

Разработка нестационарной математической модели вторичного загрязнения водного объекта с учетом материального обмена с донными отложениями*

В. В. Козлов

Институт динамики систем и теории управления СО РАН, Иркутск, Россия
e-mail: rozen@icss.ru

This paper describes a non-stationary mathematical model related to the processes of formation of the diffusion flow from the bottom sediments and the flow exchange inside the “bottom — water” system. The model accounts for the molecular diffusion of the decay products in the porous medium including macro-kinetics of such processes. Results of computations of several test problems are discussed.

Введение

Почти повсеместное обострение экологических проблем в водных объектах делает актуальным исследование возможности количественной оценки величины диффузионного потока растворенных органических загрязняющих веществ (ОЗВ) из донных отложений [1–3] и его влияния на качество воды водного объекта. Трудности организации полноценных натуральных наблюдений за такими процессами заставляют прибегать к их математическому моделированию [3–7].

Органические загрязняющие вещества поглощаются биотой водного объекта, сорбируются на взвешях, поступают в донные отложения. Это приводит к уменьшению концентрации в воде ОЗВ. С другой стороны, донные отложения становятся длительным источником вторичного загрязнения. При этом надо учитывать, что ОЗВ подвержены биохимической трансформации в донных отложениях.

Предполагается, что значительные изменения величины и направления диффузионного потока растворенного ОЗВ через поверхность раздела вода — дно происходят лишь во время протекания переходных процессов (например, барьерная роль окисленного слоя донных отложений, препятствующая свободному диффузионному обмену растворенными веществами на границе вода — дно). Эти переходные процессы обусловлены сменой условий во внешней по отношению к системе придонная вода — донные отложения среде и приводят к значительным потокам ОЗВ в поверхностном слое осадков.

В настоящей работе рассматривается формулировка математической модели и приводится численный алгоритм решения нестационарной краевой задачи молекулярной диффузии ОЗВ в пористой среде с подвижными границами. Приводятся результаты расчетов на модельном примере.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского гуманитарного научного фонда (проект № 06-02-00055а), Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 07-06-12023), Междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН № 40.

© Институт вычислительных технологий Сибирского отделения Российской академии наук, 2008.

1. Постановка задачи

Донные отложения представляют собой естественную насыщенную водным раствором различных ОЗВ пористую среду, формирующуюся в водоеме путем последовательного сложения большого количества осаждающихся на дно частиц различных размеров, генезиса и состава. Эта среда ограничена снизу коренным ложем водоема, а сверху — поверхностью раздела с водной толщей.

Поскольку точное количественное описание структуры реальной пористой среды и диффузионного переноса в ней сопряжено со значительными трудностями, при макроскопическом подходе она обычно рассматривается как некоторая фиктивная гомогенизированная среда — континуум. Эффективные параметры данного континуума выбираются таким образом, чтобы обеспечить равенство диффузионных потоков в нем и в реальной пористой среде при равных прочих условиях.

Вводится локальная подвижная система координат, жестко связанная с границей раздела вода — дно. Начало координат совмещено с этой границей, положительная ось Oz направлена вниз, в толщу осадков. Поскольку изменение концентрации на единицу длины по вертикали в донных отложениях значительно больше изменения величины концентрации по другим направлениям, диффузионный процесс будем рассматривать как одномерный. В ходе осадконакопления (его скорость V_b) система координат перемещается вверх параллельно самой себе со скоростью V_b .

1.1. Уравнение молекулярной диффузии ОЗВ в пористой среде

В случае переменных коэффициентов диффузии, пористости и скорости осадконакопления с учетом обратимости процессов сорбции и десорбции основное уравнение макрокинетики процессов в донных отложениях для ОЗВ (оно широко используется для описания кинетики химических реакций, осложненных массопереносом за счет молекулярной диффузии [1, 8, 9]) имеет вид

$$\frac{\partial[G(z, t)C_b(z, t)]}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{\text{эф}}(z, t) \frac{\partial C_b(z, t)}{\partial z} \right] - \frac{\partial}{\partial z} [G(z, t)V_b(z, t)C_b(z, t)] + f_b(z, t), \quad (1)$$

