



УДК 556.013.004.12

© Н. В. Земляная, 2008

ПРИМЕНЕНИЕ ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ПРОГНОЗА КАЧЕСТВА ВОДЫ В МОРСКИХ АКВАТОРИЯХ

Земляная Н. В. – д-р техн. наук (ДальНИИС РААСН, г. Владивосток)

Сделан анализ традиционных методов моделирования качества воды в водных объектах. В рамках метода блуждающих частиц синтезирована модель для долгосрочного прогноза качества воды в мелких морских акваториях. Отмечено, что модель позволяет имитировать изменчивость гидрологических ситуаций, неконсервативность примеси, взаимодействие примесей с жидкими и твердыми границами. Рассмотрены примеры расчета для Амурского залива. Показаны особенности модели долгосрочного прогноза, которая предсказывает нестационарное состояние уровня загрязнения в Амурском заливе.

This study is based on the background theory and available marine water quality observations. The random walk approach is used to develop a model applied for long-term prediction of marine water quality in shallow waters. The model makes it possible to simulate variable hydrological situations, reactive solutes, interaction between different solutes with liquid and solid boundaries. The situation is illustrated by the modeling for the Amur Bay (Primorsky Region, Russia). Features of the long-term water quality forecast model are shown. The model predicts the variable state of the pollution degree in the Amur Bay.

Одной из актуальных экологических проблем является определение допустимых антропогенных нагрузок на объекты природы. Эта задача может быть решена при помощи моделирования. Усилия, затраченные на решение прогностических задач, оправдываются в том случае, если результаты расчетов соответствуют реальным данным. Наш опыт использования уравнений адвективно-диффузионного переноса для прогноза качества воды в заливе Петра Великого не дал результатов, соответствующих натурным данным. В последнем случае использовались традиционные формы принятия начальных и граничных условий, коэффициентов неконсервативности и коэффициентов диффу-

зии. В частности, моделирование распространения в рамках уравнений турбулентной диффузии не отражает процессов накопления загрязняющих веществ и экологической деградации морских акваторий. Оба эти явления наблюдаются в некоторых районах залива Петра Великого. Поиск причин накопления загрязняющих веществ в морских акваториях и синтез модели этого процесса был целью данной работы. Задачу удалось решить, используя метод блуждающих частиц. Оригинальный алгоритм реализации метода блуждающих частиц позволил вводить в расчет переменное поле скорости ветровых течений. Моделирование показало, что непостоянство поля течения явилось главной причиной накопления консервативных веществ в Амурском заливе.

На процессы трансформации и распространения загрязнения влияет ряд факторов, отмеченных в работах Озмидова (1986); Родзиллера (1984): расположение и режим действия источников, адвективный перенос и турбулентная диффузия, седиментация, биохимическое окисление нестойкой органики, утилизация минеральных компонентов загрязнения фитопланктоном. Постановка расчетных задач для практических целей предполагает отсутствие влияния берегов, наличие направленных в одну сторону течений и ряд других упрощающих обстоятельств, позволяющих предложить пользователям простое аналитическое решение задачи.

Адвективный перенос примесей осуществляют морские течения, которые при решении задач прогноза или берут из экспериментальных данных, или рассчитывают по моделям разных уровней. Течения в природных условиях являются турбулентными. В связи с этим проблема распространения примеси ставится как проблема турбулентной диффузии, за которую ответственны турбулентные вихри разных масштабов. При этом используются предположения: жидкость является несжимаемой, число Рейнольдса столь велико, что эффектами молекулярной вязкости можно пренебречь, концентрации примеси достаточно малы и позволяют считать жидкости ньютоновскими. Для описания распространения в общем случае неконсервативной примеси используется незамкнутое уравнение Рейнольдса для баланса вещества

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_m \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_i} - \overline{C'u'} \right) - \alpha \bar{C} + \bar{q} \quad , \quad (1)$$

где C – осредненная величина концентрации примеси; u – средняя скорость течения; C, u'_i – пульсационные составляющие величин мгновенной концентрации и скорости соответственно; K_m – коэффициент молекулярной диффузии; q – осредненные мощности внешних источников примеси; α – коэффициент, учитывающий влияние биологических



и химических факторов на снижение концентрации примеси; X_i – декартовы координаты, причем, $X_1 = x$, $X_2 = y$, $X_3 = z$

Для замыкания уравнения (1) используются представления феноменологических методов, в частности, гипотеза Буссинеска, которая обычно записывается в форме

$$C'u' = K_{ij} \frac{\partial C}{\partial X_j}, \quad (2)$$

где K_{ij} – тензор коэффициентов турбулентной диффузии, а по двойному индексу предполагается суммирование.

