

На правах рукописи



КУЗИНА Валентина Владимировна

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ
РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПРИМЕСЕЙ В ВОДНОЙ СРЕДЕ**

**Специальность 05.13.18 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ**

**Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук**

ПЕНЗА – 2013

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Пензенский государственный университет архитектуры и строительства» на кафедре «Информационно-вычислительные системы».

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор

Кошев Александр Николаевич.

Официальные оппоненты:

Львов Алексей Арленович,

доктор технических наук, профессор,
федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего
профессионального образования «Саратовский
государственный технический университет имени
Гагарина Ю.А.», заведующий кафедрой
«Автоматика и телемеханика»;

Королев Евгений Валерьевич,

доктор технических наук, профессор,
федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего
профессионального образования «Московский
государственный строительный университет
(национальный исследовательский
университет)», директор научно-
образовательного центра «Нанотехнологии».

Ведущая организация –

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего
профессионального образования «Пензенский
государственный университет», г. Пенза

Защита диссертации состоится 18 декабря 2013 года в 13 часов на заседании диссертационного совета Д 212.337.01 на базе ФГБОУ ВПО «Пензенский государственный технологический университет» по адресу: 440039, г. Пенза, пр. Байдукова / ул. Гагарина, д. 1а / 11, ПензГТУ, 1 корпус, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБОУ ВПО «Пензенский государственный технологический университет».

Автореферат разослан 15 ноября 2013 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Чулков Валерий Александрович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Увеличение антропогенной нагрузки на экологические системы, в частности – на водные объекты, обуславливает необходимость развития методов и средств исследования состояния водоемов при решении экологических проблем. Для решения этой задачи требуются анализ процессов и прогнозирование последствий распространения загрязняющих веществ в водных средах.

Экспериментальное исследование динамики распространения примесей в водной среде и изменений гидрохимических показателей в водоемах затруднено ввиду сложного характера диффузионного и конвективного массопереноса. Представляют сложность как наблюдение за ходом эксперимента, так и интерпретация полученных данных для выявления структуры движения вследствие значительных масштабов объектов исследования и длительности процессов конвекции и диффузии. Кроме этого, существующие методы экспериментального исследования (спектрофотометрические, полярографические, спектрографические и др.), требуют использования дорогостоящего измерительного оборудования и экспериментальных установок. В случаях, когда масштабы возможных техногенных нарушений, связанных с загрязнением водных бассейнов, исключают натурные испытания, а лабораторные исследования в силу ограниченных возможностей обеспечения подобия дают лишь неполную информацию, математическое моделирование и вычислительный эксперимент становятся основными способами изучения процессов переноса вещества в водной среде. Современное состояние вычислительной техники позволяет создавать эффективные вычислительные алгоритмы и комплексы программ для решения этой задачи.

Таким образом, тема диссертационного исследования является **актуальной**.

Степень разработанности темы исследования. К настоящему времени накоплен значительный опыт математического моделирования объектов и явлений, в том числе в экологических системах, что выражается в большом количестве опубликованных научных работ, отражающих различные аспекты этой проблемы. Благодаря отечественным научным школам академиков Г.И. Марчука, Н.Н. Моисеева, А.А. Самарского, Л.Н. Тихонова, Н.Н. Яненко и др., сформулирован и развивается метод математического моделирования как инструмент научного исследования. Математические задачи диффузии поставлены и решены в работах Л.Н. Тихонова, А.А. Самарского, Б.М. Будака и др., конвекции – в работах Э.М. Карташова, А.В. Лыкова и др. Однако математические модели процессов носят общий характер и использование их для решения конкретных практических задач требует формулирования граничных и краевых условий, соответствующих реальным экологическим ситуациям.

Контролю и прогнозированию динамики экологических систем с применением методов математического моделирования посвящены работы О.Ф. Васильева, Н.Н. Дружинина, А.В. Игнатова, В.И. Кичигина, В.И. Костина, Л.С. Кучмента, X.J.R. Avula, J. Bear, A. Vervnyt, E.A. Bender, M. Cross,

А.О. Moscardini, R. Courant, D. Hilbert, а также других отечественных и зарубежных ученых. Вместе с тем, разнообразие возможных экологических ситуаций техногенного характера и возникающих при этом задач не всегда позволяет использовать существующие математические модели, поскольку они имеют границы применимости, что приводит к необходимости их дополнения, уточнения и развития.

Представленные в работах Р.Ю. Бека, А.Ю. Закгейма, А.П. Замятина, Ю.Б. Клетеника, Ю.Ю. Лурье и др. математические методы направлены на определение концентрации отдельного вещества в растворе и при решении электрохимических задач не позволяют моделировать процессы распределения ионов тяжелых и цветных металлов в водных растворах для широкого класса веществ.

Необходимость систематизации возможных вариантов попадания загрязняющих веществ в водную среду и последующего их распространения обуславливает постановку задачи математического моделирования и создания вычислительных алгоритмов и программных комплексов для мониторинга экологического состояния водной среды, что и определило цель исследования.

Целью диссертационной работы является совершенствование методов математического моделирования, разработка численных методов, алгоритмов и комплекса программ для исследования процессов распространения примесей в водных средах.

Для достижения поставленной цели были сформулированы и решены следующие **задачи**.

1. Разработка метода математического моделирования электрохимического процесса при вольтамперометрии растворов, содержащих ионы тяжелых и цветных металлов, на основе решения обратной задачи для уравнения диффузии.

2. Разработка метода математического моделирования процессов распространения примесей в водных средах и разработка численных методов расчета их концентраций при возможных экологических нарушениях техногенного характера.

3. Разработка численного метода и вычислительного алгоритма для определения концентраций ионов металлов в растворах электролитов на основе решения обратной гранично-коэффициентной задачи математической физики.

4. Создание комплекса программ для реализации численных методов и вычислительных алгоритмов решения задач диффузионного и конвективного переноса при распространении примесей в водных средах.

Объектом исследования являются физико-химические процессы переноса примесей в водных средах.

Предметом исследования являются методы математического моделирования, алгоритмы и комплекс программ для определения концентрации загрязняющих веществ в водной среде.

Методы исследований основаны на фундаментальных положениях теории математического моделирования, уравнениях математической физики, численных методах решения дифференциальных уравнений, теории анализа

сложных систем, принятия решений, электрохимического анализа, теории графов. Эмпирической базой исследования явились данные экспериментальных исследований и данные, полученные с помощью геоинформационных систем.

Научная новизна работы заключается в следующем.

1. Создан новый метод и выполнено математическое моделирование процессов электрохимической диффузии в однокомпонентном и поликомпонентном растворах электролитов на основе решения обратной задачи для уравнения диффузии при вольтамперометрии растворов, содержащих ионы тяжелых и цветных металлов.

2. Разработан метод и выполнено математическое моделирование процессов распространения примесей в водной среде в виде краевых задач для уравнений диффузионного и конвективного массопереноса.

3. Разработан численный метод определения концентраций ионов металлов однокомпонентных и многокомпонентных растворов электролитов. Данный метод в отличие от существующих базируется на раздельном аналитическом описании диффузионных и электродных процессов, что позволило сформулировать и решить обратную задачу по определению параметров и констант электрохимического процесса. Доказана единственность решения задачи.

4. Создан комплекс программ для реализации численных методов и вычислительных алгоритмов решения задач диффузионного и конвективного переноса, описывающих распространение примесей в водных средах.