где $D_{\text{эф}} = D_0 p^m$, $1, 3 < m < 3$ — эффективный коэффициент молекулярной диффузии, p — пористость, D_0 — коэффициент молекулярной диффузии растворенного вещества в воде при бесконечном разбавлении [8]. В общем случае $f_b(z, t)$ описывает совокупное действие источников — химических реакций, физико-химических и биологических процессов, влекущих за собой изменение во времени концентрации рассматриваемого ОЗВ [1, 7, 9], а также процесс распада исходного органического вещества. Здесь под $C_b(z, t)$ понимаем концентрацию растворенного ОЗВ в пористом осадке, выраженную в единицах химического потребления кислорода (ХПК). При значительной скорости сорбционного процесса принимается, что равновесие между жидкой и твердой фазами устанавливается мгновенно и описывается линейной изотермой. Процесс равновесной сорбции описывается функцией $G(z, t) = 1 + K_a$:

$$K_a = \begin{cases} K_{a1}, & 0 \leq z \leq z^*(t), \\ K_{a2}, & z^*(t) \leq z \leq L. \end{cases}$$

Здесь $z^*(t)$ — толщина (мощность) окисленного слоя донных отложений.

Плотность полного потока вещества в донных отложениях вычисляем по формуле

$$F_b(z, t)_{\text{полн}} = - \left[D_{\text{эф}}(z) \frac{\partial C_b(z, t)}{\partial z} \right] + [G(z, t)V_b(z, t)C_b(z, t)].$$

Выражение для полного потока через поверхность донных отложений имеет вид $F_b(0) = F_b(z, t)_{\text{полн}}|_{z=0}$.

Начальное вертикальное распределение концентрации растворенного органического вещества в осадке $C_b(z, t)|_{t=0} = \Psi(z)$.

Функция $\Psi(z)$ находится идентификацией параметров [10] или получается методом установления при численном решении.

На нижней границе антропогенного слоя донных отложений с координатой $z = L$ градиент концентрации равен нулю:

$$\left. \frac{\partial C_b(z, t)}{\partial z} \right|_{z=L} = 0.$$

Граничное условие на границе вода — дно $C_b(z, t)|_{z=0} = C(x^*, t)$. Здесь $x = x^*$ — положение (координата) в водном объекте точки расчета потока из донных отложений, концентрация $C(x^*, t)$ находится из решения уравнений блока качества воды (в расчетах принята одна из модификаций модели Стритера — Фелпса [4, 5, 11] с учетом процессов сорбционного обмена).

1.2. Поглощение кислорода донными отложениями

В отличие от ОЗВ кислород не имеет положительных источников в толще донных отложений. Он поступает в осадки через поверхность вода — дно. Изменение содержания кислорода в водах придонного слоя неглубокого водоема вызывает сопряженные колебания концентрации кислорода в поровых растворах верхнего слоя осадков. Это влечет за собой изменение во времени глубины проникновения кислорода в донные отложения и окислительно-восстановительной обстановки в них, что не может не отразиться на течении всего комплекса физико-химических процессов в верхнем горизонте осадков.

Диффузионное проникновение кислорода $C_\kappa(z, t)$ в донные отложения неглубокого водоема, сопровождающееся его поглощением, скорость которого пропорциональна его текущей концентрации, запишем в следующем виде [1, 3]:

$$\frac{\partial C_\kappa(z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{\text{эф}}(z, t) \frac{\partial C_\kappa(z, t)}{\partial z} \right] - \frac{\partial}{\partial z} [V_b(z, t)C_\kappa(z, t)] + \Phi_\kappa(z, t). \quad (2)$$

В начальный момент времени в колонке донных отложений задано вертикальное распределение концентрации растворенного кислорода $C_\kappa(z, t)|_{t=0} = \varphi(z)$, функция $\varphi(z)$ находится идентификацией параметров или получается методом установления при численном решении.

На нижней границе антропогенного слоя донных отложений с координатой $z = L$ градиент концентрации равен нулю:

$$\left. \frac{\partial C_\kappa(z, t)}{\partial z} \right|_{z=L} = 0.$$

На границе вода — дно $C_\kappa(z, t)|_{z=0} = C_{O_2}(x^*, t)$, $x = x^*$ — положение (координата) в водном объекте точки расчета потока из донных отложений. Концентрация растворенного кислорода в придонной воде $C_{O_2}(x^*, t)$ находится из решения уравнений блока качества воды.