Для решения задач прогнозирования распространения примеси в морских акваториях в области G обычно используется двумерное уравнение (1), дополняемое условиями на твердой и жидкой границах и начальным условием

$$\beta \frac{\partial \bar{C}}{\partial n} + \gamma \bar{C}|_{\Gamma} = F(X_{i,t}), \quad (3)$$

$$\bar{C}(x, y, t)_{t=0} = \bar{C}_0(x, y), \quad x, y \in G, \quad \bar{G} = G + \Gamma. \quad (4)$$

где F – известная функция, представляющая собой фактор изменения субстанции S на границе Γ , n – направление внутренней нормали к контуру.

Система уравнений (1)-(4) представляет краевую задачу, решение которой требует сведений о параметрах турбулентного обмена – коэффициентах турбулентной диффузии K_{ij} . В наших работах задача (1-4) решалась численно и была аппроксимирована явной схемой расщепления, имеющей ясный физический смысл [3, 10]. Шаг по времени находился из условия устойчивости разностной схемы, обеспечивающей сходимость численного решения к точному решению дифференциальной краевой задачи. Условие устойчивости в соответствии с данными работы [8] находилось из соотношения

$$\frac{4K\Delta t}{h^2} \leq 1, \quad (5)$$

где Δt и h соответственно шаги по времени и пространству.

При применении уравнения (1) для моделирования качества воды в морских акваториях имеют место некоторые ограничения, известные из работ [1, 4]. Так, в этом уравнении необходимо сохранять смешанные производные второго порядка, если область, где ищется решение, ограничена более чем по одной оси координат. Действительно, в ограниченных водоемах потоки огибают искривленные берега, возникают сгонно-нагонные течения, для небольших масштабов характерны компенсационные течения. В этом случае K_{ij} при $i \neq j$ имеют тот же порядок, что K_{ii} . Удовлетворить требованиям учета смешанных производ-

ных можно, если задан полный тензор коэффициентов турбулентной диффузии как функции координат. Задание тензора связано с большими трудностями, т. к. нет методов измерения всех его компонентов. Для прикладных задач прогнозирования необходимо знать зависимость границы загрязнения и ее перемещение, однако положение этой границы во многом определяется выбором шага по времени и пространству. Из опытов хорошо известно [1], что область, занимаемая примесью, имеет четкие границы. Однако по аналитическому решению параболического уравнения (1) концентрация загрязняющих веществ отлична от нуля в любой малый промежуток времени от начала счета и на любых больших расстояниях от источника, т. е. скорость диффузии бесконечна. Такую картину дает неявная аппроксимация сразу после начала действия источника. Явная аппроксимация позволяет искусственно получить границу пятна и её перемещение, однако эти параметры во многом определяются выбором шагов по времени и пространству, начальной концентрацией, видом источников и выбором способа аппроксимации пространственной производной.

Некоторых из указанных недостатков можно избежать, используя подход Лагранжа, в частности, применяя метод слежения за частицами-маркерами (метод блуждающих частиц) (Галкин, 1977; Okubo, 1983). К очевидным достоинствам имитационного моделирования следует отнести возможности блочного построения модели и комплексного учета многочисленных факторов, определяющих качество среды; возможность синтезировать модели, отражающие пространственно-временную изменчивость природных параметров и стохастический характер многих элементарных явлений.