Практическая значимость работы заключается в том, что применение созданных вычислительных алгоритмов и комплекса программ позволяет определять концентрацию ионов металлов в однокомпонентных и многокомпонентных растворах электролитов и промышленных сточных водах и оперативно контролировать экологическое состояние водной среды региона. Результаты диссертационного исследования использовались при решении важной народно-хозяйственной задачи по оценке воздействия на окружающую среду строительных объектов на территории Пензенской области.

Реализация и внедрение результатов. Результаты диссертационной работы использованы при разработке проектной документации на строительство химического завода на территории Пензенской области в соответствии с договорами: на разработку № 99-23 от 15.04.1999 г. и корректировку № 22.39 от 01.07.2002 г. между Пензенской государственной архитектурно-строительной академией и ОАО «Тольяттинский проектно-изыскательный институт».

Результаты диссертационной работы используются при изучении дисциплин «Моделирование процессов и систем», «Математические модели информационных процессов», «Информационные технологии в экологии», а также в научно-исследовательской работе, курсовом проектировании и при выполнении выпускных квалификационных работ студентами, обучающимися по направлениям 230400 «Информационные системы и технологии», 280700 «Техносферная безопасность» ФГБОУ ВПО «Пензенский государственный университет архитектуры и строительства». Внедрение результатов диссертационной работы подтверждено соответствующими актами.

Достоверность результатов работы обеспечивается использованием корректных методов математического моделирования, математической физики, вычислительной математики, теоретической электрохимии; соответствием расчетных и экспериментальных результатов; обоснованием выводов исследования произведенными расчетами и экспериментами, обсуждением результатов исследования на международных научных конференциях, опытом их практической реализации.

На защиту выносятся.

1. Метод математического моделирования электродных и диффузионных процессов при вольтамперометрическом исследовании характеристик однокомпонентных и многокомпонентных растворов электролитов, основанный на раздельном математическом описании диффузионных и электродных процессов.

2. Метод математического моделирования процессов распространения примесей в водной среде при различных возможных экологических ситуациях в виде краевых задач для уравнений диффузионного и конвективного массопереноса.

3. Численный метод и вычислительный алгоритм для определения концентраций ионов металлов в растворах электролитов на основе раздельного математического описания диффузионных и электродных процессов. Метод позволил представить задачу по определению электрохимических параметров раствора в аналитическом виде.

4. Комплекс программ, реализующих алгоритмы для определения концентрации загрязняющих веществ в водных объектах с графическим представлением результатов исследования.

Апробация и реализация результатов исследования. Основные теоретические и практические положения и результаты диссертации были представлены на XV, XXIII, XXV международных научных конференциях «Математические методы в технике и технологиях – ММТТ» (Тамбов, 2002; Саратов, 2010; Волгоград, Харьков, 2012); XXVIII Российской школе «Наука и технологии» (Москва, Екатеринбург, 2008); V, VI, IX, XV, XVII международных научно-технических конференциях «Информационно-вычислительные технологии и их приложения» (Пенза, 2006, 2007, 2008, 2011, 2012); X Всероссийской научно-технической конференции «Информационные системы и модели в научных исследованиях, промышленности, образовании и экологии» (Тула, 2012); Международной научно-технической конференции «Компьютерные и вычислительные технологии в задачах естествознания и образования (Пенза, 2005); XVI международной научно-технической конференции «Математическое и компьютерное моделирование в решении задач строительства, техники, управления и образования» (Пенза, 2011); Международной научно-практической конференции «Актуальные проблемы инженерных наук в области промышленности, экологии и охраны водных ресурсов» (Пенза, 2012); Международной научно-технической конференции молодых ученых и исследователей «Новые достижения по приоритетным направлениям науки и техники» (Пенза, 2013).

Публикации. По теме диссертационного исследования опубликованы 1 монография, 29 научных статей, в том числе 8 – в журналах, рекомендованных ВАК.

Личный вклад автора. Результаты диссертационной работы получены автором самостоятельно. Работы опубликованы в соавторстве с научным руководителем, которому принадлежат формулировка концепции решаемой задачи и постановка цели исследования. Лично автором проведено математическое моделирование процессов распространения примесей в водной среде, создан численный метод определения концентраций ионов металлов в растворах электролитов, разработаны компьютерные программы, обработаны статистические данные, интерпретированы и обобщены результаты экспериментов, сформулированы выводы.

Объем и структура диссертации. Работа состоит из введения, четырех разделов, заключения, библиографического списка из 105 наименований и приложения. Общий объем диссертации составляет 150 страниц машинописного текста, из них 4 таблицы, 53 рисунка и приложение.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы, определена степень ее разработанности, сформулированы цели и задачи исследования. Показаны научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, представлены методы исследования. Изложены основные положения, выносимые на защиту.

В первом разделе рассматривается современное состояние проблемы математического моделирования процессов переноса примесей в водных средах, проводится анализ вычислительных методов и программных средств, которые могут быть использованы для определения концентраций загрязняющих веществ (ЗВ) в водоемах. Рассматриваются постановки технологических задач, подлежащих решению путем математического моделирования для оценки экологического состояния водоемов. Рассматриваются принципы построения комплекса программ для моделирования процессов распространения ЗВ в водоемах региона, определяются задачи на его разработку.

Выполнен обзор и сравнительный анализ базирующихся на решении обратных задач математических методов моделирования диффузионных процессов в растворах электролитов, содержащих ионы тяжелых и цветных металлов. Обосновывается выбор методов вольтаметрии и оцениваются возможности их применения в вычислительных процедурах для комплексного анализа состояния воды.

Второй раздел посвящен разработке численных методов определения остаточных концентраций тяжелых и цветных металлов в промышленных стоках с применением математического моделирования электродных и диффузионных процессов при вольтамперометрических измерениях. Исследования проводились методами регрессионного анализа и математического моделирования.

Методом планирования факторного эксперимента получены уравнения регрессии для катодной и анодной поляризационных кривых:

$$\begin{aligned} I_{\text{макс}}^{\text{кат}} &= 1981,3 + 114,39\tilde{x}_1 + 304,06\tilde{x}_2 + 35,611\tilde{x}_3; \\ I_{\text{макс}}^{\text{ан}} &= 28,083 + 2,223\tilde{x}_1 + 0,3089\tilde{x}_2 + 9,446\tilde{x}_3, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\tilde{x}_i = (x_i - x_i^0)/(x_i^+ - x_i^-)$; x_i^0 – основной, x_i^+ – верхний, x_i^- – нижний уровни i -го фактора: x_1 – температура раствора; x_2, x_3 – концентрации компонентов.

Сущность и работоспособность метода рассмотрены на примере исследования сернокислого электролита цинкования (рисунок 1). Максимальная относительная ошибка определения $I_{\text{макс}}^{\text{кат}}$ и $I_{\text{макс}}^{\text{ан}}$ по уравнениям (1) не превышала 5 %, что является удовлетворительным. Таким образом, концентрацию цинка в растворе можно определить по уравнениям (1) после измерения максимальных величин токов на катодной и анодной кривых.

