы поступления служат предметом особо тщательных натурных исследований. Точнее, исследуются по два сечения $X-0$ и $X+0$ выше и ниже водовыпусков, расстояния между которыми существенно меньше других линейных размеров. Параметры этих сечений, в частности, площади $A(X-0)$ и $A(X+0)$ могут быть различны.

Решения в точках разрыва выполняются с помощью балансовых соотношений:

$$C_2 = \frac{Q_1 \cdot C_1 + Q_{np} \cdot C_{np}}{Q_2}, \quad (2)$$

$$Q_2 = Q_1 + Q_{np}, \quad (3)$$

где C_1 и Q_1 – концентрация и расход в конце предыдущего участка;

C_{np} и Q_{np} – концентрация и расход вод притока;

C_2 и Q_2 – концентрация и расход в начале следующего участка.

Уравнение (1) отражает действие четырех физических механизмов:

- конвективного переноса;
- продольной диффузии;
- распада веществ и дополнительного изменения концентрации за счет бокового притока.

В зависимости от гидравлических параметров течения роль продольной диффузии может быть пренебрежительно мала по сравнению с конвективным переносом. Кроме того, обычно расчет конвекции и диффузии осуществляется раздельно с чередованием шагов по времени. Начальное условие для расчета диффузии – результат расчета конвекции на предыдущем шаге и наоборот. Таким образом, численное решение конвективного переноса получаем с помощью уравнения

$$\frac{d}{dT}(A \cdot C) + \frac{d}{dx}(Q \cdot C) = -b \cdot A \cdot C + C_q \cdot q, \quad (4)$$

и продольной диффузии с помощью уравнения

$$\frac{d}{dT}(A \cdot C) = \frac{d}{dx} \left(K \cdot A \cdot \frac{dC}{dx} \right). \quad (5)$$

Уравнение (4) легко преобразуется к форме

$$\frac{dC}{dT} + V \frac{dC}{dx} = \frac{(C_q - C) \cdot q}{A} - b \cdot C \quad (6)$$

с использованием уравнения неразрывности

$$\frac{dA}{dT} + \frac{dC}{dx} = q, \quad (7)$$

где $V = Q/A$ – средняя по сечению скорость потока.

Отметим схожесть уравнений (4) и (7), выражающие закон сохранения массы для жидкой субстанции: при $C=C_q=const$ и $b=0$ уравнение (4) превращается в (7).

Из уравнения (6) следует, что изменения концентраций происходят соответственно при $C_q < C$ за счет разбавления, при $C_q > C$ – за счет загрязнения, а при $C_q = C$ изменений концентраций за счет притока не происходит. В случае оттока при $q < 0$ $C = C_q$, т. е. отток также не оказывает влияние на изменение концентраций.

Для решения уравнения (6) разработан ряд конечно-разностных схем, однако многие из них дают эффект численной (искусственной) диффузии, которая может иметь порядок не меньший, чем диффузия физическая. В этом случае численное моделирование явления диффузии теряет смысл, поскольку основной физический процесс не учитывается.

Схема, приносящая очень небольшую численную диффузию, – это «двухточечная схема четвертого порядка Холли и Прейсмана»:

$$C(i+1, T+1) = a_1 \cdot C(i-1, T) + a_2 \cdot C(i, T) + a_3 \cdot C'(i-1, T) + a_4 \cdot C'(i, T) + a_5 \cdot F(i, T), \quad (8)$$

$$C'(i+1, T+1) = b_1 \cdot C(i-1, T) + b_2 \cdot C(i, T) + b_3 \cdot C'(i-1, T) + b_4 \cdot C'(i, T) + b_5 \cdot F(i, T),$$

где $C' = dC/dx$, $F(i, T) = (C_q(i, T) - C(i, T)) \cdot q(i, T) / A(i, T) - b \cdot C(i, T)$, а коэффициенты a_j и b_j , $j = 1, \dots, 5$ вычисляются последовательно по простым формулам, зависящим от dx и $C_q = V(i, T) \cdot dT / Ddx$.

По данной схеме с кубической интерполяцией для проведения расчетов необходимо задать:

- начальные значения концентраций $C(i, 0)$ в створах $X(i)$, $i = 1, \dots, N$;
- одно верхнее граничное условие $C(1, T)$, $T = 1, 2, \dots$;
- значение скоростей потока $V(i, T)$ и площадей поперечных сечений $A(i, T)$ в створах;
- среднее значение расхода $q(i, T)$ и концентраций $C_q(i, T)$ бокового переноса между створами.