Идеология метода блуждающих частиц, которому отдается предпочтение в данной работе, предполагает расщепление явления переноса поступившей примеси на два процесса. Адвекция задается полем скорости, которое может быть определено из решения самостоятельной задачи или из натурных наблюдений. Диффузионное рассеивание представляется как дополнительное стохастическое слагаемое к известным составляющим скорости каждой частицы, распределенное по нормальному закону. Концентрация вычисляется путем статистической обработки конечных координат большого количества просчитанных реализаций траекторий блуждающих частиц, образующих облако примеси.

Морские течения вызываются несколькими силами. Результаты экспериментальных данных, полученных в заливе Петра Великого, позволяют считать, что для мелких морских акваторий Японского моря доминирующее воздействие на развитие течений оказывают ветровые напряжения.



Для моделирования течений использовался метод полных потоков с принятыми в нем допущениями, к которым следует отнести исключение второстепенных членов, не влияющих значительно на картину поля скорости, пренебрежение эффектом молекулярной вязкости и упрощение выражения для тензора турбулентной вязкости [9]. Уравнение для функции полных потоков ψ представлено уравнениями эллиптического вида [9]

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{A_z}{H^3} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{A_z}{H^3} \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) = \frac{1}{2} \text{rot}_z \left(\frac{\tau}{H} \right), \quad (6)$$

где A_z – коэффициент турбулентной вязкости, H – глубина потока, τ – относительное касательное напряжение ветра.

Разностную схему, аппроксимирующую краевую задачу (6), представленную в виде $L\psi=f$, вместе с граничными условиями можно представить системой

$$\begin{cases} \psi(ih, jh) = \Phi(ih, jh), & (ih, jh) \in G_h, \\ \psi(ih, jh) \Big|_{\Gamma_h} = \mu_{ih, jh}, & (ih, jh) \in \Gamma_h. \end{cases} \quad (7)$$

где Γ_h – граница области G_h ; μ – граничные условия.

Для получения решения, максимально приближенного к точному, была использована итерационная процедура. Явная итерационная процедура может быть записана как

$$\psi^{K+1} = \psi^K + q(L^K \psi + \Phi^K), \quad (8)$$

где q – параметр релаксации.

Тогда модельная задача для эллиптического уравнения может быть представлена численной аппроксимацией вида

$$\begin{aligned} \psi_{i,j}^{K+1} &= \psi_{i,j}^K - q\psi_{i,j}^K + \\ &+ \frac{1}{4}q \left[(1+a)\psi_{i-1,j}^K + (1-a)\psi_{i+1,j}^K + (1+b)\psi_{i,j-1}^K + (1-b)\psi_{i,j+1}^K - \Phi_{i,j}^K \right], \\ \psi_{i,j}^0 \Big|_{G_h} &= \psi_{i,j}^0, \quad (ih, jh) \in G_h, \\ \psi_{i,j} \Big|_{\Gamma_h} &= \mu_{i,j}, \quad (ih, jh) \in \Gamma_h. \end{aligned} \quad (9)$$

При расчетах функции полных потоков по схеме (9) был использован алгоритм бегущего счета [8], процесс вычислений продолжался до заданной точности $\varepsilon = 0,001$. При шаге по пространству 1000 м для сеточной модели Амурского залива число итераций, определяемое заданной величиной ε , было принято равным 200, т. к. при увеличении количества итераций от 200 до 1000 расчетные значения скоростей

практически не изменялись (были за пределами точности расчетов, $\epsilon \leq 0,001$).

Для решения задачи (9) принимались следующие граничные условия. На жидкой границе, соответствующей устьям рек, задавались среднесноголетние значения стока для рек Раздольной и Амбы (76,3 и 3,3 м³/с соответственно). На открытой части залива, ограниченной траверсом м. Токаревского, ставилось условие неразрывности скоростей. В качестве нулевого приближения задавалось условие $\psi_{i,j} = 0$. На рис. 1 показано расчетное поле скоростей течения, полученного по схеме (9) для северного ветра силой 8 м/с.