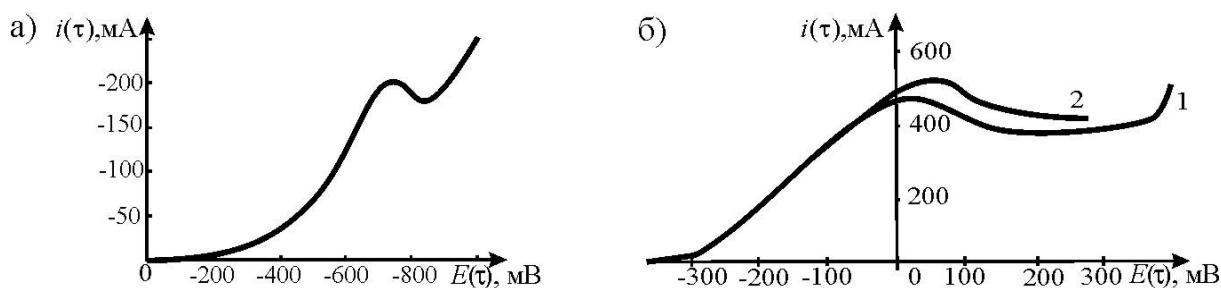


Рисунок 1 – Поляризационные кривые: катодная (а); анодные (б): 1 – при содержании ZnSO_4 в растворе 1,68 и 50,49 моль/л· 10^2 (кривые совпали); 2 – при отсутствии ZnSO_4

Рассмотрены методы математического моделирования электродных и диффузионных процессов электровосстановления металлов при вольтамперметрии, позволяющие определять концентрацию вещества в поликомпонентном растворе электролита, путем решения обратной краевой задачи для уравнения многокомпонентной диффузии с начальными и граничными условиями:

$$\frac{\partial C_j}{\partial \tau} = D_j \frac{\partial^2 C_j}{\partial x^2}; \quad C_j(x, 0) = C_{j0}; \quad C_j(\delta_j, \tau) = C_{j0}; \quad \frac{\partial C_j}{\partial x}(0, \tau) = \frac{i_j(\tau)}{Z_j F D_j}; \quad j = 1, \dots, n; \quad (2)$$

$$i_j(\tau) = i_{j0} \left(\frac{1}{C_{j0}} \cdot C_j(0, \tau) \cdot e^{\frac{\alpha_j Z_j F}{RT}(E(\tau) - E_{j0})} - e^{\frac{(\alpha_j - 1) Z_j F}{RT}(E(\tau) - E_{j0})} \right), \quad i(\tau) = \sum_{j=1}^n i_j(\tau). \quad (3)$$

Здесь $C_j(x, \tau)$ – концентрация j -го электроактивного компонента в точке ($0 \leq x \leq \delta$) диффузионного слоя $[0, \delta_j]$ в момент времени τ ; C_{j0} – концентрация этого компонента в глубине раствора; $E(\tau)$ – потенциал системы; E_{j0} – равновесные потенциалы электродных реакций; i_{j0} – плотности токов обмена в растворе; $i_j(\tau)$ – парциальные плотности тока на электроде; α_j – коэффициенты переноса; Z_j – валентность разряжающегося иона в растворе; D_j – коэффициенты диффузии; F – число Фарадея; R – универсальная газовая постоянная; T – абсолютная температура процесса.

Требовалось определить такое значение C_{j0} , чтобы теоретическая (3) и экспериментальная (рисунок 2) кривые $E_j(\tau) - i_j(\tau)$ были наиболее близки друг к другу, то есть решалась задача минимизации:

$$S(C_{j0}) = \sum_{j=1}^n \left\{ i_0 \left[\frac{1}{C_{j0}} C_j(0, \tau_j) \cdot e^{\frac{\alpha_j Z_j F}{RT} (E(\tau_j) - E_{j0})} - e^{\frac{(\alpha_j - 1) Z_j F}{RT} (E(\tau_j) - E_{j0})} \right] - i_j \right\}^2 \rightarrow \min_{C_{j0}}, \quad (4)$$

где $i(\tau_j)$ и i_j – расчетные и экспериментальные значения плотности тока.

Разработан численный метод определения концентрации, основанный на численном интегрировании обратной гранично-коэффициентной задачи (2)–(4) с использованием кусочно-линейной поляризационной кривой. Метод основан на известном из теоретической электрохимии положении о независимости диффузионных характеристик от поляризующего тока, что позволяет представить задачу суперпозицией двух подзадач, в каждой из которых отдельно учитывается влияние диффузионных и токовых режимов на изменение концентрации веществ, принимающих участие в электродной реакции. Методом от противного доказана единственность решения обратной задачи для однокомпонентной системы.

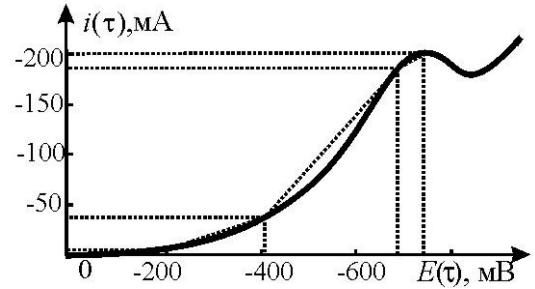


Рисунок 2 – Вольтамперная кривая с участками линейаризации

Рассмотрен метод решения задач на примере моделирования электрохимической системы с одним электроактивным компонентом (индекс $k=1$ в уравнениях (2)–(4) опускается). Положим, что вольтамперная кривая в координатах (E_j, i_j) допускает линейное приближение на интервалах $[\tau_i, \tau_{i+1}]$, $i=1, \dots, n$.

Показано, что кусочно-линейная функция представима в виде

$$i(\tau) = i_1 \psi_1(x, \tau) + \sum_{k=2}^{n-1} i_k (\psi_{2k-2} + \psi_{2k-1}) + i_n \psi_{2(n-1)},$$

а функция $C(x, \tau)$ может быть записана как

$$C(x, \tau) = C_0 + i_1 \varphi_1(x, \tau) + \sum_{k=2}^{n-1} i_k (\varphi_{2k-2} + \varphi_{2k-1}) + i_n \varphi_{2(n-1)}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \varphi_k}{\partial \tau} = D \frac{\partial^2 \varphi_k}{\partial x^2}; \quad \varphi_k(x, 0) = 0; \quad \varphi_k(\delta, \tau) = 0; \quad \frac{\partial \varphi_k}{\partial x}(0, \tau) = \frac{\psi_k(\tau)}{zFD}, \quad (6)$$

где φ_k – решения задачи, а представленные на рисунке 3 функции $\psi_k(\tau)$ являются вспомогательными функциями.

Подстановка выражения для $C(x, \tau)$ из формулы (5) в формулу (4) с последующим нахождением минимума $S(\xi)$, где $\xi=1/C_0$, путем решения уравнения $\partial S / \partial \xi = 0$ позволило получить выражение для функции концентрации:

$$C_0 = \sum_{k=1}^N i_0 C(0, \tau_k) e^{\frac{\alpha Z F}{RT} (E(\tau_k) - E_0)} \left/ \left(\sum_{k=1}^N i_0 e^{\frac{(\alpha-1) Z F}{RT} (E(\tau_k) - E_0)} + i_k \right) \right.$$

Входящие в формулу величины $C(0, \tau_k)$ находятся из соотношения (4) и уравнений (5).