Функция $\Phi_\kappa(z, t)$ описывает кинетику поглощения кислорода органическим веществом донных отложений в соответствии с законом действующих масс [9, 11].

1.3. Изменение мощности поверхностного окисленного слоя осадков

На основании экспериментальных исследований [1] показано, что под границей окисленного слоя содержание растворенного кислорода невелико и составляет около $B^* = 0.0005$ мг/см⁻³. Это обстоятельство позволяет считать концентрацию O_2 на нижней границе окисленного слоя при прочих равных условиях практически постоянной. Тогда изменение во времени положения в осадке линии уровня, отвечающей данной концентрации, описывает динамику во времени толщины поверхностного окисленного слоя, обусловленную колебаниями содержания кислорода в придонной воде: $H(z, t) = C_\kappa(z, t) - B^* = 0$.

Выражение, описывающее скорость движения нижней границы окисленного слоя, приобретает вид

$$\frac{dz^*}{dt} = - \left. \frac{H'_t}{H'_z} \right|_{z=z^*}. \quad (3)$$

Начальное положение $z^*|_{t=0} = z_0^*$ определяется по начальному вертикальному распределению растворенного кислорода $\varphi(z)$.

1.4. Распад исходного валового органического вещества

Исходное органическое вещество $C_{\text{орг}}(z, t)$ (выраженное в единицах ХПК), захороненное в осадках водных объектов, постепенно распадается, что приводит к уменьшению содержания органического углерода в толще донных отложений от верхних горизонтов к нижним горизонтам. Не отрицая всей сложности и многообразия совокупности реакций распада органического вещества в донных отложениях, полагаем, что в целом этот процесс в первом приближении может быть удовлетворительно описан кинетическим уравнением первого порядка. Концентрация органического углерода в донных отложениях на глубине z_0 связана с начальной его концентрацией на этой же глубине уравнением первого порядка

$$\frac{\partial C_{\text{орг}}(z_0, t)}{\partial t} = -kC_{\text{орг}}(z_0, t), \quad (4)$$

$$C_{\text{орг}}(z_0, t)|_{t=t_0} = C_0(z_0).$$

Здесь k — константа скорости распада; t_0 — время, в течение которого отложился слой осадков мощностью z_0 .

При постоянной скорости накопления осадков происходит равномерное увеличение толщины слоя донных отложений $z = V_b t$. Время пребывания захороненного органического вещества определяется глубиной его залегания в грунтовой колонке. Предельный вариант распределения исходного органического вещества в осадках по вертикали имеет вид $C_{\text{орг}}(z) = C_{\text{орг}}^0 \exp(-k/V_b z)$.

