

Федеральное агентство научных организаций
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
ИНСТИТУТ ВОДНЫХ И ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ПРОБЛЕМ
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИВЭП СО РАН)

УТВЕРЖДАЮ

Директор ИВЭП СО РАН

д.б.н., профессор

_____ А.В. Пузанов

«_____» _____ 2018 г.

ОТЧЕТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ
по проекту «Разработка методов оценки диффузного стока с урбанизированных
территорий путем решения обратных задач моделирования качества воды»
(3 этап. Часть 2. Математические модели)

Научная программа 137 «Эволюция окружающей среды и климата под воздействием природных и антропогенных факторов, научные основы рационального природопользования и устойчивого развития; территориальная организация хозяйства и общества»

Руководитель проекта, д.т.н.

_____ А.Т. Зиновьев
подпись, дата

Барнаул 2018

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	3
1. Модель расчета распределения концентрации поллютанта при рассеивании стока русловым течением	4
2. Построение метода расчета диффузного загрязнения, основанного на решении прямых и обратных задач моделирования качества воды	8
3. Методы оценивания загрязнения поверхностных вод неконсервативными примесями с использованием моделей качества воды .	25
4. Модель оценивания суммарного стока пассивной (консервативной) примеси от нестационарного источника.....	30
Заключение	34
Список использованных источников	34

Введение

Во 2-ой части отчета по теме НИР «Разработка методов оценки диффузного стока с урбанизированных территорий путем решения обратных задач моделирования качества воды» за 3-й этап представлены различные подходы к созданию методов оценки диффузного стока с урбанизированных территорий. Предложенные методы расчетов даны в различной степени проработки. Окончание работ по созданию апробированных методов расчета в соответствии с планами НИР на 2018 г. предполагается на 4 этапе работ. Для разработки методов оценки диффузного стока с урбанизированных территорий путем решения обратных задач моделирования качества воды на 3 этапе работ выполнены разработки различных математических и компьютерных моделей качества воды на пилотном участке реки в районе урбанизированной территории (с привлечением данных экспедиционных исследований).

Содержанием работ 3-го этапа является разработка математических и компьютерных моделей качества воды на пилотном участке реки в районе урбанизированной территории (с привлечением данных экспедиционных исследований).

Планируемые результаты 3-го этапа это результаты вариантных расчетов с использованием разработанной компьютерной модели качества воды на пилотном участке реки в районе урбанизированной территории (с привлечением данных экспедиционных исследований по пилотному объекту и данных по диффузному загрязнению поверхностных вод в бассейне р. Волга).

1. Модель расчета распределения концентрации загрязнителя при рассеивании стока русловым течением

На рис. 1 приведена общая схема поступления диффузного загрязнения на участке реки.

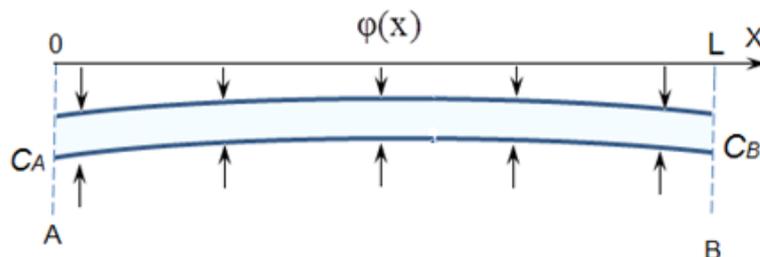


Рис.1 – Схема распределенного поступления загрязнителей в русло реки

Рассмотрим уравнение переноса примесей в реке, описывающее процесс загрязнения, отображенный на рис. 1:

$$\frac{\partial(\omega c)}{\partial t} + \frac{\partial(Qc)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(E\omega \frac{\partial c}{\partial x} \right) = \Phi(x, t) \quad (1)^1$$

где:

ω – площадь живого сечения русла (м^2);

$c(x, t)$ – концентрация примеси ($\text{кг}/\text{м}^3$);

$Q(x, t)$ – объемный расход ($\text{м}^3/\text{с}$);

$\Phi(x, t)$ – массовая скорость стока на единицу длины ($\text{кгм}^{-1}/\text{с}$);

E – коэффициент продольной дисперсии ($\text{м}^2/\text{с}$).

Вначале проведем анализ стационарной задачи (1). В предположении установившегося течения, уравнение (1) можно представить в виде:

$$\frac{\partial c}{\partial x} - \frac{E}{V} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = \varphi(x) \quad (2)$$

где V – средняя на участке линейная скорость течения, $\varphi(x)$ – линейная плотность массовой скорости стока ($\text{кг}/\text{м}^4$). Граничные условия для уравнения (2) определяются измерением концентрации на границах интервала: $c(0) = c_A$; $c(L) = c_B$

Первый интеграл для уравнения (2) (поток в точке x) имеет вид:

¹ Нумерация формул внутри раздела

$$\frac{\partial c}{\partial x} = C_1 \exp(Vx/E) - (V/E) \int_0^x \varphi(\xi) \exp[-V(\xi - x)/E] d\xi \quad (3)$$

Решение (3) требует знания зависимости $\varphi(\xi)$.

1. В случае точечного источника, величину $\varphi(\xi)$ можно определить как дельта-функцию вида: $\varphi(\xi) = c_0 \delta(\xi - x_0)$, где c_0 есть концентрация в точке x_0 ($0 \leq x_0 \leq L$). Тогда общее решение (3) будет иметь вид:

$$\frac{dc}{dx} = \begin{cases} -(Vc_A/E) \exp[V(x_0 - x)/E]; & x \geq x_0 \\ 0; & x < x_0 \end{cases} \quad (4)$$

Первый интеграл от (4) (рис.2) представится в виде:

$$c(x) = c_A \exp[(V/E)(x_0 - x)] \quad (x \geq x_0) \quad (5)$$

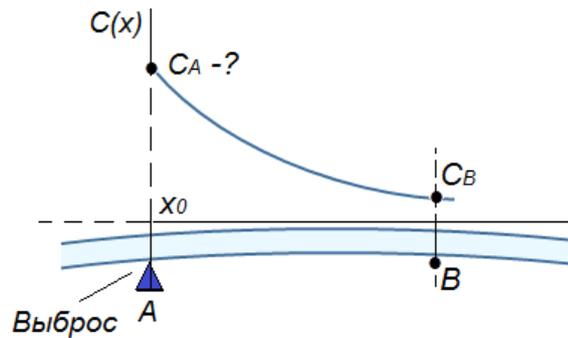


Рис.2 – Схема распределения концентраций от точечного источника загрязнений

2. В случае распределенного стока можно ввести в рассмотрение эффективную, усредненную по координате величину:

$$\bar{\varphi} = \frac{\int_0^L \varphi(\xi) d\xi}{L} \quad (6)$$

В этом случае, общее решение (3) будет иметь вид:

$$c(x) = V \exp(Vx/E) + \bar{\varphi} x + D \quad (7)$$

С учетом граничных условий:

$$c(x) = \frac{c_B - c_A - \bar{\varphi} L}{\exp(VL/E) - 1} [\exp(Vx/E) - 1] + \bar{\varphi} x + c_A \quad (8)$$

Зависимость (8) определяет стационарное распределение концентрации для установившегося течения. Характерный масштаб изменения концентрации $l = E/V$. Для оценки масштаба l можно использовать стандартную формулу [1]:

$$E = 3,134 E_0 V d^{5/6} \quad (\text{м}^2/\text{с}), \quad (9)$$

где $E_0 \approx 250$, d – средняя глубина реки. Тогда: $l = E/V = 3,134E_0 d^{5/6}$ (м). Разумные оценки дают $l \approx 2-5$ км. Данные оценки являются рекомендацией по выбору масштаба наблюдения.

Зависимость (8) удобно представить в обезразмеренном виде:

$$\theta(z) = \frac{1-K}{\exp\alpha-1} (\exp\alpha z - 1) + Kz \quad (10)$$

где $\theta(z) = [c(z) - c_A]/(c_B - c_A)$, $K = \bar{\varphi}L/(c_B - c_A)$, $\alpha = L/l$ – отношение длины участка к характерному масштабу изменения концентрации, $z = x/L$.

Таким образом, $\theta(0) = 0$; $\theta(1) = 1$.