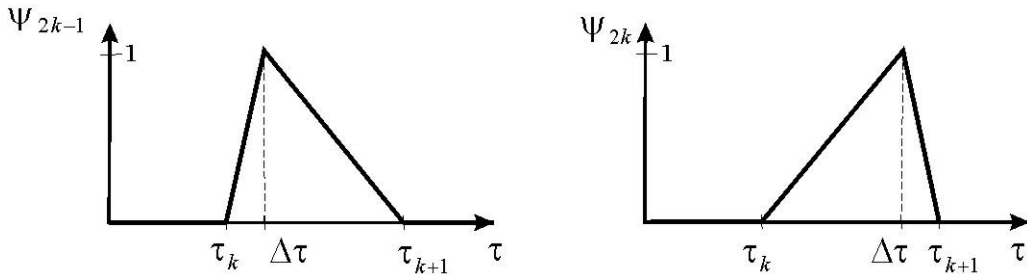


Рисунок 3 – Графики вспомогательных функций

Для определения функций ϕ_k из уравнений (6) используется метод построения функции источника. Путем замены неизвестных функций ϕ (индекс k опущен для простоты) с помощью соотношений $\bar{\phi} = \phi \cdot ZFD$, переменной $\xi = x/\delta$, $0 \leq \xi \leq 1$ и функции $\eta(\xi, \tau) = \bar{\phi}(\xi, \tau) - (\xi - 1)\psi(\tau)$ для функции η получается краевая задача

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} = \frac{\partial \eta}{\partial \xi^2} + (\xi - 1)\psi'(\tau); \quad \eta(\xi, 0) = 0; \quad \eta(1, \tau) = 0; \quad \frac{\partial \eta}{\partial \xi}(0, \tau) = \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \xi} - \frac{\psi(\tau)}{ZFD} = 0,$$

которая имеет следующее общее решение:

$$\eta(\xi, \tau) = \int_0^\tau dt \int_0^1 (1 - y)\psi'(\tau) \left(2 \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\lambda_n^2 D \cdot (\tau - t)} \cos \lambda_n y \cos \lambda_n x \right) dy, \quad (7)$$

где $2 \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\lambda_n^2 D t} \cos \lambda_n y \cos \lambda_n x = G(x, y, t)$ – функция источника, $\lambda_n = \frac{(2n + 1)\pi}{2}$. После преобразований и упрощений получены следующие решения уравнений (7):

$$\eta_{2k-1}(0, \tau) = -2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{\lambda_n^2 D \cdot (\tau_{k+1} - \tau)} - e^{\lambda_n^2 D \cdot (\tau_k - \tau)}}{\lambda_n^4 D \cdot (\tau_{k+1} - \tau_k)};$$

$$\eta_{2k}(0, \tau) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{\lambda_n^2 D \cdot (\tau_{k+1} - \tau)} - e^{\lambda_n^2 D \cdot (\tau_k - \tau)}}{\lambda_n^4 D \cdot (\tau_{k+1} - \tau_k)}.$$

Следовательно,

$$\phi_{2k-1}(0, \tau) = \frac{1}{ZFD \cdot (\tau_{k+1} - \tau_k)} \cdot \left[-2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n^4 D} \left[e^{\lambda_n^2 D \cdot (\tau_{k+1} - \tau)} - e^{\lambda_n^2 D \cdot (\tau_k - \tau)} \right] - (\tau_{k+1} - \tau_k) \right],$$

$$\phi_{2k}(0, \tau) = \frac{1}{ZFD \cdot (\tau_{k+1} - \tau_k)} \cdot \left[2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n^4 D} \left[e^{\lambda_n^2 D \cdot (\tau_{k+1} - \tau)} - e^{\lambda_n^2 D \cdot (\tau_k - \tau)} \right] - (\tau_{k+1} - \tau_k) \right].$$

Разработанный метод математического моделирования позволил составить аналитические выражения остаточных концентраций электролитов, представленные в виде алгебраических формул, удобных для машинных расчетов. Проведенные вычисления на примере моделирования процессов в однокомпонентном электролите показали удовлетворительную работоспособность алгоритма. Изложенный метод обобщен для моделирования n -компонентной

системы путем разложения суммарной поляризационной кривой на парциальные составляющие.

В третьем разделе рассматриваются вопросы математического моделирования и построения эффективных численных алгоритмов для прогнозирования процессов распространения ЗВ в водоемах, при этом учитывались три основных варианта массопереноса вещества: диффузионный; диффузионно-конвективный; преимущественно конвективный. В каждом случае рассматривались одномерные, двумерные или трехмерные модели.

В условиях одномерной диффузии, когда перенос загрязняющего вещества происходит в одном преобладающем направлении, рассмотрены два варианта: 1) диффузия из точечного источника с заданным, известным количеством ЗВ; 2) диффузия из «постоянно действующего» источника с известной скоростью истечения ЗВ. Обе задачи описываются известным уравнением диффузии, однако начальные и граничные условия для этого уравнения существенно различны. Решения этих задач найдены с помощью интеграла Пуассона

$$C(x,t) = C_0 [1 - \Phi(z)] \quad \text{для} \quad z = \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \quad \text{и} \quad \text{функции} \quad \text{источника}$$

$$C(x,t) = \sqrt{\frac{D}{\pi}} \cdot \int_0^t \frac{P(\tau)}{\sqrt{t-\tau}} \cdot e^{-\frac{x^2}{4D(t-\tau)}} d\tau. \quad \text{Здесь} \quad \Phi(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-\alpha^2} d\alpha - \text{функция ошибок;}$$

$P(\tau)$ – плотность диффузионного потока. Некоторые результаты решения задач в конкретных экологических условиях показаны на рисунке 4.

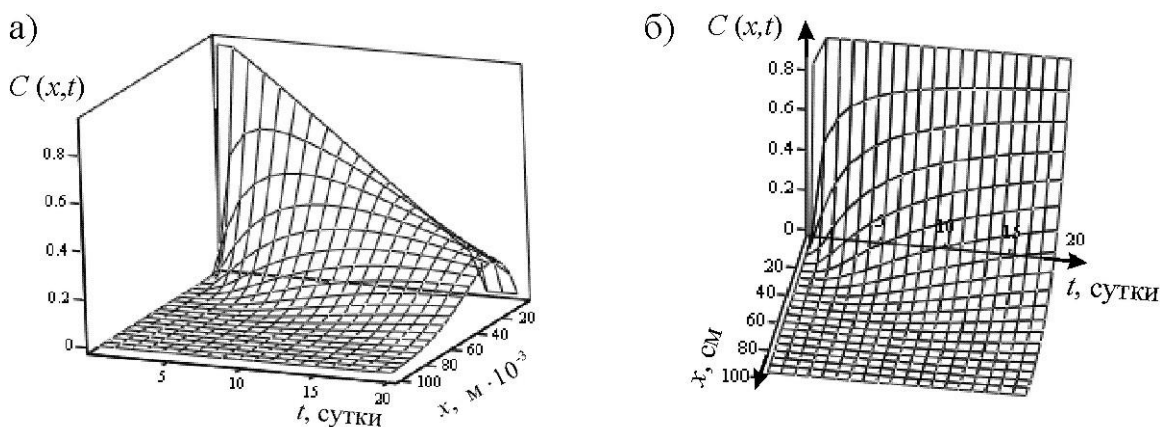


Рисунок 4 – Одномерная диффузия. Зависимость концентрации от времени и от расстояния: для точечного источника (а); для ЗВ с постоянной плотностью потока (б)