2. Численный метод

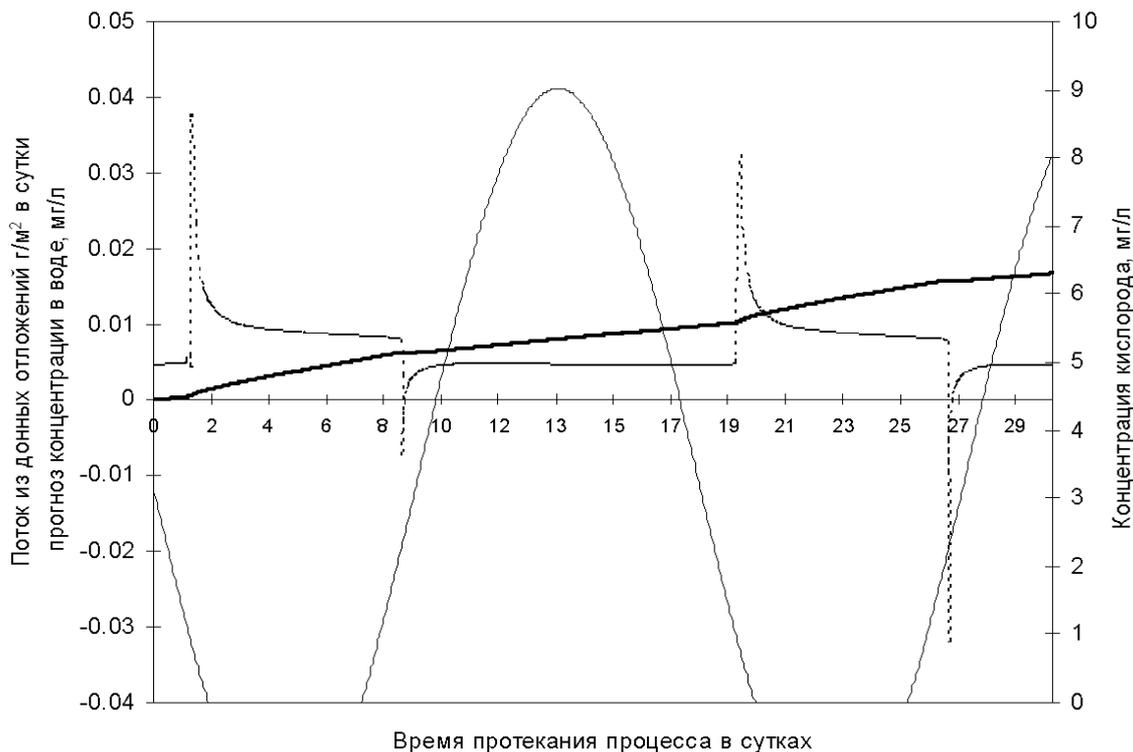
В общем случае получим краевую задачу (1), (2) для уравнений параболического типа с граничными условиями на подвижных границах (3), (4) (граница раздела вода — дно и граница окисленного слоя донных отложений). Для дискретизации по пространственной переменной используются схема с разностями против потока (называемая также схемой с донорными ячейками или разностными уравнениями с положительными коэффициентами) для конвективных членов и центральные разности для диффузионной составляющей [12, 13]. Принцип замороженных коэффициентов [14] позволяет отдельно решать задачу для распределения концентрации ОЗВ и затем определять положение подвижной границы. На каждом интервале времени $\tau = t_{n+1} - t_n$ коэффициенты, входящие в систему дифференциальных уравнений, вычисляются по значениям искомой функции, найденной на предыдущем интервале времени. Для этой задачи рассматривается один из вариантов итерационных методов с набором параметров Чебышева (метод с ЧНП, известный также под названием метода Ричардсона) [12, 14].

Считаем, что отрезок времени $[T_0, T_1]$ разбит на интервалы (t_{n-1}, t_n) , в пределах которых коэффициенты системы удовлетворяют условиям устойчивости и сходимости. За основу численной реализации задачи на интервале времени $\tau = t_n - t_{n-1}$ берется явная схема локальных итераций ЛИ-М [15, 16]. Результаты расчетов для тестовых примеров [1] показали, что эта схема для параболического уравнения с постоянными коэффициентами является устойчивой, имеет первый порядок аппроксимации по времени, порядок аппроксимации по пространству совпадает с порядком аппроксимации оператора задачи.

3. Результаты расчетов для донных отложений

В настоящее время весьма актуальным становится расчет и прогноз изменения содержания растворенных веществ в водных объектах. Эту задачу рассмотрим на примере изменения в водном объекте содержания ОЗВ, которое поступает в водный объект из донных отложений [11]. Рассмотрим упрощенную гидрологическую модель, представляя водный объект одной камерой (однокамерная модель) при заданных постоянных объеме и расходе. Задано изменение концентрации кислорода в придонной воде. В начальный момент ОЗВ в водном объекте отсутствует. Процессы распада ОЗВ в водном объекте не учитываются. Пористость донных отложений изменяется по линейному закону. Константа сорбции в верхнем окисленном слое в два раза больше величины сорбции в нижнем анаэробном слое. В расчетах принято, что в анаэробных и аэробных условиях скорость распада исходного органического вещества различается в два раза.

Результаты расчетов, представленные на рисунке, показывают, что во время протекания переходных процессов, связанных со сменой окислительно-восстановительной обстановки (кривая изменения концентрации кислорода в придонной воде), значительно возрастает величина суммарного потока ОЗВ из донных отложений. Первый пик (значительное возрастание потока) связан с наступлением анаэробных условий (отсутствие кислорода в придонной воде). Второй (отрицательный) пик — поступление кислорода в придонный слой воды. При этом суммарная величина вторичного загрязнения водного объекта монотонно возрастает (кривая прогноза загрязнения — концентрация условного ОЗВ).