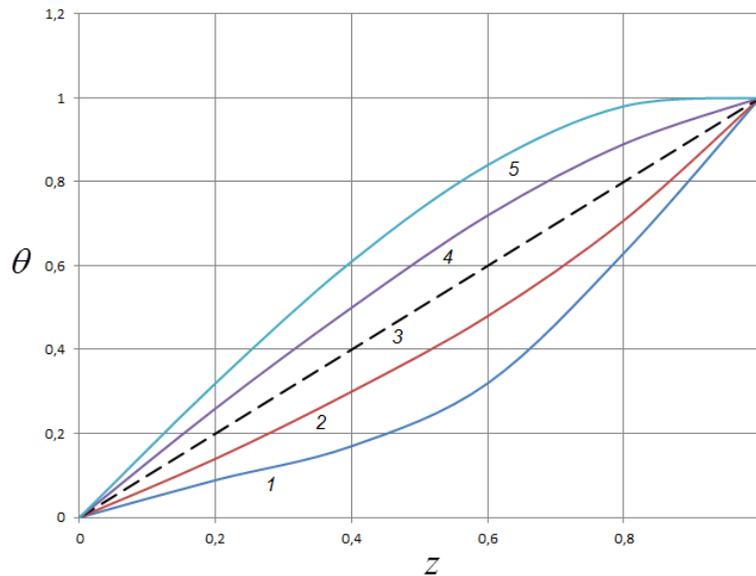


Рис.3 – Зависимость (10) при $\alpha = 2$, $K = 0,1$ – (1); $K = 0,5$ – (2); $K = 1$ – (3); $K = 1,5$ – (4); $K = 2$ – (5)

Как следует из зависимости (10) и рис.3, выпуклость кривой является положительной при $K < 1$ и отрицательной при $K > 1$. Крутизна роста зависимости определяется параметром α . Как показывает расчет, при $\alpha < 1$ зависимость близка к линейной и с хорошей точностью аппроксимируется зависимостью (11):

$$\theta(z) \approx \left(\frac{1-K}{\exp\alpha-1} \alpha + K \right) z \quad (11)$$

Определение неизвестного коэффициента K может быть сделано **методом обратных задач**.

Пусть на интервале $(0, L)$ действует непрерывно распределенный сток, не зависящий от времени, который характеризуется средней величиной $\bar{\varphi}$ (6), при отсутствии точечных источников (рис.4). Имеется набор экспериментальных точек (рис.4), дающих информацию о концентрации поллютанта в разных точках интервала $(0, L)$ и соответствующих объемных расходах (рис.4):

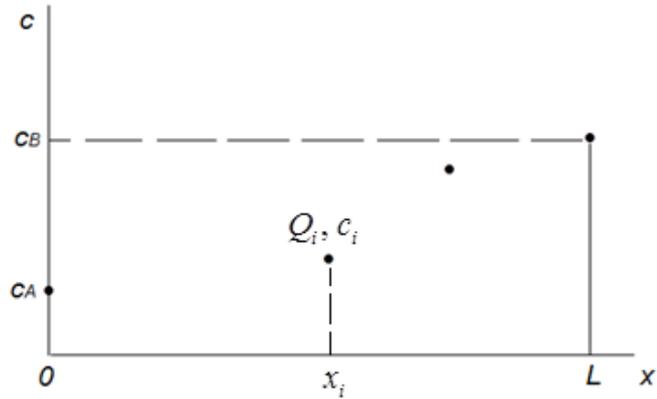


Рис. 4 – Схема отбора проб

Полученное распределение легко перенормировать, в долях размаха концентраций $c_B - c_A$ и перейти к безразмерному распределению $\theta(z)$ (рис.5). С использованием зависимости (10), при заданной величине параметра α , выбирается оптимальное значение коэффициента K по методу наименьших квадратов (с использованием методов нелинейной регрессии).

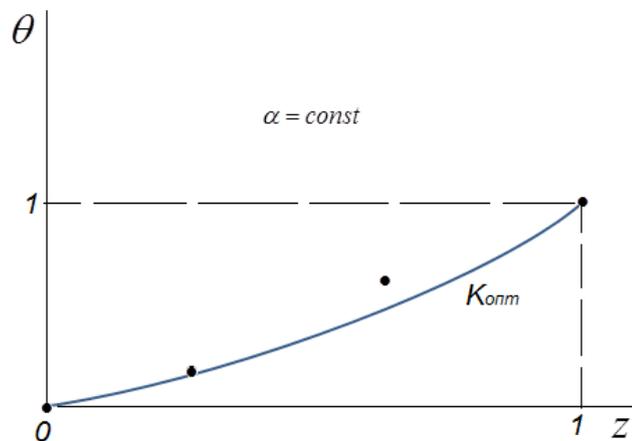


Рис. 5 – Распределение безразмерной концентрации поллютанта, рассчитанной методом наименьших квадратов

Расчет массового расхода поллютанта на интервале можно оценить по формуле:

$$K(c_B - c_A)Q = \dot{M} \quad (12)$$

где Q – эффективный объемный расход на интервале, который можно рассчитать по формуле:

$$Q = \sum_{i=1}^n Q_i x_i \quad (13)$$

где n – число разбиений.

Применение метода для нестационарных задач (например, в период снеготаяния), весьма затруднительно, однако возможно в квазистационарном приближении, когда диффузионные процессы происходят намного быстрее, чем процессы нарушения квазистационарного равновесия. Для грубых оценок можно сопоставить характерное время диффузии $t_d = L^2/E$ и характерное время добегания паводковой волны τ . Условием применения квазистационарного приближения является условие: $t_d \ll \tau$. Таким образом, процессы быстрой диффузии на интервале происходят в условиях медленного изменения граничных концентраций. В данном случае допустимо рассматривать набор ансамблей зависимостей, представленных на рис.3 для каждого момента времени наблюдения t_i и определять значения $K(t_i)$. Тогда, формула (12) может быть представлена в виде:

$$K(t_i)[c_B(t_i) - c_A(t_i)]Q(t_i) = \dot{M}(t_i), \quad (14)$$

что позволяет определить зависимость (10).

2. Построение метода расчета диффузного загрязнения, основанного на решении прямых и обратных задач моделирования качества воды

2.1. Прямая задача (решение прямой задачи является составной частью алгоритма для решения обратной задачи об определении интенсивности источника примеси)

Ниже рассмотрена задача определения качества воды для участка реки, а именно об определении концентраций биогенных и органических веществ, а также растворенного кислорода по начальным значениям концентраций и значениям концентраций на входном створе, на основе эвтрофикационного блока модели качества воды в реках WASP [2] и одномерных нестационарных уравнений конвективной диффузии [3], описывающих перенос примеси в реке.

Модель WASP – разработана под эгидой Американского агентства по охране окружающей среды. Она описывает процесс очищения воды от органического загрязнения, динамику концентрации фитопланктона и растворенного кислорода, круговорот биогенных веществ и продуктов жизнедеятельности живых организмов, а также процессы массообмена с донными отложениями.

Для расчета гидравлического режима в реке использовались одномерные нестационарные уравнения Сен-Венана [4].

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = q \quad (1)^2$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (Q u) + g \omega \left(\frac{\partial z}{\partial x} + \frac{Q |Q|}{K^2} \right) = 0, \quad (2)$$

здесь ω – площадь живого сечения русла, м²; Q – расход воды, м³/с; z – уровень свободной поверхности воды в Балтийской системе высот, м; q – путевой приток, м²/с; g – ускорение свободного падения, м/с²; t – время, с; x – координата вдоль оси русла, м; $u = Q/\omega$ – средняя по поперечному сечению скорость течения; $K = \omega C \sqrt{R_h}$ – модуль расхода; $C = C(R_h, n_r)$ – коэффициент Шези; n_r – коэффициент шероховатости, с/м^{1/3}; R_h – гидравлический радиус, м.

Тепловой режим реки

Для определения интенсивности трансформации примесей нужно знать температуру воды.

² Нумерация формул внутри раздела

Для расчета температурного режима в реке использовалось одномерное уравнение:

$$\frac{\partial(\omega T)}{\partial t} + \frac{\partial(QT)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(E \omega \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \frac{1}{c_p \rho} * B * \Psi_{w-a} + q * T_{pr}, \quad (3)$$

где T – температура воды; T_{pr} – температура притока, $c_p = 1$ – удельная теплоемкость воды, ккал/(кг·°C); $\rho = 1000$ – плотность воды, кг/м³; $E = E(n_r, u, R_h)$ – коэффициент продольной дисперсии, м²/с; Ψ_{w-a} – тепловой поток через свободную поверхность воды, ккал/(м²·с), который определяется по методике Харлемана [5].

Математической основой большинства моделей качества воды являются уравнения переноса примесей, к которым добавлены члены, описывающие изменение концентрации этих веществ за счет протекающих в воде биохимических реакций, взаимодействия со взвешенными наносами, донными отложениями и атмосферой, их поступление со сточными водами и притоками, убывание вследствие забора и оттока воды и так далее. Соответствующее одномерное уравнение для реки выглядит следующим образом (см., напр. [4, 6 – 8]):

$$\frac{\partial(\omega C_k)}{\partial t} + \frac{\partial(QC_k)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(E \omega \frac{\partial C_k}{\partial x} \right) = \omega F_k + q * C_{pr}; \quad (4)$$

где C_k – концентрации примеси «k», г/м³ (мг/л); $(C_{kpr})_j$ – концентрация примеси «k» в воде притоков, г/м³; F_k – член, описывающий скорость изменения концентрации примесей вследствие биохимических реакций, взаимодействия с донными отложениями и атмосферой и другими процессами, не связанными с переносом вдоль течения реки и поступлением с притоками и с берегов, г/(м³·сут.).

Модель WASP использует 8 переменных, которыми являются: концентрации растворенного кислорода, фитопланктон, минерального фосфора, минерального азота в аммонийной и нитратной формах, органического азота и фосфора, органического углерода, выражаемого через биохимическую потребность кислорода на его окисление (углеродное БПК).