Отметим, что на каждом шаге схемы Холли – Прейсмана необходимо вычислять производные dC/dx , что позволяет уменьшить вычислительную погрешность при получении значений численной диффузии. Устойчивость счета по схеме Холи – Прейсмана связана с числом Куранта.

Численное решение уравнения диффузии (5) (когда в этом есть необходимость) проводится по явной центрированной схеме путем чередования с описанным выше решением уравнения конвективного переноса.

Схема имеет вид:

$$C(i, T+1) = C(i, T) + \frac{dT}{A(i, T) \cdot dx} \cdot (A(i-1/2, T) \cdot K(i-1/2, T) \cdot \frac{C(i, T) - C(i-1, T)}{dx} - A(i+1/2, T) \cdot K(i+1/2, T) \cdot \frac{C(i+1, T) - C(i, T)}{dx}), \quad (9)$$

где значения в промежуточных узлах $(i-1/2)$ и $(i+1/2)$ определяются как средние значения соседних основных узлов.

Начальные условия – это значения концентраций $C(i, T)$ в системе створов, вычисленных на этапе решения уравнения переноса. Кроме задания верхнего граничного условия $C(1, T)$ как функции времени, решение параболического уравнения (5) требует задания и нижнего граничного условия. Обычно это условие отсутствия диффузии в конце участка водотока:

$$\frac{dC(N, T)}{dx} = 0, \quad (10)$$

а также коэффициента продольной дисперсии K , который по рекомендациям ряда работ задается в виде:

$$K = 77 \cdot R \cdot N \cdot V, \quad (11)$$

где N – коэффициент шероховатости участка русла, R – гидравлический радиус в данном створе.

Схема устойчива при $K \cdot dT / dx < 0,5$.

В заключение отметим, что из существующих в настоящее время методов численного интегрирования уравнений массопереноса нельзя выделить те, которые можно было бы рекомендовать в качестве универсальных. Выбор наилучшего метода зависит от конкретных требований к точности расчетов и от особенностей течения и гидравлики потока.

Процессы массопереноса в водотоках в значительной степени определяются характером течения. Наиболее универсальная модель одномерного неустановившегося течения – это модель Сен-Венана, однако ее численная реализация в полном виде (особенно устойчивые неявные схемы) приводит к высокой вычислительной погрешности, поэтому на практике используются упрощенные варианты модели.

Для описания движения волн, которые распространяются только вниз по течению, что, как правило, имеет место в естественных незарегулированных водотоках, успешно используются так называемые уравнения кинематической вол-

ны, одним из которых является уравнение неразрывности (7), а другим – предполагаемая однозначная нелинейная связь расходов воды и площадей живого сечения (или глубин) в каждом створе:

$$Q_i = Q(A_i, X_i). \quad (12)$$

Уравнения кинематической волны получаются из уравнений Сен-Венана, в которых отброшены инерционные члены и считается, что перемещение водных масс происходит в условиях равновесия сил трения и силы тяжести (квазиустановившееся течение).

В случаях привязки всех моделей к выбранной конечной системе створов необходимо провести в этих створах ряд натурных измерений.

Во-первых, определить и занести в базу данных координаты $((X_{ij}, Y_{ij}, Z_{ij}), i = 1, \dots, N; j = 1, \dots, M)$ профилей поперечных сечений, которые будут использоваться для расчета и пересчета геометрических и гидравлических характеристик, таких как площадь поперечного сечения $A = A(H)$, смоченный периметр $P = P(H)$, ширина потока поверху $B = B(H)$, гидравлический радиус $R = R(H)$ и т. д., в зависимости от наблюдаемого уровня $H = H(X, T)$.

Во-вторых, определить средний уклон дна $I = I(X)$ в районе каждого створа и подобрать подходящий коэффициент шероховатостей $N = N(X)$.

В-третьих, провести ряд параллельных замеров уровней и средних скоростей $(H(X, T), V(X, T), T = 1, 2, \dots)$, которые затем подвергнуть статистической обработке для получения необходимых связей (12), например, в виде:

$$Q = C_i \cdot A^{D_i}, \quad (13)$$

где C_i, D_i – коэффициенты.

В случае отсутствия таких замеров для начала в качестве связи может быть принято уравнение равномерно установившегося движения:

$$Q = \frac{1}{N} \cdot A \cdot R^{2/3} \cdot I, \quad (14)$$

где $R = A/P$ – гидравлический радиус.