Математическое моделирование двумерной диффузии (рисунок 5, а) используется, когда загрязнение из источника плотности $p = \text{const}$ происходит на некотором, достаточно малом участке границы $[-a, a]$ водоема:

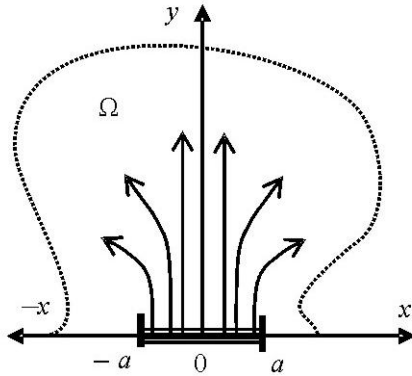
$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right); \quad C(x, y, 0) = 0; \quad \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_{y=0} = \begin{cases} p & \text{при } x \in [-a, a], \\ 0 & \text{при } x \notin [-a, a], \end{cases}$$

$$C(x, 0) \Big|_{-a \leq x \leq a} = C_0, \quad C(x, y) \Big|_{y=\infty} = 0, \quad C(x, y) \Big|_{x=\pm\infty} = 0.$$

Задача решена с помощью преобразования Фурье (пример решения – на рисунке 5, б)

$$C(x, y, t) = \frac{P}{(2\sqrt{D\pi})^3} \int_0^t \int_{-a}^a \left[\frac{1}{(t-\tau)^{3/2}} \right] \cdot e^{-\frac{(x-\xi)^2+y^2}{4D(t-\tau)}} d\xi d\tau.$$

а)



б)

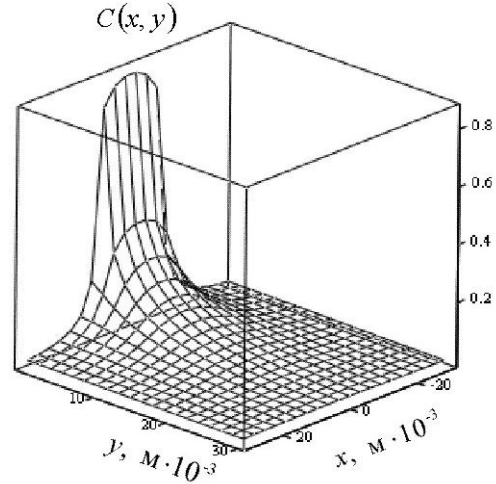


Рисунок 5 – Двумерная диффузия: источник ЗВ с плотностью $p(x, t)$ на участке $[-a, a]$ (а); концентрация вокруг источника ЗВ при $p(x, t) = 100 \text{ см}^3/\text{сут}$; $t = 2 \text{ сут}$ (б)

Для решения практически важной задачи, когда в начале координат (в глубине водоема) действует источник постоянной мощности, выделяющий в единицу времени некоторое количество вещества q , выполнено математическое моделирование трехмерной сферической диффузии. Уравнение пространственной диффузии в сферической системе координат имеет вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right).$$

Используя замену $V(r, t) = r \cdot C(r, t)$, получим уравнение $\frac{\partial V}{\partial t} = D \frac{\partial^2 V}{\partial r^2}$ с начальным условием $V(r, 0) = 0$. Опишем сферу S_ε радиуса ε вокруг начала координат ($r=0$). Количество вещества, проходящего через сферу, определяется как $\iint_{S_\varepsilon} \frac{\partial C}{\partial N} d\sigma$. Переходя к пределу $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[-\iint_{S_\varepsilon} \frac{\partial C}{\partial N} d\sigma \right] = q$ или $-\frac{\partial C}{\partial N} \cdot 4\pi\varepsilon^2 \rightarrow q$, находим, что $C \rightarrow q/4\pi\varepsilon$, а граничное условие имеет вид $V = q/4\pi = V_0$ при $r=0$. Решение этого уравнения можно записать в виде $V(r, t) = V_0 [1 - \Phi(x/2\sqrt{Dt})]$. Следовательно,

$$C(r, t) = \frac{2q}{4\pi r \sqrt{\pi}} \cdot \int_r^\infty e^{-\alpha^2} d\alpha. \quad (8)$$

Рассмотренный метод, иллюстрированный рисунком 6, а, может быть использован для исследования процесса загрязнения с источником на поверхности или на дне водоема, если предположить, что диффундирование в

атмосферу и в дно не происходит. В противном случае в выражение (8) достаточно ввести коэффициент, учитывающий диффундирование через поверхность полусферы. Для случая, когда от источника массой M и мощностью q , действующего в точке (x', y', z') в течение времени τ , в водоем попадет некоторое количество вещества $Q = q\tau$ (рисунок 6, б), получено решение в виде:

$$C(r,t) = \frac{Q}{4\pi kr} \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\frac{r^2}{4Dt}} \cdot \frac{r}{4D\sqrt{Dt^3}} \cdot D, \quad r = \sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}.$$

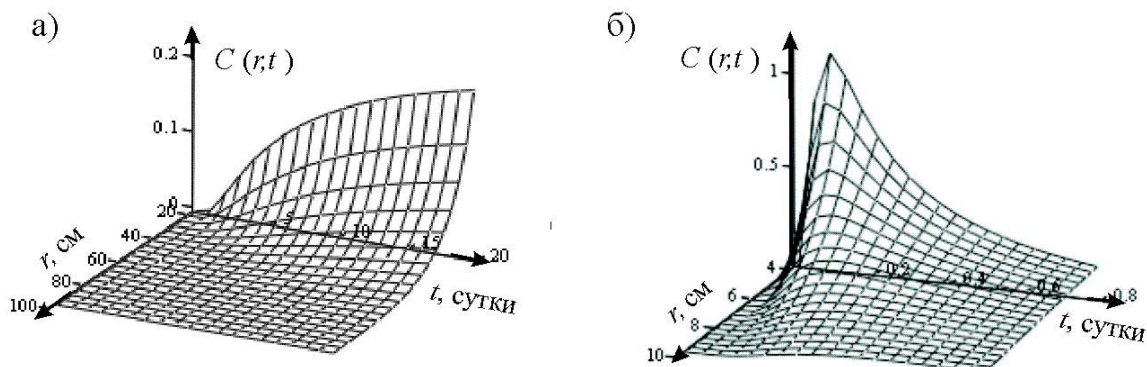


Рисунок 6 – Трехмерная сферическая диффузия: источник мощности $q=\text{const}$ (а); мгновенный источник (б)

Математическое моделирование нестационарной конвективной диффузии выполнялось на примере «плоского» водоема со слабым течением, когда расчетная область представляет собой широкий двухмерный канал, на некотором достаточно малом отрезке границы которого существует источник пассивной примеси. В этом случае используется известное уравнение переноса примеси

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u C) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v C) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C}{\partial y} \right), \quad (9)$$

где x и y – продольная и поперечная координаты относительно водного потока, ρ – плотность примеси, u и v – осредненные скорости потока в направлениях x и y .

Краевые условия (рисунок 7, а) сводятся к следующему:

- 1) считаем, что $C|_{AB} = C|_{CD} = 0$;
- 2) $\partial C / \partial n = 0$ на $|BC|$, $|AF|$, $|ED|$, где n – направление внутренней нормали;
- 3) на отрезке $|FE|$ рассмотрены два случая: а – скорость поступления ЗВ мала, если $|AB| \gg |FE|$, то можно считать $C|_{FE} = \text{const} = C_0$; б – загрязняющее вещество под давлением поступает в канал $ABCD$, $|AB|$ сравнимо с $|FE|$, то можно считать скорость поступления ЗВ $(\partial C / \partial n)|_{FE} = \text{const} = C_n$.