Основными описываемыми процессами являются фотосинтез, эндогенное дыхание и отмирание фитопланктона, минерализация органического азота и фосфора, нитрафикация и денитрификация, окисление углеродного БПК, адсорбция, дисорбция, седиментация и диффузный обмен с поровыми водами донных отложений,

C_1 – концентрация аммонийного азота;

C_2 – концентрация нитратного азота;

C_3 – концентрация минерального фосфора;

C_4 – концентрация фитопланктона в углеродных единицах;

C_5 – концентрация органического углерода, выраженная через биохимическую потребность кислорода на разложение органического вещества (углеродное БПК);

C_6 – концентрация растворенного кислорода;

C_7 – концентрация органического азота;

C_8 – концентрация органического фосфора.

Для уравнений (1-4) устанавливаются начальные условия:

$$Q_{(t=0,x)} = Q_{0(x)}, \quad Z_{(t=0,x)} = Z_{0(x)},$$

$$T_{(t=0,x)} = T_{0(x)},$$

$$C_{k(t=0,x)} = C_{k0(x)}, \quad k = 1..8$$

и граничные условия:

$$Q_{(t,x=Xin)} = Q_{in(t)}, \quad Z_{(t,x=Xout)} = Z_{out(t)},$$

$$T_{(t,x=Xin)} = T_{in(t)},$$

$$C_{k(t,x=Xin)} = C_{k in(t)},$$

$$\partial T / \partial x |_{x=Xout} = 0,$$

$$\partial C_k / \partial x |_{x=Xout} = 0$$

Результаты апробации модели WASP на расчетах оценки качества воды на пилотном участке реки (участок р. Обь в районе г. Барнаула)

Пробы брались в 9 створах, в каждом створе в 3 точках: 1-левый берег, 2-середина реки, 3-правый берег (рис. 6).

Использовались данные по химическому составу в устье р. Барнаулки.

Расход р. Барнаулки принят равным 6 м³/с. Расход р. Обь принят равным 4485 м³/с.

Для описания геометрии русла р. Обь использовались архивные данные и данные натурных измерений 2018 г.

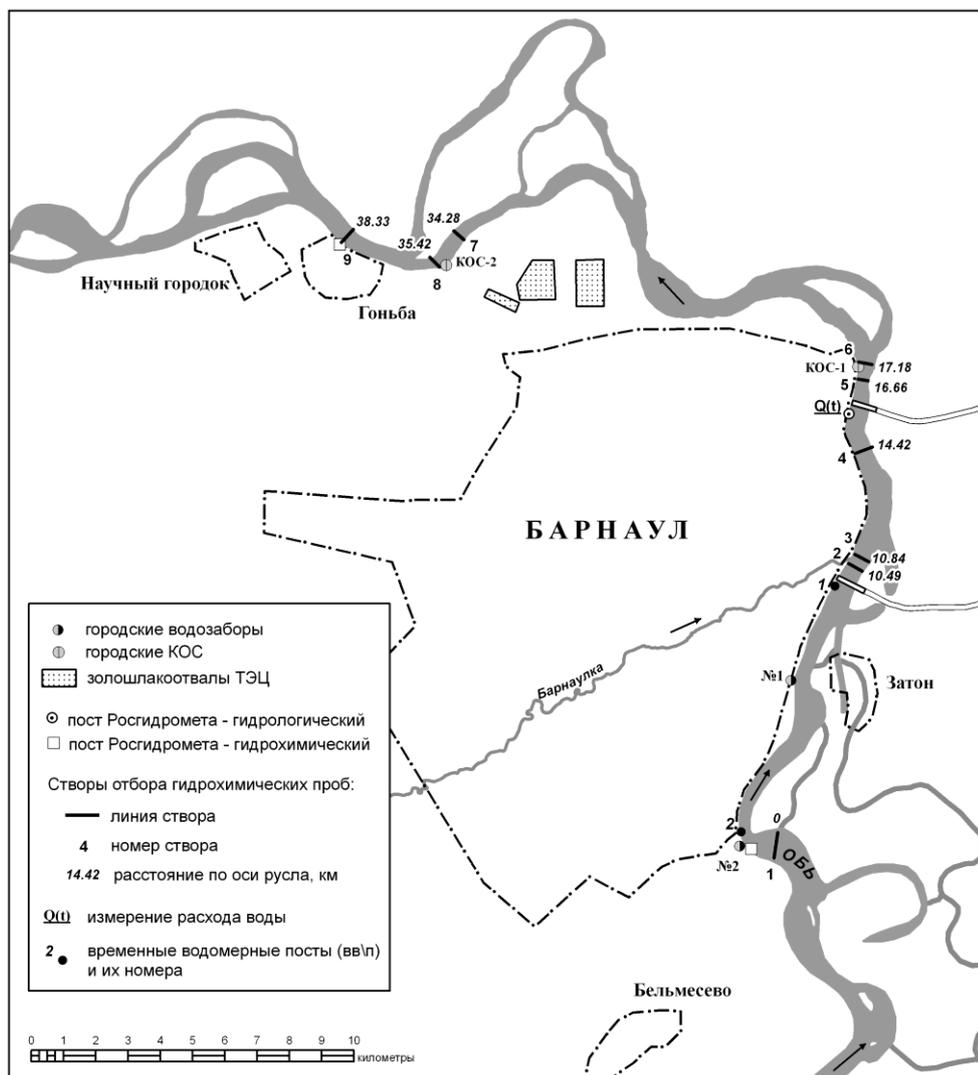


Рис. 6 – Схема отбора проб на участке исследования

Результаты расчета уровня воды на рассматриваемом участке реки представлены на рисунке 7.

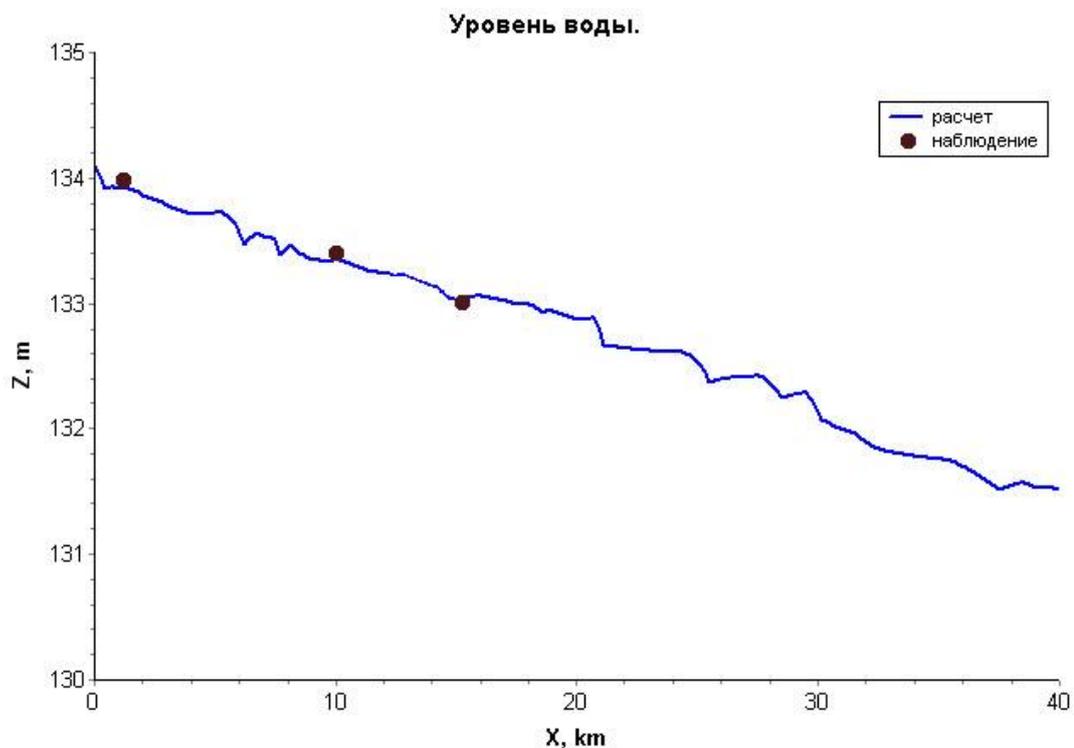
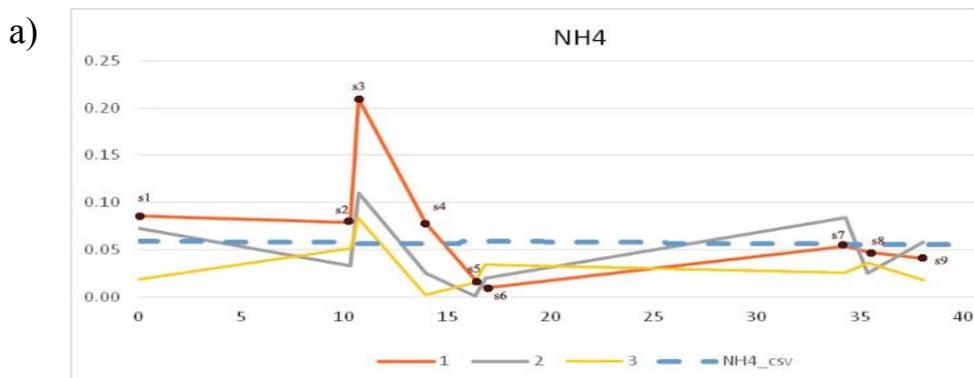


Рис. 7 – График уровней воды р. Обь в районе г. Барнаула

Рассчитанные изменения значений показателей качества вдоль реки

На рассматриваемом участке в 40 км рассчитанные изменения значений показателей качества воды незначительны, что иллюстрируют графики, представленные на рисунках 8а – 8д. Устье р. Барнаулки соответствует створу S3 (КОС-1 соответствует точкам S5-6, КОС-2 соответствует точкам S7-8).