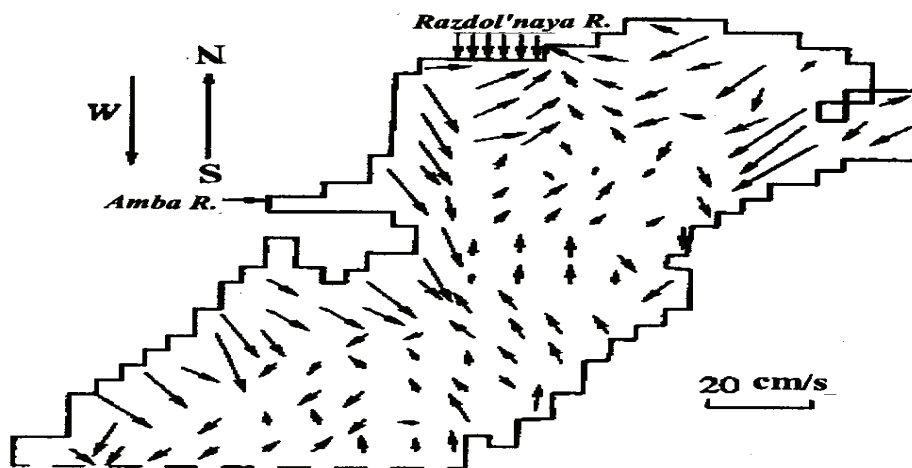


Рис. 1. Рассчитанное поле скоростей ветровых течений в Амурском заливе при северном ветре, скорость ветра 8 м/с

Для прогноза качества воды как в рамках моделей, основанных на уравнениях турбулентной диффузии, так и в рамках имитационных моделей, необходимо знать параметры, характеризующие турбулентное рассеивание примеси. В работах [5–7] даны обобщения многочисленных экспериментов, выполненных в различных районах Мирового океана и в окраинных морях. Обычно коэффициенты турбулентной диффузии связываются с необходимыми для имитационных моделей среднеквадратическими отклонениями скоростей σ_x и σ_y простыми соотношениями:

$$K_x = 0,5\ell\sigma_x, \quad K_y = 0,5\ell\sigma_y, \quad (10)$$

где ℓ – характерный масштаб явления [6].

Л. Д. Пухтяр и Ю. С. Осипов определяли коэффициенты турбулентной диффузии в прибрежных зонах южных морей [7]. Ими была предложена формула, в которой коэффициенты турбулентной диффу-



зии – функции скорости течения – не зависели от масштаба явления, что характерно для русловых процессов в реках.

Большой комплекс измерений малоинерционными приборами был выполнен канадскими исследователями [10]. По их данным, порядок значений пульсационных составляющих в полосе масштабов от инерционного до 1 м был в среднем близок к 1 см/с.

Для реализации численной модельной задачи необходимо еще определить интегральный пространственный масштаб L_{ij} , характеризующий размер наиболее крупных вихрей в потоке, и лагранжев масштаб времени водоема τ_ℓ . Выбор их значений может быть основан на результатах проводимых ранее исследований. Согласно [2] вихри, соответствующие нулевой корреляции в реках, имеют величину порядка 2-5 глубин потока. Следовательно, для Амурского залива $L_{ij} < 80$ м и при принятом шаге по пространству 1000 м перемещения можно считать независимыми. Скорость ветровых течений $\sim 0,2$ м/с. Следовательно, для моделирования независимых перемещений временной шаг τ_ℓ не должен быть меньше 400 с. Конечно, в морской акватории возможны вихри больших масштабов, чем названные выше, однако предположительно эти вихри, как и в реках, вызваны топографией береговой черты и дна.

В методе случайных блужданий при последовательном расчете перемещения частиц формируется кусочно-ломаная аппроксимация их траектории. Пространственное распределение конечных точек траектории достаточно большого ансамбля частиц, каждой из которых приписывается определенная масса, пропорционально вероятности попадания частиц в ту или иную точку области, а следовательно, и концентрации загрязняющих веществ в этой точке. Понятие «условная частица» включает в себя такие свойства примеси, как пассивность и постоянный закон распада во время счета. Эти условия предполагают, что при моделировании все частицы примеси равноправны. Когда концентрация примеси такова [1], что не влияет на количество энергии среды, средняя скорость частицы равна средней скорости среды, если временное и пространственное осреднения удовлетворяют неравенствам

$$\Delta t \gg 2\pi m/\lambda, \quad h \gg 2\pi d_c, \quad (11)$$

где m – масса частицы, d_c – характерный диаметр, λ – коэффициент трения со средой.