Для решения уравнения (7) использовалась явная одношаговая схема Лакса – Вендорфа:

$$A(i, T+1) = A(i, T) + \left(-\frac{Q(i+1, T) - Q(i-1, T)}{2 \cdot dx} + q(i, T) \right) \cdot dT + \left(\frac{\frac{dQ}{dA}(i+1, T) + \frac{dQ}{dA}(i, T)}{2 \cdot dx} - \right)$$

$$-\frac{\frac{dQ}{dA}(i,T)+\frac{dQ}{dA}(i-1,T)}{2 \cdot dx} \cdot \left(\frac{Q(i,T)-Q(i-1,T)}{dx} - \frac{q(i,T)+q(i-1,T)}{2} \right) + \frac{q(i,T+1)-q(i,T)}{dT} \cdot \frac{dT \cdot dT}{2}, \quad (15)$$

при этом значения Q и dQ/dA вычисляются на каждом временном шаге из соотношения (12).

Уравнения кинематической волны (7), (12) требуют для своего решения задания начальных условий $A(i,0)$ в створах $X(i), i = 1, \dots, N$, одного верхнего граничного условия, например, $(Q(1,T), T = 1, 2, \dots)$, а также средних значений боковой приточности $q(i,T)$.

Функции $Q(i,T)$ и $q(i,T)$ определяют такие возмущения, как, например, пропуски через перегораживающие сооружения, инфильтрацию, склоновые стоки и т. п., которые меняют гидравлические характеристики потока.

Расчет начальных состояний и установившихся потоков в STREAM осуществляется посредством тех же процедур решения уравнений кинематической волны (7), (12), что и неустановившихся. В случае выполнения условия Куранта для устойчивости разностной схемы (15) при стационарных возмущающих воздействиях численное решение получается за несколько временных шагов и остается без изменения.

В STREAM предусмотрены возможности расчета переноса концентраций как в условиях неустановившегося течения, так и в условиях установившегося. В первом случае расчеты гидравлических характеристик по (7), (12) чередуются с расчетом концентраций по (8) (или по (6), (5)) на каждом временном шаге, а во втором – сначала рассчитывается установившееся состояние потока, а затем, отдельно, изменения концентраций.

При анализе особенностей потока следует также учитывать *боковую приточность* для водотоков как в результатах распределенных по длине поступлений как чистой, так и загрязненной воды за счет поверхностного весеннего или ливневого стока или разгрузки подземных водоносных горизонтов. Расчет таких поступлений сама по себе – сложная задача, определяемая многими морфометрическими, почвенными, геологическими, гидрохимическими и другими факторами.

В STREAM при расчете гидравлики потока и переноса концентраций загрязняющих веществ в русле значения боковой приточности, которые учитываются в правых частях уравнений (6) и (7), необходимо задавать как средние величины между соседними створами соответственно плотности притока (оттока) $q(i,T)$ (кв.м/сек) и концентрации рассчитываемого ингредиента $C_q(i,T)$ (мг/л).

Так как основное назначение подсистемы STREAM состоит в расчете изменений концентраций загрязняющих веществ за счет поступающих по длине водотоков промышленных и бытовых стоков, то в рамках одномерных

математических моделей гидравлики и массопереноса эти поступления могут быть рассмотрены как сосредоточенные возмущения, которые приводят к разрыву решений соответствующих уравнений. Как отмечалось выше, створы поступления воды служат предметом особо тщательных натурных исследований. А именно, исследуются по два сечения $X - 0$ и $X + 0$ соответственно выше и ниже водовыпусков, расстояния между которыми существенно меньше других линейных размеров. Параметры этих сечений, в частности, площади $A(X - 0)$ и $A(X + 0)$ могут быть различны.

Предполагается справедливой гипотеза мгновенного смешивания:

$$\frac{dC(X + 0)}{dx} = \frac{dC(X - 0)}{dx}. \quad (16)$$

При расчетах как гидравлики, так и массопереноса влияние сосредоточенных стоков учитывается через балансовые соотношения (2) и (3), которые вместе с условием неразрывности

$$H(X + 0, T) = H(X - 0, T), \quad (17)$$

где H – уровень воды в реке, обеспечивают сопряжение решений в точках разрыва в каждый момент времени T .