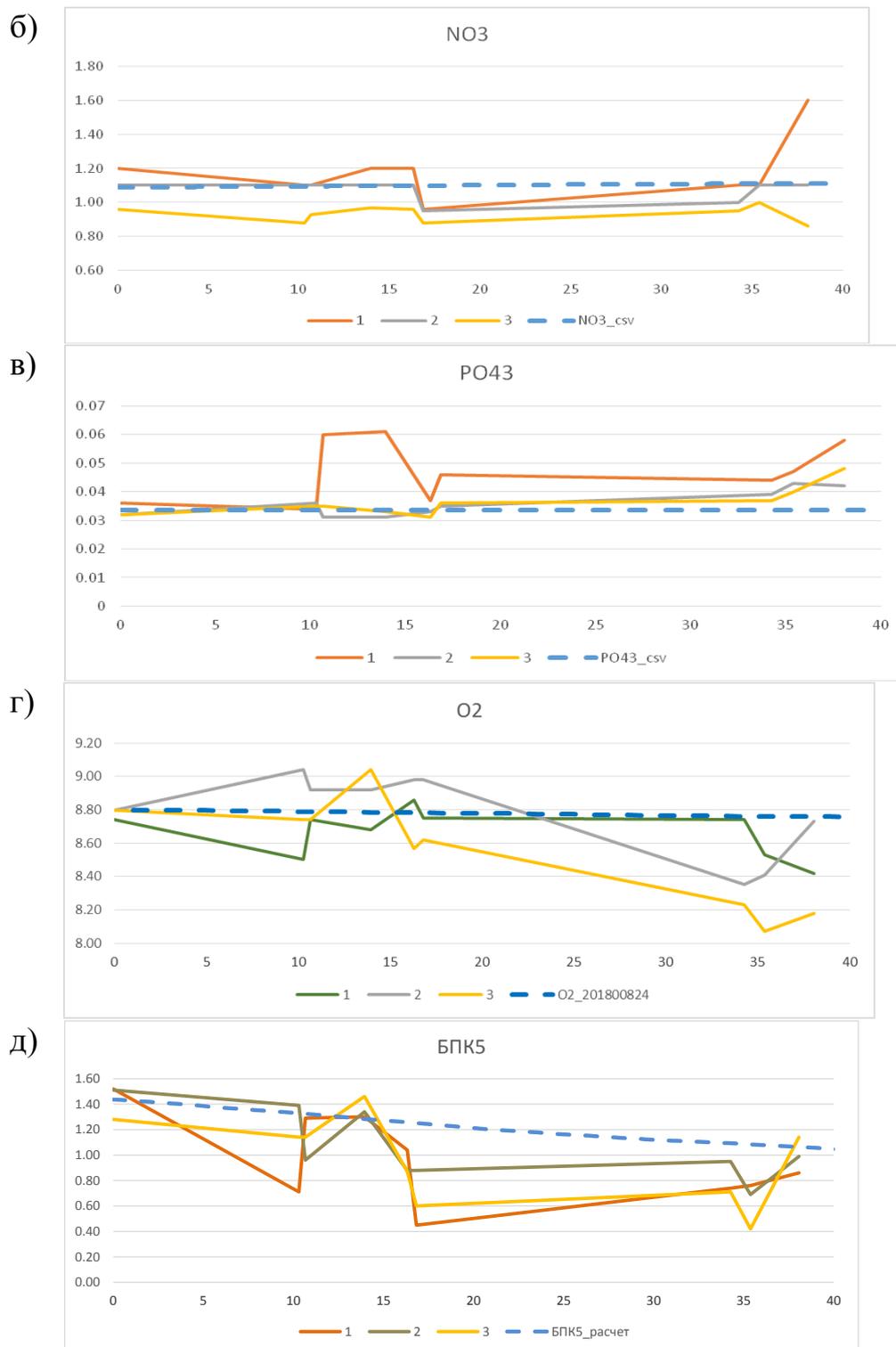
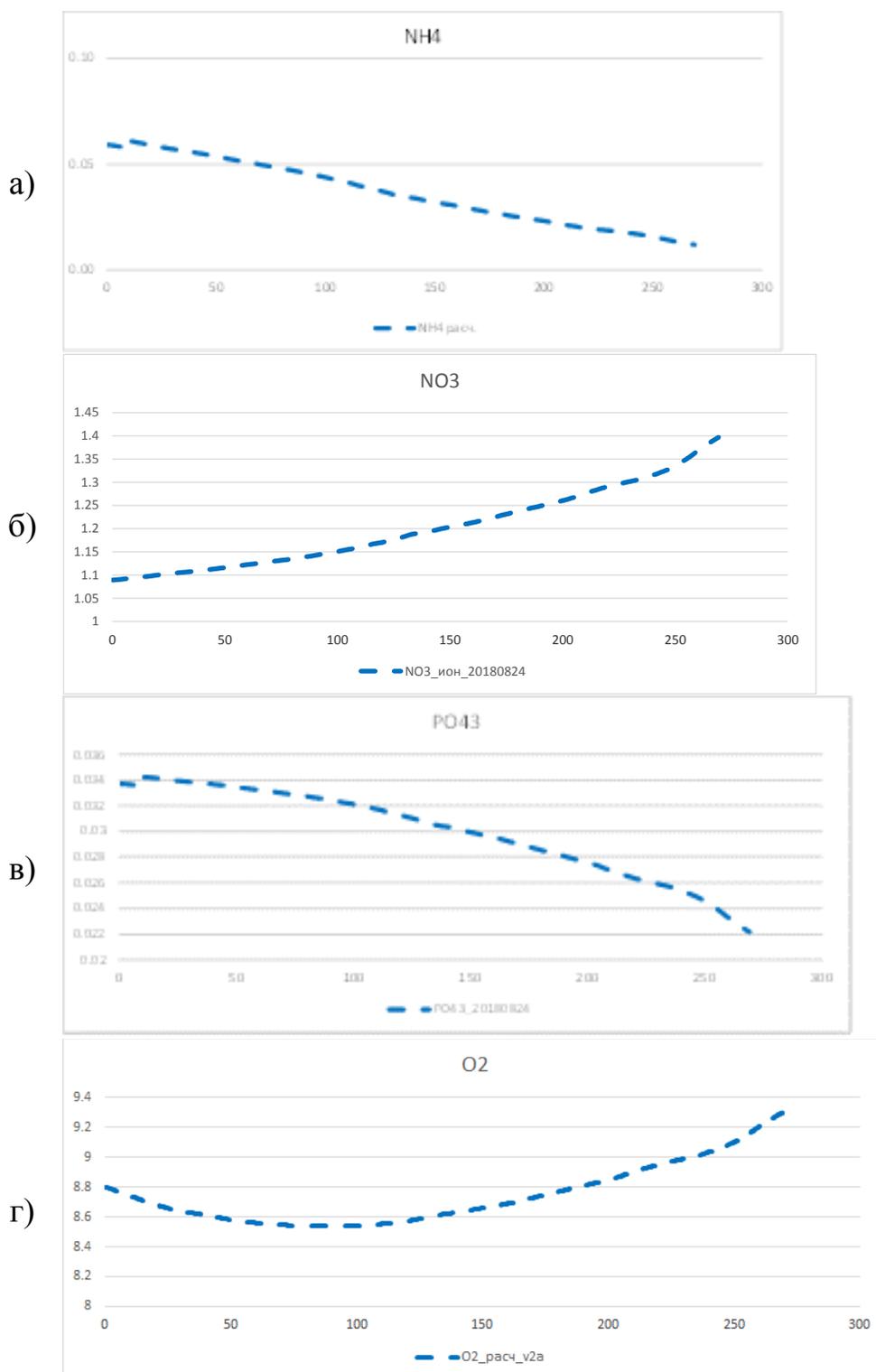


Рис. 8 – Графики изменения значений показателей качества вдоль реки (длина участка 40 км)

Для оценки масштабов значимых изменений проведены расчеты на 300-км участке р. Обь (рис. 9а–9д). Значимые изменения показателей без учета боковой приточности происходят:

- БПК₅ – на расстоянии 100 км;
- NH₄, NO₃, PO₃ – на расстоянии 200-300 км.