Для решения уравнения (9) разработана вычислительная процедура на основе конечно-разностного метода с использованием регулярной квадратной сетки с шагом h . Задача приводится к системе линейных алгебраических уравнений вида $\bar{A} \cdot \bar{C} = \bar{f}$, которая решается методом Зейделя с удовлетворительной скоростью сходимости (результаты расчета – на рисунке 7, б):

$$\bar{C}^{n+1} = \bar{D}^{-1}(-\bar{M} \cdot \bar{C}^n - \bar{N} \cdot \bar{C}^n + \bar{f}),$$

где \bar{A} – матрица коэффициентов при неизвестных \bar{C} ; \bar{f} – вектор-столбец свободных членов; \bar{C}^n – вектор неизвестных, найденный на n -й итерации; \bar{D} – диагональная матрица; \bar{M} , \bar{N} – соответственно нижняя и верхняя треугольные матрицы, такие что $\bar{A} = \bar{D} + \bar{M} + \bar{N}$.

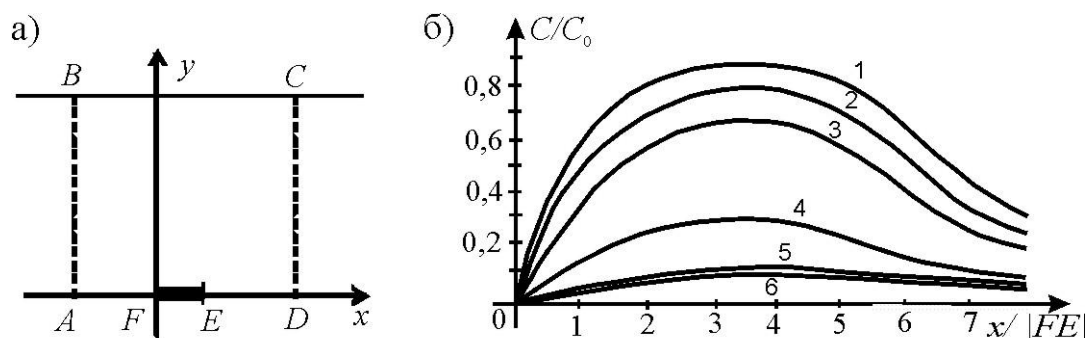


Рисунок 7 – Конвективная диффузия: расчетная область: $|AB|$ и $|CD|$ достаточно удалены от источника $|FE|$ (а); изменение относительной концентрации на расстоянии от $\frac{1}{8}|FE|$ до $\frac{6}{8}|FE|$ от оси x (линии 1–6 соответственно) при $u=5$ см/с, $v=0,1$ см/с (б)

Конвективный механизм распространения ЗВ характерен для случая, когда ЗВ поступает в течение протяженного времени, образуя равномерно движущийся поток. Для моделирования конвективного переноса примеси в водоеме с трапециевидальной формой сечения русла (рисунок 8, а) выведены выражения значений гидравлического радиуса, скорости движения потока, времени начала загрязнения водоёма и концентрации. Пример математического моделирования распределения концентрации ЗВ в потоке одной из малых рек Пензенского региона приведен на рисунке 8, б.

Рассмотренные методы моделирования позволяют прогнозировать распространение ЗВ по сухим водотокам и в проточных водоемах в случаях возникновения аварийных ситуаций. Рассчитано, например, что для ЗВ с массой $G=248,5$ кг, время достижения контрольной точки водоема будет составлять ориентировочно $t=1,65$ часа, при этом количество загрязнения может составить $G_3=29,3$ кг.

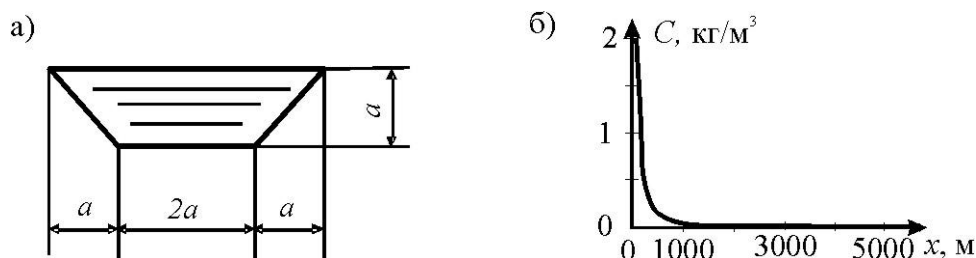


Рисунок 8 – Модель распределения концентрации ЗВ: модель поперечного сечения русла (а); изменение концентрации ЗВ в водотоке при объеме ЗВ в 1 кг (б)

В четвертом разделе рассматриваются вопросы построения комплекса программ, предназначенного для математического моделирования состояния водной среды региона.

Водная система представлена в виде взвешенного ориентированного графа (рисунок 9) с заданными весами соответствующих вершин – характерных точек

местности, в которых возможен сброс ЗВ в водоем, мест водозабора и пр., и ребер – однородных участков местности, таких что параметры соответствующего отрезка местности (скорость течения, форма рельефа и другие характеристики) можно принять постоянными для всех точек этого объекта.

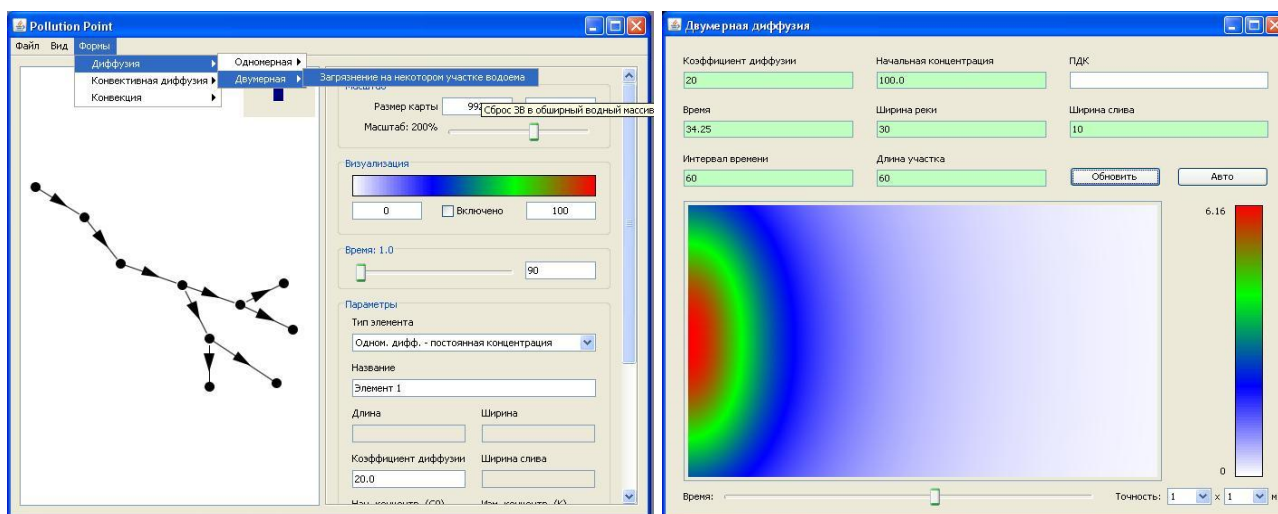


Рисунок 9 – Экранные формы комплекса программ

Алгоритм расчета предусматривает выбор варианта распространения ЗВ в водной среде – диффузионного, конвективного или диффузионно-конвективного, каждому из которых соответствуют одно-, двух- или трехмерные математические модели. К каждому ребру графа применяется соответствующая модель. Исходными данными на каждом последующем этапе исследований являются результаты расчетов, полученные на пройденных ребрах графа.