Выводы. Комплекс STREAM реализован на языке Паскаль и может использоваться как в составе СИМВО, так и автономно, при этом работа с комплексом может вестись в режиме удаленного доступа.

Комплекс рассчитан на пользователей, не имеющих специальных навыков программирования, и позволяет в диалоговом режиме создавать и вести простейшие базы данных для участков водотока, осуществлять выбор тех или иных моделей для конкретных химических загрязнений, условий течения и поступления примесей, настраивать параметры моделей и производить расчеты изменения концентраций вниз по течению при сосредоточенных и распределенных возмущающих воздействиях.

Запуск работы комплекса и дальнейшая работа с ним осуществляется в диалоговом режиме посредством функциональных меню с наборами вопросов-ответов.

Меню дает пользователю полную информацию о всех тех функциях, которые составляют основу комплекса программ:

- создание и заполнение базы данных;
- корректировка базы данных;
- выбор загрязняющего ингредиента и характер течения потока;
- синтез имитационной модели;
- расчет концентраций по выбранному ингредиенту.

Создание базы данных по конкретному участку водотока предполагает организацию и заполнение в диалоговом режиме соответствующих файлов прямого доступа, структуры которых также приводятся в меню.

Режимы корректировки базы данных, представленные в меню, позволяют удалять или добавлять в базу данных информацию по новым створам, изменять

координаты их сечений, корректировать параметры участков между створами, добавлять информацию о новых загрязняющих веществах. Меню позволяет настраивать параметры выбранной модели на созданную базу данных и на выбранный загрязняющий ингредиент. В процессе проведения расчетов создается несколько файлов последовательного доступа для хранения промежуточных результатов и для вывода результатов решения.

В комплексе STREAM имеются так называемые "заглушки", в которые пользователь, умеющий программировать на Паскале, может, в соответствии с инструкциями, занести свои программные модули, описывающие другие, отличные от имеющихся в меню, математические модели трансформации загрязняющих веществ, или ввести процедуры оценивания (идентификации) параметров моделей по натурным данным. В комплексе STREAM имеется возможность подключать к комплексу программные модули, написанные на Фортране.

Контрольные расчеты проводились *впервые* в Институте кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины для участка реки Ингулец (правого притока реки Днепр) от водосбросного сооружения Карачуновского водохранилища до водпоста у села Могилевка. Этот участок включает в себя пять характерных створов, по каждому из которых занесены необходимые для расчетов данные. Моделировалась трансформация хлоридов в условиях установившегося движения. Результаты расчетов, в целом, отражают реальную картину.

Полученные результаты расчетов в виде информационных массивов, карт и схем передавались в различные организации, в том числе в Институт гидробиологии НАН Украины. Достоверность результатов была подтверждена верификацией посредством натурных наблюдений.

В последующих публикациях планируется описание других проблемно-ориентированных подсистем в составе СИМВО и Системы в целом.

1. *Каленчук-Порханова А.О.* Система моделювання стану водних об'єктів Північно-Західного Причорномор'я // Збірник доповідей II-го з'їзду гідробіологічного товариства України. – К.: 1997. – Т. 2. – С. 207–208.
2. *Лаврик В.И., Каленчук-Порханова А.А.* Имитационная система моделирования экологического состояния устьев рек, лиманов и озер северо-западного Причерноморья // Диагноз состояния экосистемы Черного моря и зоны сопряжения суши и моря: Сборник трудов научной конференции. – Севастополь, 1997. – С. 88–89.
3. *Каленчук-Порханова А.А.* Аппарат аппроксимации для анализа и синтеза сложных систем // Пр. Міжнар. конф. "50 років Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України". – К.; 2008. – С. 354–361.
4. *Каленчук-Порханова А.А., Вакал Л.П.* Об одном способе преобразования экологической информации // Технические и программные средства систем экологического мониторинга. – Киев: Ин-т кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины. – 1994. – С. 76–80.
5. *Ивахненко А.Г., Пека П.Ю., Востров Н.П.* Комбинированный метод моделирования водных и нефтяных полей. – К.: Наукова думка, 1984. – 148 с.
6. *Ивахненко А.Г., Степашко В.С.* Помехоустойчивость моделирования. – К.: Наукова думка, 1985. – 216 с.
7. *Каленчук-Порханова А.А., Басок Н.В.* Подсистема моделирования изменений кислород-

ного режима в водотоках // Компьютерная математика. Вып.1 – К.: Ин-т кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины. – 2015. – С. 18–25.

Получено 31.08.2015