Распределенная боковая приточность в районе населенных пунктов будет являться определяющей в изменении значений показателей качества воды.



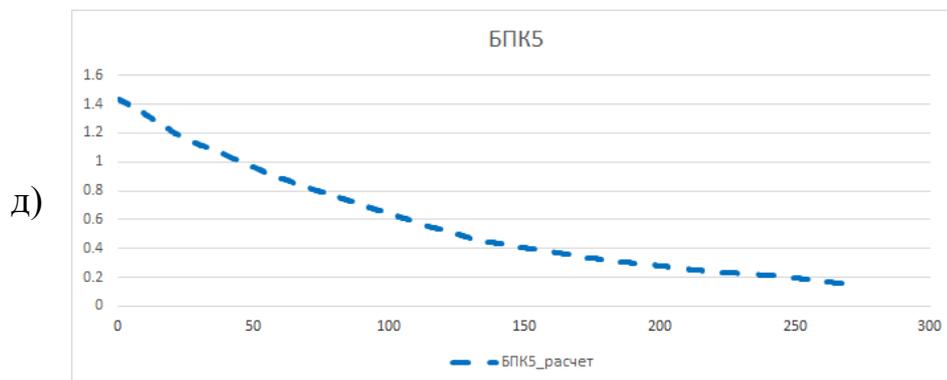
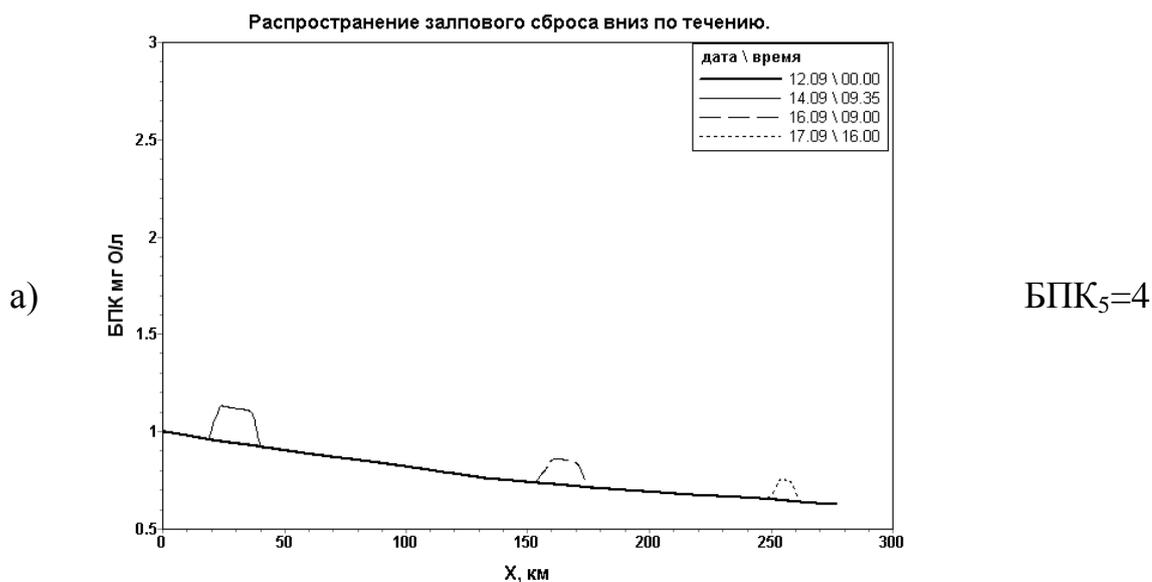


Рис. 9 – Графики изменения значений показателей качества вдоль реки (длина участка 300 км)

Проведены модельные расчеты БПК₅ в случае распространения залпового сброса из Барнаулки вниз по течению Оби. Расход р. Обь принят равным 1500 м³/с, значение БПК₅=1 в верхнем створе участка (X=0). Использовались 3 варианта сброса при расходе р. Барнаулки, равном 100 м³/с: 1) БПК₅=4; 2) БПК₅=16; 3) БПК₅=32 (рис.10а–10в).



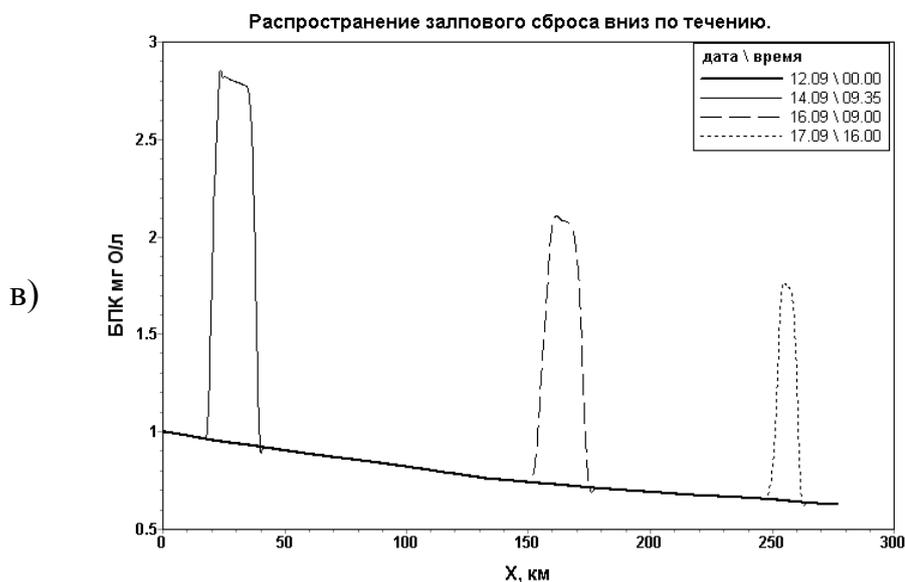
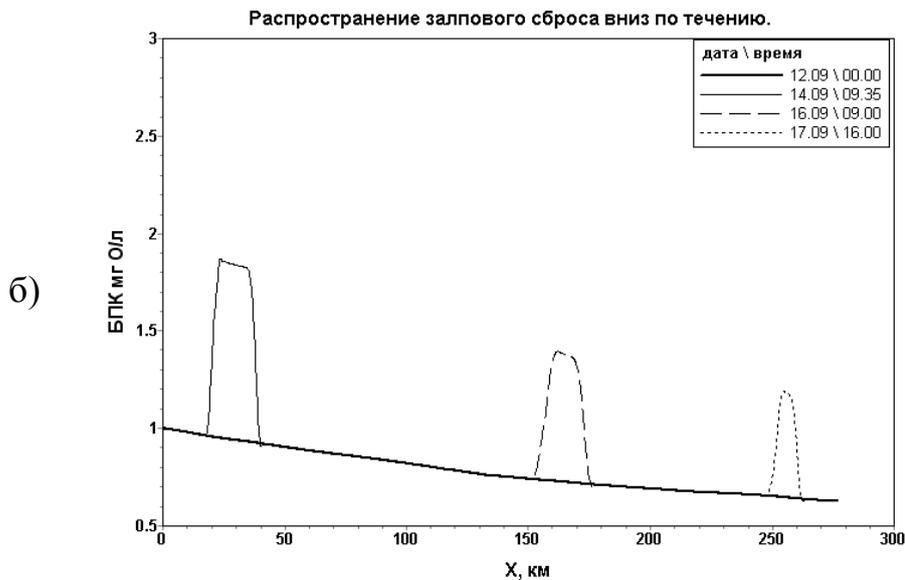


Рис. 10 – Графики распространения залпового сброса БПК₅ (длина участка 300 км)

2.2. Приближенная методика решения обратной задачи качества воды на примере модели WASP

Гидравлический режим речных участков опишем на основе распространенного гидрологического подхода с использованием одномерного уравнения неразрывности

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = q_{pr} \quad (5)^3$$

и кривой связи в виде

³ Нумерация формул внутри раздела

$$\omega = F(Q) \quad (6)$$

Здесь ω – площадь поперечного сечения потока; Q – расход воды; q_{pr} – удельный (приходящийся на единицу длины русла) боковой приток воды; x – продольная координата; t – время.

Продифференцируем (6) по времени):

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} = \frac{\partial F}{\partial Q} * \frac{\partial Q}{\partial t} = \frac{1}{v} \frac{\partial Q}{\partial t}$$

и, подставим в (5), получим

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + v * \frac{\partial Q}{\partial x} = q_{pr} * v \quad (7)$$

Уравнение (7) приближенно описывает распространение волны расходов.

Для расчета концентрации веществ уравнение переноса

$$\frac{\partial cW}{\partial t} + \frac{\partial(Qc)}{\partial x} = F_s * W + q_{pr} * C_{pr}$$

преобразуем в недивергентную форму записи:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + U \frac{\partial c}{\partial x} = F_s + q_{pr} * \frac{(C_{pr} - c)}{W} \quad (8)$$

В (8) член F_s включает в себя комбинации вида $K_{i(t,x)} * C_{i(t,x)}$ и $f_i(t, x)$

Расчеты показывают, что в модели WASP решение является медленно изменяющимся. Это обусловлено небольшими изменениями K_i и $f_i(t, x)$, поэтому в расчетах можно положить $f_k(t, x) \approx const, \alpha_k = const$.