Прогноз загрязнения водоема органическим загрязняющим веществом при заданном ходе кислорода в придонном слое воды (однокамерная модель): \cdots — поток ОЗВ, г/м² в сутки; — — прогноз концентрации ОЗВ, мг/л; — — концентрация кислорода, мг/л

Приведенные выводы соответствуют результатам, полученным в работе [1] при реализации двухслойной модели фосфатного фосфора.

Список литературы

- [1] МИЗАНДРОНЦЕВ И.Б. Химические процессы в донных отложениях водоемов. Новосибирск: Наука, 1990. 176 с.
- [2] БРЕХОВСКИХ В.Ф., ВИШНЕВСКАЯ Г.Н., ГАШКИНА Н.А. и др. О сезонной смене приоритетных факторов, определяющих интенсивность потребления кислорода грунтами водохранилища долинного типа // Вод. ресурсы. 2003. Т. 30, № 1. С. 61–66.
- [3] КОЗЛОВ В.В. Разработка и идентификация нестационарной математической модели распространения загрязняющих веществ в водном объекте // Тр. Междунар. конф. "Вычисл. и информ. технологии в науке, технике и образовании". Павлодар, 2006. Т. I. С. 641–649.
- [4] ЖЕЛЕЗНЯК М.И. Математические модели миграции радионуклидов в каскаде водохранилищ // Системный анализ и методы математического моделирования в экологии. Киев, 1990. С. 48–58.
- [5] ВАСИЛЬЕВ О.Ф., ВОЕВОДИН А.Ф. Математическое моделирование качества воды в системах открытых русел // Динамика сплошной среды: Сб. науч. тр. / АН СССР. Сиб. отд-ние. Ин-т гидродинамики. 1975. Вып. 22. С. 73–88.
- [6] БРЕХОВСКИХ В.Ф. Проблемы качества поверхностных вод в бассейне Северной Двины. М.: Наука, 2003. 233 с.

- [7] Семчуков А.Н., Квон В.И., Квон Д.В., Зонов С.Д. Математическое моделирование турбулентных течений, процессов переноса тепла и вещества и их биохимической трансформации в равнинных водохранилищах // Матер. Междунар. конф. "Вычислительные и информационные технологии в науке, технике и образовании". Ч. 1. Алматы—Новосибирск, 2004. С. 18–23.
- [8] МАКРОКИНЕТИКА процессов в пористых средах (топливные элементы) / Ю.И. Чизмаджев, В.С. Маркин, М.Р. Тарасевич, Ю.Г. Чирков. М.: Наука, 1971. 363 с.
- [9] МАРРИ Дж. Нелинейные дифференциальные уравнения в биологии. Лекции о моделях. М.: Мир, 1983. 397 с.
- [10] Идентификация моделей гидравлики / Г.Д. Бабе, Э.А. Бондарев, А.Ф. Воеводин, М.А. Каниболотский. Новосибирск: Наука, 1980. 160 с.
- [11] Козлов В.В. Разработка и идентификация нестационарной математической модели пространства загрязняющих веществ в водном объекте. Иркутск, 2006. (Препр. ИДСТУ. № 1).
- [12] САМАРСКИЙ А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1989. 616 с.
- [13] РОУЧ П. Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980. 616 с.
- [14] ГОДУНОВ С.К., РЯБЕНЬКИЙ В.С. Разностные схемы. М.: Наука, 1973. 400 с.
- [15] ЖУКОВ В.Т. Явно итерационные схемы для параболических уравнений // Вопр. атомной науки и техники. Сер.: Мат. моделирование физических процессов. 1993. Вып. 4. С. 40–46.
- [16] ЗАЙЦЕВ Ф.С., КОСТОМАРОВ Д.П., КУРВЕТ И.И. Применение явных итерационных схем для решения кинетических задач // Мат. моделирование. 2004. Т. 16, № 3. С. 13–21.

Поступила в редакцию 25 января 2008 г.