В данном случае все эти условия выполняются. Реализация метода блуждающих частиц для независимых перемещений в данной работе происходила по следующей схеме. Адвективный перенос формировался полем осредненных скоростей, полученных путем численного интегрирования уравнения движения (1) при переменной скорости ветра. Турбулентное рассеивание примеси моделировалось с помощью слу-

чайных чисел, распределенных по нормальному закону с математическим ожиданием $m = 0$ и среднеквадратичным отклонением σ . Поскольку по определению пульсационные добавки – случайные величины, то турбулентная добавка к скорости определяется случайным числом, распределенным по нормальному закону и вырабатываемым датчиком случайных чисел. Поступление примеси от непрерывно действующего источника i по загрязнению j считалось дискретным процессом поступления частиц маркеров мощностью

$$P_{i,j} = \frac{VC_0}{31556926N}, \quad (12)$$

где $P_{i,j}$ – мощность выброса загрязняющих веществ, приходящегося на один маркер, кг/с; V – выброс от источника, тыс. м³/год; C_0 – концентрация примеси в источнике, кг/тыс. м³; N – число маркеров на один источник.

Координаты i -маркера в момент времени $n+1$ находились из системы рекуррентных соотношений [4, 6]

$$\begin{cases} x_i^{n+1} = x_i^n + \bar{u}(x_i^n, y_i^n, n\Delta t)\Delta t + u'_i(n)\Delta t, \\ y_i^{n+1} = y_i^n + \bar{v}(x_i^n, y_i^n, n\Delta t)\Delta t + v'_i(n)\Delta t. \end{cases} \quad (13)$$

Для неконсервативной примеси на каждом шаге корректировалась мощность маркера

$$P^{n+1} = P^n \exp(-k\Delta t/86400), \quad (14)$$

где P^{n+1} , P^n – мощности маркера в текущем и последующем шагах; k , сут⁻¹ – коэффициент неконсервативности.

Вес маркера на данном шаге n находился по зависимости

$$M = P^n \Delta t. \quad (15)$$

Если изменение мощности маркера доходило до 0,1 % от первоначальной, считалось, что маркер погиб, и происходил переход к следующему маркеру.

Имитировалось полное отражение маркера береговой чертой. Маркер, попадающий на границу, возвращался в свое предыдущее состояние. Вес маркера распределялся по узлам координатной сетки. Масса загрязнения в узлах расчетной сетки Ω накапливалась, выносилась или подвергалась деструкции по мере роста времени счета и рассчитывалась в каждой точке сетки по формуле

$$\Omega_{i,j}^{n+1} = \Omega_{i,j}^n + M_{i,j}^{n+1}. \quad (16)$$

Концентрация находилась из соотношения

$$C_{i,j} = \frac{\Omega_{i,j}}{h^2 H_{i,j}}. \quad (17)$$

Адвекция моделировалась по набору гидрологических сценариев. Внутри года выделялось десять промежутков с преобладающими на-



правлениями ветра. Таким образом, имитировалась мелкомасштабная диффузия примеси со среднеквадратическим отклонением 1 см/с, адвекция ветровыми течениями, взаимодействие примеси с жидкими и твердыми границами, крупномасштабные флуктуации поля течений, связанные с изменчивостью поля скоростей и топографией залива, а также процессы неконсервативности.

Для верификации имитационной модели было использовано аналитическое решение Брукса для потока от линейного стационарного источника. Сопоставление показало, что результаты имитационного моделирования соответствуют точному решению уравнения турбулентной диффузии с постоянными коэффициентами.