Для получения приближенного решения уравнения (8) представляется возможным для ряда переменных (в частности БПК₅) принять $F_s = f(t, x) + \alpha * C, u = const$

Тогда имеем

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + u \frac{\partial(C_k)}{\partial x} = f_k(t, x) + \alpha_k * C_k + f_{kpr} \quad (9)$$

$$f_{kpr} = u * q_{kpr} * \frac{(C_{kpr} - C_k)}{Q} \quad (10)$$

Аналитическое решение уравнения переноса

$$\frac{\partial H}{\partial t} + u \frac{\partial(H)}{\partial x} = f(t, x) + \alpha * H, u = const \quad (11)$$

в области $0 \leq x \leq L, 0 \leq t \leq T_k$: получим методом характеристик.

Введем новые переменные ε, η

$$\varepsilon = x - ut, \quad \eta = x + ut$$

В новых переменных (11), после преобразований, запишется в виде [9]

$$\frac{\partial(H)}{\partial\eta} = \frac{f(\varepsilon, \eta)}{2u} + \frac{\alpha}{2u} * H = F(\varepsilon, \eta) + a * H \quad (11a)$$

Умножим (11a) на $\mu = e^{-\int a * d\eta}$

и преобразовав, получим характеристическое уравнение при

$$\varepsilon = \hat{\varepsilon} = \hat{x} - u\hat{t} = const$$

$$\frac{\partial(H\mu)}{\partial\eta} = F(\varepsilon, \eta) * \mu \quad (11б)$$

Уравнение (11б) интегрируется по η по характеристике $\varepsilon = \hat{\varepsilon}$ от η_a до η_b (рис. 11).

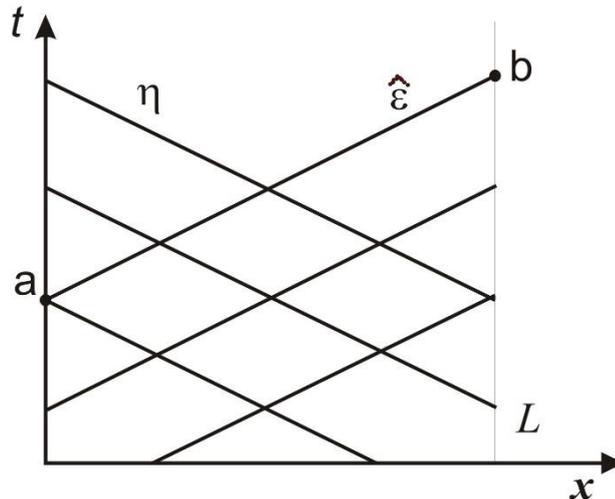


Рис. 11 – Характеристики уравнения переноса (11)

$$H\mu|_{\eta_b} - H\mu|_{\eta_a} = \int_{\eta_a}^{\eta_b} F(\hat{\varepsilon}, \eta) * \mu * d\eta \quad (12)$$

Для описывающего (приближенно) гидравлический режим уравнения

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + v * \frac{\partial Q}{\partial x} = q_{pr}(t, x) * v, \quad v = const$$

решение, полученное методом характеристик, имеет вид

$$Q|_{\eta_{Qb}} - Q|_{\eta_{Qa}} = \frac{1}{2} \int_{\eta_{Qa}}^{\eta_{Qb}} q_{pr}(\hat{\varepsilon}_Q, \eta_Q) * d\eta_Q \quad (13)$$

Будем использовать соотношения (определенные на характеристике

$\varepsilon = \hat{\varepsilon}$):

$$\eta = \hat{x} + u\hat{t}, \quad \eta - \hat{\varepsilon} = 2u\hat{t}, \quad \eta + \hat{\varepsilon} = \hat{x}, \quad d\eta = 2u * d\hat{t},$$

$$d\eta = 2 * d\hat{x}, \quad \eta_a = \hat{\varepsilon} + 2u\hat{t}_a, \quad \eta_b = \hat{\varepsilon} + 2u\hat{t}_b,$$

$$\eta - \hat{\varepsilon} = 2u\hat{t},$$

Отметим, что характеристики для уравнений (12) и(13) различны, поскольку скорости u и v различны.

В случае $a = const$, $\mu = e^{-a\eta}$

$$\mu_a = e^{-a\hat{\varepsilon}-a*2u*\hat{t}_a} = e^{-a\hat{\varepsilon}-\alpha*\hat{t}_a}, \mu_b = e^{-a\hat{\varepsilon}-\alpha*\hat{t}_b},$$

Из (12) получим:

$$He^{-a\hat{\varepsilon}-\alpha*\hat{t}_a} - He^{-a\hat{\varepsilon}-\alpha*\hat{t}_b} = \int_{\eta_a}^{\eta_b} F(\hat{\varepsilon}, \eta) * e^{-a\hat{\varepsilon}-\alpha*\hat{t}} * d\eta.$$

Сократим на $e^{-a\hat{\varepsilon}}$ и, заменив переменную интегрирования на t , получим:

$$H(\hat{t}_b, \hat{x}_b) * e^{-\alpha\hat{t}_b} - H(\hat{t}_a, \hat{x}_a) * e^{-\alpha\hat{t}_a} = \int_{\hat{t}_a}^{\hat{t}_b} f(\hat{t}, \hat{x}) * e^{-\alpha\hat{t}} d\hat{t} \text{ или:}$$

$$H(\hat{t}_b, \hat{x}_b) - H(\hat{t}_a, \hat{x}_a) * e^{\alpha(\hat{t}_b-\hat{t}_a)} = \int_{\hat{t}_a}^{\hat{t}_b} f(\hat{t}, \hat{x}) * e^{\alpha(\hat{t}_b-\hat{t})} d\hat{t} \quad (14)$$

при $\hat{x} = \hat{\varepsilon} + u\hat{t}$

Частные случаи расчета

$$1. f(\hat{t}, \hat{x}) = const, \alpha = const, \hat{t}_a = T - T_L, T_L = L/u, \hat{t}_b = T$$

Связь между решением на левой и правой границах при $T \geq T_L$

$$H(T, L) - H(T - T_L, 0) * e^{\alpha T_L} = -\frac{f}{\alpha} [1 - e^{\alpha T_L}] \quad (15)$$

2. Вариант 1 с точечным притоком $f_{pr}\delta(x - x_{pr})$ при $x = x_{pr}$:

$$f(\hat{t}, \hat{x}) = f_1 + f_{pr}\delta(x - x_{pr}), f_1 = const, \alpha = const, \hat{t}_a = T - T_L, T_L =$$

$$L/u, \hat{t}_b = T$$

$$T_{bc} = (L - x_{pr})/u.$$

Связь между решением на левой и правой границах при $T \geq T_L$:

$$H(T, L) - H(T - T_L, 0) * e^{\alpha T_L} = -\frac{f}{\alpha} [1 - e^{\alpha T_L}] + \frac{f_{pr}(T-T_{bc})}{u} e^{\alpha T_{bc}}$$

$$H(T, L) - H(T - T_L, 0) * e^{\alpha T_L} = -\frac{f}{\alpha} [1 - e^{\alpha T_L}] + f_{pr}(T - T_{bc})e^{\alpha T_{bc}} \quad (16)$$

3. Случай изменяющегося расхода воды $Q(t, x)$ и отсутствия химических реакций.

$$\frac{\partial H}{\partial t} + u \frac{\partial(H)}{\partial x} = f(t, x), \quad u = const \quad (17)$$

$$f = u * q_{pr} * \frac{(H_{pr}-H)}{Q}, \quad q_{pr} = const, H_{pr} = const.$$

Используя решение (13) для Q

$$Q(T, L) - Q(T - L/v, 0) = q_{pr} * L, \quad (18)$$

можно получить, что $\mu = Q = A * \eta + B(\eta_a)$ (линейная зависимость от η). В этом случае решение (17) имеет вид:

$$(H * Q)_{(T,L)} - (H * Q)_{(T-L/u,0)} = q_{pr} * H_{pr} * L \quad (19)$$

2.3. Примеры решения обратной задачи

1. Для пилотного участка реки Обь у г. Барнаула рассчитан модельный случай, когда приток рассматривается как точечный источник $f_{k\ pr} \delta(x - x_{pr})$ при $x = x_{pr}$.

Использовались натурные данные по геометрии, расход воды реке $Q=1500$. Выявленное при расчетах прямой задачи слабое изменение $f_k(t, x), \alpha_k$, в (9), позволяет использовать для нахождения решения, в частности для БПК₅, следующие величины $f_k(t, x) \approx 0.01/86400, \alpha_k = -0.1579/86400$.

1. Сначала решалась прямая задача для створа 1 и створа 2.
2. По решению в створе 2 решалась обратная задача в створе 1 (рис. 12) (вариант 2, формула 16).