Алгоритм решения реализуется по следующей схеме: 1) составляется граф: задаются вершины, строятся ребра; 2) для каждого ребра осуществляется выбор варианта расчета в соответствии с моделью распространения ЗВ; 3) определяется концентрация вещества в зависимости от расстояния и от времени $C(x, t)$. При этом значение концентрации в концевой вершине является начальной концентрацией для последующего инцидентного ребра. Решена проблема согласования выходных и входных величин в вершинах, инцидентных нескольким ребрам графа. Имеется возможность сравнения с ПДК полученных величин концентраций в каждой точке и в каждый момент времени.

Результаты расчетов представляются в виде таблиц, двух- и трехмерных графиков или визуальной схемы процесса (рисунок 9). Структура и среда разработки комплекса программ допускает его оптимизацию на любом этапе создания и эксплуатации. Для математических вычислений в различных программных блоках использовались универсальные пакеты вычислительных процедур Mathcad, MatLAB, язык программирования Java 6 и графическая среда разработки NetBeans IDE 7.0.

Комплекс программ обсуждался на расширенном заседании кафедр «Математика и математическое моделирование», «Информационно-вычислительные системы», «Водоснабжение, водоотведение и гидротехника», «Инженерная экология» Пензенского государственного университета архитектуры и

строительства с участием представителей экологических служб региона. Получены благоприятные отзывы, признана целесообразность использования комплекса для мониторинга гидросферы региона.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Создан метод и выполнено математическое моделирование процессов электрохимической диффузии в электролитах на основе методов вольтамперометрического анализа и физико-химических описаний, представленных в виде обратных гранично-коэффициентных задач математической физики. Доказана единственность решения таких задач для определения концентрации ионов металлов в растворах электролитов.

2. Создан метод и выполнено математическое моделирование процессов распространения примесей веществ в водной среде, представленных в виде краевых задач для уравнений диффузионного и конвективного массопереноса, описывающих возможные сценарии распространения примесей.

3. Разработаны численные методы и вычислительные алгоритмы исследования вольтамперометрических характеристик однокомпонентных и многокомпонентных растворов, содержащих ионы тяжелых и цветных металлов. Отличительная особенность разработанных методов состоит в отдельном математическом описании диффузионных и электродных процессов. Это позволило представить решение обратных гранично-коэффициентных задач для уравнений электрохимической диффузии в растворе (по определению электрохимических параметров, в частности, концентрации ионов металлов) в аналитическом виде – в виде нелинейных алгебраических уравнений и их систем.

4. Разработан комплекс программ для реализации численных методов и вычислительных алгоритмов решения задач диффузионного и конвективного переноса, моделирующих распространение примесей в водной среде, содержащий расчетные блоки для определения концентраций загрязняющих веществ. Создан визуальный интерфейс для представления процессов переноса вещества в виде ориентированного взвешенного графа.

5. С использованием разработанных вычислительного алгоритма и комплекса программ проведены вычислительные эксперименты по определению концентрации ионов металлов в разбавленных растворах электролитов и сточных водах промышленных производств, а также по исследованию распространения загрязняющих веществ в водоемах Пензенской области. Показано удовлетворительное соответствие результатов расчетов экспериментальным данным.

СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в журналах, рекомендованных ВАК

1. Кузина, В.В. Математическое моделирование как метод прогнозирования изменения состояния водных экосистем на примере Пензенского водохранилища [Текст] / В.А. Щепетова, В.В. Кузина // *Фундаментальные исследования*. – 2013. – № 8. – Ч. 3. – С. 1373–1377.

2. Кузина, В.В. Разработка автоматизированной системы управления и контроля над состоянием водной среды региона [Текст] / В.В. Кузина, А.Н. Кошев // Автоматизация и современные технологии. – 2013. – №4. – С. 44–48.

3. Кузина, В.В. Математическое моделирование как элемент управления в задачах строительной отрасли [Текст] / А.Н. Кошев, В.В. Кузина, Т.А. Глебова // Региональная архитектура и строительство. Науч.-технический журнал. – 2012. – № 2 (13). – С. 167–176.

4. Кузина, В.В. Моделирование и расчет концентрации электроактивного компонента в процессе электролиза [Текст] / А.Н. Кошев, В.В. Кузина // Управление большими системами. – 2011. – Вып. 33. – С. 233–253.

5. Кузина, В.В. Математические модели для автоматизированного контроля концентрации ионов металлов в промышленных стоках [Текст] / В.В. Кузина, А.П. Замятин, А.Н. Кошев // Автоматизация и современные технологии. – 2008. – № 11. – С. 38–43.

6. Кузина, В.В. Математическое моделирование и построение информационной системы для мониторинга распространения возможных техногенных загрязнений водной среды региона [Текст] / В.В. Кузина, А.Н. Кошев, И.Ф. Сухов // Известия высших учебных заведений. Строительство. – 2008. – № 8. – С. 70–75.

7. Кузина, В.В. Система мониторинга распространения возможных техногенных загрязнений водной среды региона на основе математических моделей и методов [Текст] / В.В. Кузина, А.Н. Кошев // Известия высших учебных заведений. Строительство. – 2008. – № 7. – С. 106–112.

8. Кузина, В.В. Математические модели в задачах вольтамперометрического анализа [Текст] / В.В. Кузина, А.П. Замятин, А.Н. Кошев // Экологические системы и приборы. – 2006. – № 8. – С. 37–41.

Монография

9. Кузина, В.В. Разработка и исследование математических моделей нестационарных процессов в электрохимических реакторах с проточными трехмерными электродами [Текст]: монография / А.Н. Кошев, В.В. Кузина. – Пенза: ПГУАС. – 2011. – 114 с.

Публикации в других изданиях

10. Кузина, В.В. Разработка комплекса программ для расчета и прогнозирования процесса распространения примесей в воде [Текст] / В.В. Кузина, А.Н. Кошев и др. // Новые достижения по приоритетным направлениям науки и техники: сб. докладов Международной научно-технической конференции молодых ученых и исследователей. – Пенза: ПГУАС, 2013. – С. 148–152.

11. Кузина, В.В. Математические модели как элемент информационной системы мониторинга водной среды региона [Текст] / В.В. Кузина, А.Н. Кошев // Математические методы в технике и технологиях – ММТТ 25: сб. трудов XXV Междунар. науч. конф.: в 10-и т. Т. 2. Секции 3, 4 / Под общ. ред. А.А. Большакова. – Волгоград: Волгогр. гос. техн. ун-т; Харьков: Национ. техн. ун-т «ХПИ», 2012. – С. 116–118.