Разработанные алгоритмы численной аппроксимации случайных блужданий частиц позволили реализовать идеи долгосрочного прогноза. Как было показано выше, внутри года моделировались сценарии ветровых течений в зависимости от направлений и скоростей преобладающего ветра за заданный промежуток времени. Для каждого промежутка времени на основе поля течения, соответствующего скорости ветра данного промежутка, по уравнениям (9)–(17) рассчитывались концентрации примеси, которые интерпретировались как начальные условия для расчета при следующем ветровом воздействии. На рис. 2 представлены результаты прогнозирования изменения концентрации взвешенных веществ после действия источников загрязнения в течение трех лет (поле течений менялось последовательно 30 раз).

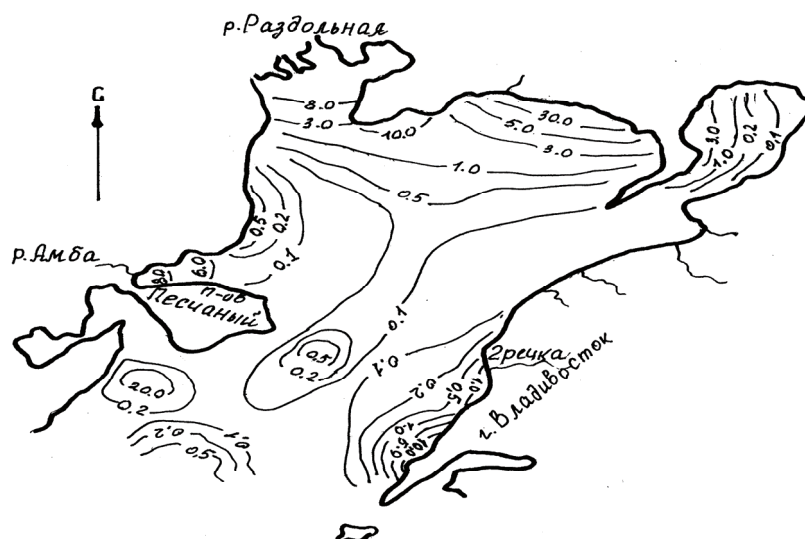


Рис. 2. Поле концентраций взвешенных веществ после действия источников загрязнения в течение трех лет, мг/м³

Один из основных выводов долгосрочного прогнозирования – состояние поля загрязнения консервативной примесью в заливе не существует. Максимальная концентрация взвешенных веществ наблюдается около источников сброса вдоль восточного берега и в глубине северной части залива. В мелководной северной части залива происходит накопление взвешенных веществ, концентрация которых увеличивается на 10,5 мг/л в год. Фронт загрязнения имеет тенденцию продвижения к открытой части залива со скоростью 0,5 км/год.

Заиление верхней части залива и восточного берега и продвижение фронта загрязнения в сторону открытой части Японского моря, отраженные в результатах моделирования, неоднократно были подтверждены в ряде исследований загрязнения Амурского залива. Это обстоятельство подчеркивает существенное преимущество предложенного подхода по сравнению с существующими методами.

Библиографические ссылки

1. Галкин Л. М. Решение диффузионных задач методом Монте-Карло. М., 1975.
2. Гринвальд Д. И. Турбулентность русловых потоков. Л., 1974.
3. Земляная Н. В., Савельева Н. И. Распространение примесей дождевого стока по акватории Амурского залива // Технические средства исследования Мирового океана. Владивосток, 1994.
4. Исследование турбулентности и решение задач переноса загрязняющих веществ в море // Тр. ГОИН. 1977. Вып. 141.
5. Монин А. С., Озмидов Р. В. Океанская турбулентность. Л., 1981.
6. Озмидов Р. В. Диффузия примесей в океане. Л., 1986.
7. Пухтяр Л. Д., Осипов Ю. С. Турбулентные характеристики прибрежной зоны моря // Тр. ГОИН. 1981. Вып. 158.
8. Самарский А. А. Теория разностных схем. М., 1977.
9. Фельзенбаум А. И. Теоретические основы и методы расчета установившихся морских течений. М., 1960.
10. Grant H. L., Moilliet A., Vogel W. M. Some observation of the occurrence of turbulence in and above the thermocline // J. Fluid Mech. 1968. Vol. 34.