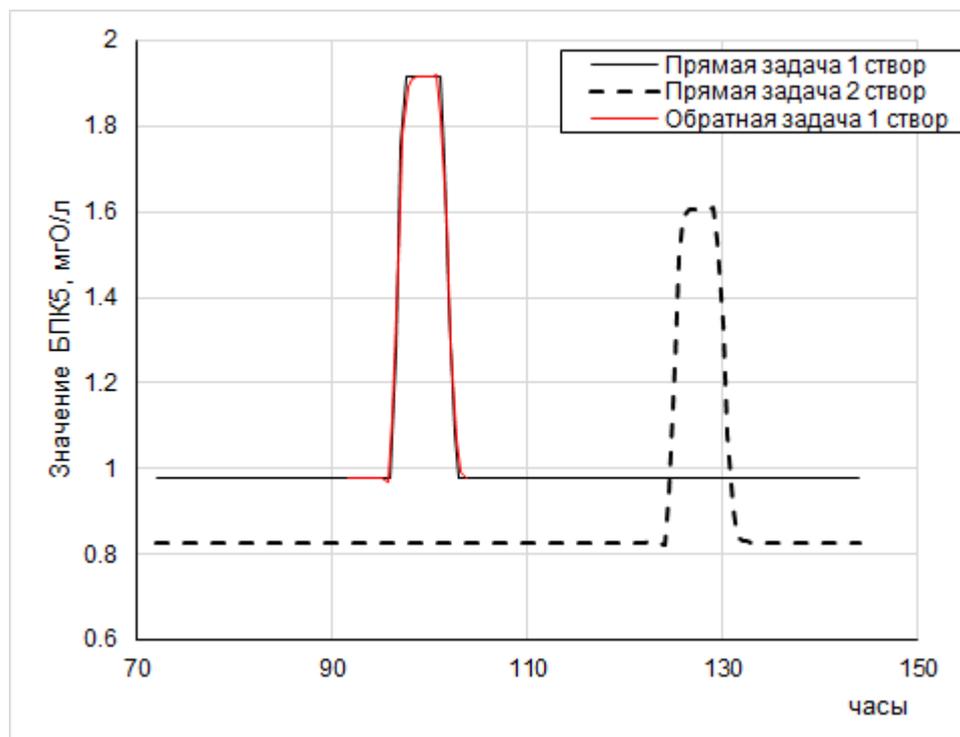


Рис. 12 – Пример решения обратной задачи для БПК₅ для р.Обь (время с условной точкой отсчета)

2. Рассчитана обратная задача определения стока загрязнений с территории г. Тверь для условий 1984 г. Схема речных участков и расчетных точек представлена на рис. 13. Использовались данные гидропостов по расходам воды: 0-Старица, р. Волга; 1- с. Новинки, р. Тьма; 4-с. Медное, р. Тверца. В точках 4, 3, 6 проводились измерения концентраций [10]. Для оценки времени добегания использовались доступные в Интернете данные о средних уклонах по р. Волга и р. Тверца (в рассматриваемой области) [11] и данные гидропостов по уровням воды: 0–Старица, р. Волга; 5–Калинин (Тверь), р. Волга [12].

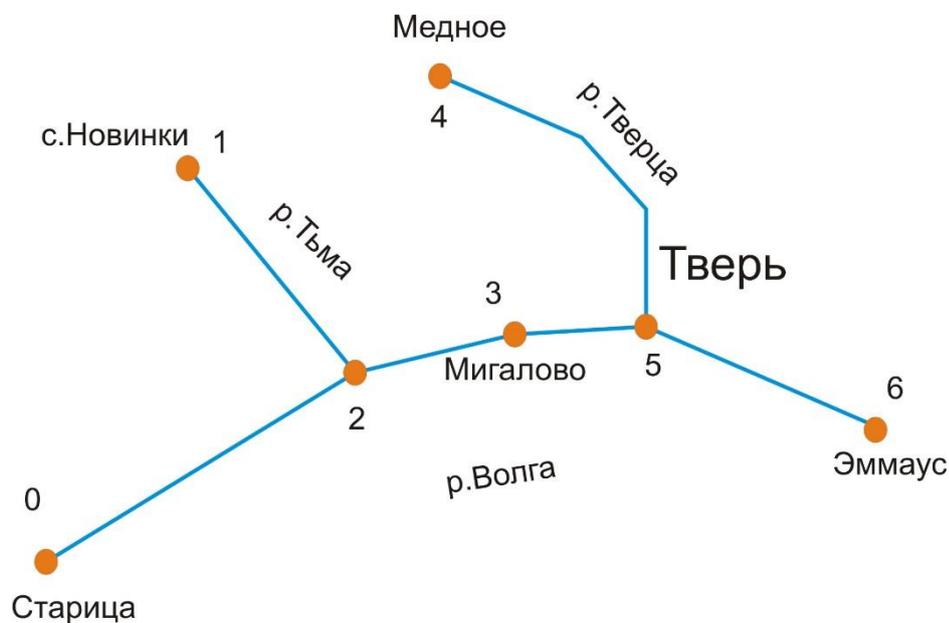


Рис. 13 – Схема речных участков и расчетных точек.

Общая схема решения задачи определения стока загрязнений $G_5(t)$ с территории г. Тверь заключалась в следующем:

1. По расходам воды в узлах 0, 1, 4 и модели боковой приточности [10] по уравнению (8) рассчитывались расходы в узлах 3, 6 и синхронизировались с данными по измеренным концентрациям (расчет $(QC)_3$, $(QC)_6$).

2. Используя условия сопряжения в узле 5

$$(QC)_{35} + (QC)_{45} + G_5(t) = (QC)_{56}$$

и уравнение (9) для участков (3-5), (4-5) и (5-6), можно получить значение $G_5(t)$ – сток загрязнений с территории г. Тверь.

Результаты расчета стока загрязнителей представлены на рис. 14а–14в.