12. Кузина, В.В. Математическая обработка вольтамперной кривой как метод расчета электрохимических параметров в поликомпонентном растворе

[Текст] / А.Н. Кошев, В.В. Кузина // Информационные системы и модели в научных исследованиях, промышленности, образовании и экологии: доклады X Всеросс. науч.-тех. конф. – Тула: Изд-во «Инновационные технологии», 2012. – С. 17–23.

13. Кузина, В.В. Прогнозирование распространения примесей в воде математическими методами [Текст] / В.В. Кузина, А.Н. Кошев и др. // Актуальные проблемы инженерных наук в области промышленности, экологии и охраны водных ресурсов: сб. науч. тр. Междунар. науч.-практ. конф. – Пенза: ПГУАС, 2012. – С. 196–202.

14. Кузина, В.В. Компьютерное моделирование процессов переноса в водной среде [Текст] / В.В. Кузина, А.Н. Кошев и др. // Информационно-вычислительные технологии и их приложения: сб. статей XVII Междунар. науч.-тех. конф. – Пенза: РИО ПГСХА, 2012. – С. 36–40.

15. Кузина, В.В. Принципы построения информационной системы для определения концентраций электроактивных компонентов в электролитах [Текст] / В.В. Кузина, Н.В. Кошева, Е.В. Зыбина // Информационно-вычислительные технологии и их приложения: сб. статей XV Междунар. науч.-тех. конф. – Пенза: РИО ПГСХА, 2011. – С. 100–104.

16. Кузина, В.В. Математические модели в задачах строительства [Текст] / А.Н. Кошев, В.В. Кузина // Математическое и компьютерное моделирование в решении задач строительства, техники, управления и образования: сб. статей XVI Междунар. науч.-тех. конф. – Пенза: РИО ПГСХА, 2011. – С. 36–46.

17. Кузина, В.В. Математическое моделирование процессов переноса примесей в водных экосистемах региона [Текст] / В.В. Кузина, А.Н. Кошев // Математические методы в технике и технологиях: сб. трудов XXIII Междунар. науч. конф. В 12-и т. Т. 4. Секция 4 / Под общ. ред. В.С. Балакирева. – Саратов: Изд-во Саратов. гос. техн. ун-та. – 2010. – С. 88–91.

18. Кузина, В.В. Прогнозирование техногенных загрязнений водной среды региона как необходимый компонент планирования строительных объектов [Текст] / В.В. Кузина, А.Н. Кошев // Исследования и инновационные разработки РААСН: сб. ст. к общ. собр. РААСН: в 2-х т.; под ред. А.П. Кудрявцева. – М. – Иваново: Иван. гос. архит.-строит. ун-т, 2010. – Т. 2. – С. 129–134.

19. Кузина, В.В. Математические модели мониторинга техногенных загрязнений водной среды региона [Текст] / В.В. Кузина, А.Н. Кошев, И.Ф. Сухов // Наука и технологии. Том 2. Труды XXVIII Российской школы. – М.: РАН, 2008. – С. 251–258.

20. Кузина, В.В. Математические модели и система мониторинга техногенных загрязнений водной среды региона [Текст] / В.В. Кузина, А.Н. Кошев, И.Ф. Сухов // Наука и технологии. Секция 5. Новые технологии. –Краткие сообщения XXVIII Российской школы. – Екатеринбург: УрО РАН, 2008. – С. 103–105.

21. Кузина, В.В. Моделирование и прогнозирование техногенных загрязнений водной среды региона [Текст] / В.В. Кузина, А.Н. Кошев // сб. науч. трудов факультета прикладной математики и компьютерных технологий Хмельницкого национального университета. – 2008. – № 1. – С. 132–135.

22. Кузина, В.В. Автоматизированная информационная система расчета и прогнозирования экологического мониторинга водоемов Пензенской области [Текст] / О.Ю. Ивина, В.В. Кузина, А.Н. Кошев и др. // Информационно-вычислительные технологии и их приложения: сб. статей IX Междунар. науч.-тех. конф. – Пенза: РИО ПГСХА, 2008. – С. 93–96.

23. Кузина, В.В. Расчет концентрации ионов металлов в промышленных стоках с использованием методов вольтамперометрии и математического моделирования [Текст] / В.В. Кузина, А.Н. Кошев и др. // Вестник Хмельницкого национального университета (Вестник технологического университета Подолья). – 2007. – Том 2. Технические науки. – № 3. – С. 228–236.

24. Кузина, В.В. Графическое представление алгоритмов мониторинга экологического состояния водной системы области [Текст] / В.В. Кузина, О.С. Волкова, А.Н. Кошев // Информационно-вычислительные технологии и их приложения: сб. статей VI Междунар. науч.-тех. конф. – Пенза: ПГСХА, 2007. – С. 55–58.

25. Кузина, В.В. Прогнозирование распространения возможных загрязнений в водной среде методами математического моделирования [Текст] / В.В. Кузина, А.Н. Кошев и др. // Информационно-вычислительные технологии и их приложения: сб. статей VI Междунар. науч.-тех. конф. – Пенза: ПГСХА, 2007. – С. 62–64.

26. Кузина, В.В. Расчет концентрации ионов металлов в сточных водах [Текст] / В.В. Кузина, А.Н. Кошев, А.П. Замятин // Информационно-вычислительные технологии и их приложения: сб. статей IV российско-украинского науч.-тех. и метод. симпозиума. – Пенза: ПГСХА, 2006. – С. 136–142.

27. Кузина, В.В. Математические методы расчета концентраций ионов металлов [Текст] / В.В. Кузина, А.Н. Кошев // Информационно-вычислительные технологии и их приложения: сб. статей V Междунар. науч.-тех. конф. – Пенза: ПГСХА, 2006. – С. 192–195.

28. Кузина, В.В. Имитационное моделирование при оценке возможного загрязнения водной системы региона [Текст] / В.В. Кузина, И.Ф. Сухов, А.Н. Кошев // Вестник Хмельницкого национального университета (Вестник технологического университета Подолья). – 2005. – Том 1. Технические науки. – № 6. – С. 140–142.

29. Кузина, В.В. Проектирование информационной системы учета и графического описания водных ресурсов [Текст] / В.В. Кузина, А.В. Шмелев // Компьютерные и вычислительные технологии в задачах естествознания и образования: сб. материалов Междунар. науч.-тех. конф. – Пенза: ПГСХА, 2005. – С. 160–163.

30. Кузина, В.В. Математические модели вольтамперометрии как обратные задачи математической физики [Текст] / А.Н. Кошев, В.В. Кузина, Н.В. Кошева // Математические методы в технике и технологиях: сб. трудов XV Междунар. науч. конф. В 10-и т. Т. 1. Секция 1 / Под общ. ред. В.С. Балакирева. Тамбов: Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та. – 2002. – С. 129–133.

КУЗИНА Валентина Владимировна

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ
РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПРИМЕСЕЙ В ВОДНОЙ СРЕДЕ**

Специальность 05.13.18 – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

**Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук**

Компьютерная верстка Т.А. Антиповой

Сдано в производство 13.11.2013. Формат 60x84 ¹/₁₆

Бумага типогр. № 1. Печать трафаретная. Шрифт Times New Roman Cyr.

Усл. печ. л. 1,16. Уч.-изд л. 1,17. Заказ № 2377. Тираж 100.

Пензенский государственный технологический университет.
440039, Россия, г. Пенза, пр. Байдукова/ул. Гагарина, 1^а/11