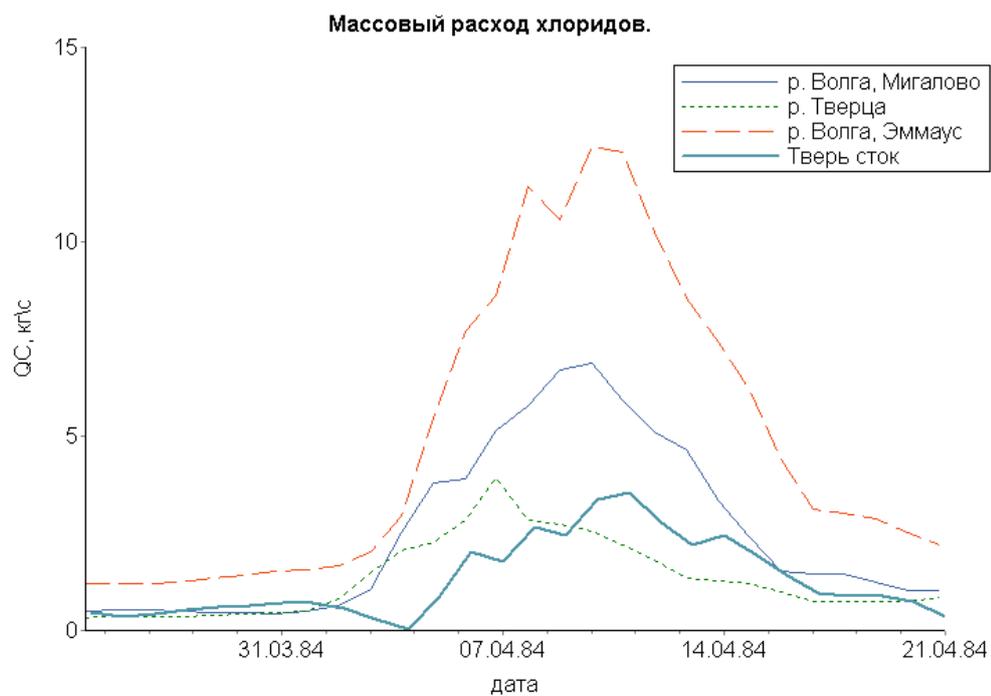


Рис. 14а – Массовый расход хлоридов в районе г. Тверь

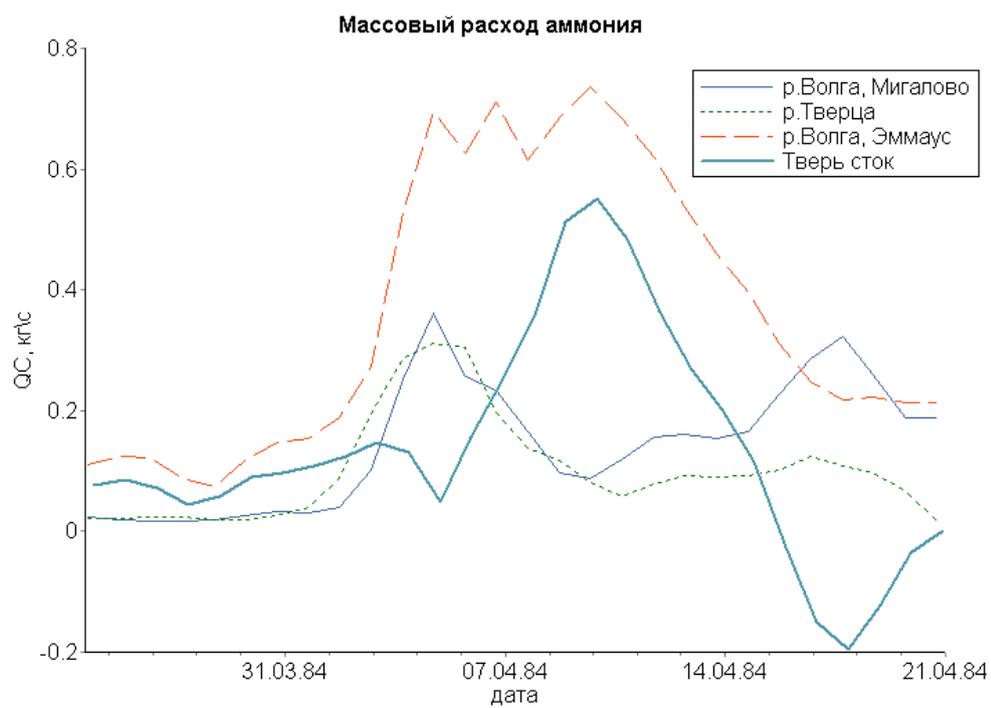


Рис. 14б – Массовый расход аммония в районе г. Тверь

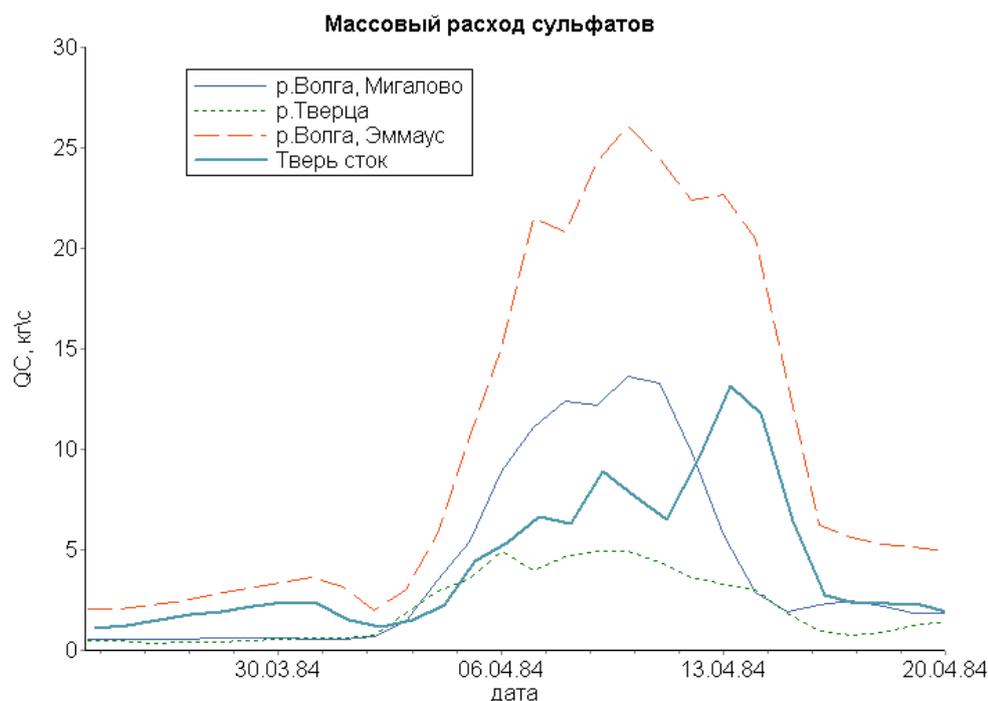


Рис. 14в – Массовый расход сульфатов в районе г. Тверь

3. Методы оценивания загрязнения поверхностных вод

неконсервативными примесями с использованием моделей качества воды

При анализе результатов экспериментальных исследований загрязнения реки химически активными примесями методами постановок прямых и обратных задач могут возникнуть значительные затруднения, связанные с неадекватностью используемых математических моделей имеющимся данным наблюдений. Эти трудности, как правило, усугубляются дискретным характером данных измерений и непрерывным описанием процессов переноса и трансформации примесей. При прямом моделировании переноса загрязняющих веществ в речном русле необходимо задание большого числа гидрологических параметров, характеристик распределения примесей в системах вода-взвесь и вода - донные отложения и т. д., что в конечном итоге значительно сужает область применимости этих моделей, несмотря на их, достаточно универсальный характер [13-15].

При использовании постановок обратных задач нежелательно слишком детальное описание процессов распространения примесей, поскольку это может привести к большим трудностям их численной реализации [16, 17].

Другой особенностью этих задач является повышенная чувствительность решений к погрешностям данных наблюдений, что приводит к необходимости анализа информативности имеющейся экспериментальной информации, планирования и оптимизации систем наблюдения.

Постановка задачи оценивания

Рассмотрим одномерную стационарную модель распространения химически активной примеси в реке. Пусть концентрация вещества, поступающего в реку со стоком, изменяется в результате действия следующих факторов: рассеивания, адвекции и распада. Процесс распространения опишем следующим дифференциальным уравнением второго порядка [18]

$$\frac{d}{dx} \left(Qc - EA \frac{dc}{dx} \right) + \lambda Ac - f(x) = 0 \quad (1)^4$$

где

x – продольная координата вдоль русла реки;

E – коэффициент продольной дисперсии;

λ – коэффициент химической трансформации;

Q – расход воды;

A – площадь поперечного сечения потока;

$f(x)$ – источник, характеризующий поступление примеси в реку с дополнительными условиями.

$$c|_{x=x_0} = 0, \quad c|_{x \rightarrow \infty} \rightarrow 0 \quad (2)$$

$$\text{Введем обозначение } \phi = Ac \quad (3)$$

Тогда, учитывая, что $Q = uA$, из (1) получим

$$E \frac{d^2 \phi}{dx^2} - \left(u + \frac{EA'}{A} \right) \frac{d\phi}{dx} - \left\{ \lambda + u' + E \left(\frac{A'}{A} \right)' \right\} \phi + f(x) = 0 \quad (4)$$

u – средняя скорость примеси.

В случае, когда $A(x)$ слабо зависит от x , ($A'(x) \approx 0$),

⁴ Нумерация формул внутри раздела

u и E – постоянные, из (4) вытекает следующая задача

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + a \frac{d\phi}{dx} + b\phi = g(x) \quad (5)$$

$$\phi|_{x=x_0} = 0, \quad \phi|_{x \rightarrow \infty} \rightarrow 0, \quad (6)$$

где $a = -\frac{u}{E}$, $b = -\frac{\lambda}{E}$, $g(x) = -\frac{f(x)}{E}$

При $a^2 > 4b$ решение задачи (5)–(6) можно представить в аналитическом виде [19].

$$\phi(x, \vec{\theta}) = \theta_1 \int_{x_0}^x g(\xi) e^{\theta_2(x-\xi)} d\xi, \quad (7)$$

где $\theta_1 = \frac{2}{E\sqrt{a^2-4b}}$, $\theta_2 = \frac{-a-\sqrt{a^2-4b}}{2}$.

Из анализа регрессионной зависимости (7) вытекает, что для оценивания вектора параметров $\vec{\theta}$ и $\phi(x, \vec{\theta})$ необходимо проведение измерений концентрации примеси не менее, чем на двух створах реки.

Параметры θ_1 и θ_2 предполагаются неизвестными. Их оценки можно получить, используя данные измерений концентрации примеси на различных створах, например, методом наименьших квадратов. Если использовать для оценивания два створа, то приходим к системе нелинейных алгебраических уравнений, решение которых можно представить в явном виде. Полученные оценки параметров позволяют на основе (7) восстанавливать непрерывную картину загрязнения воды.

Замечание 1. В случае, когда функция $f(x)$ описывает точечный источник примеси мощности M , т.е. $f(x) = M\delta(x)$, из (7) получим

$$\phi(x, \vec{\theta}) = \frac{M}{E} \theta_1 \cdot e^{\theta_2 x} \quad (8)$$

Учитывая соотношения (2), (8), приходим к следующей регрессионной зависимости для концентрации примеси

$$c(x, \vec{\theta}) = \frac{\theta'_1}{A(x)} e^{\theta_2 x} \quad (9)$$

$$\theta'_1 = \frac{M}{E} \theta_1$$

Замечание 2. Если $f(x)$ – функция, описывающая распределение источников диффузного загрязнения реки вдоль береговой линии, неизвестна, то в этом случае задача оценивания состоит в решении интегрального уравнения (7) с известной левой частью $\phi(x, \vec{\theta})$, определяемой по данным мониторинга.

Также следует отметить, что функцию $f(x)$ можно вычислять по известной левой части уравнения (1). Но в этом случае необходима информация о всех входящих в неё функциях

Численное восстановление концентраций органических веществ в р. Барнаулка (схема створов отбора проб приведена на рис.15) иллюстрирует рисунок 16.



Рис.15 – Схема створов отбора проб на р. Барнаулка

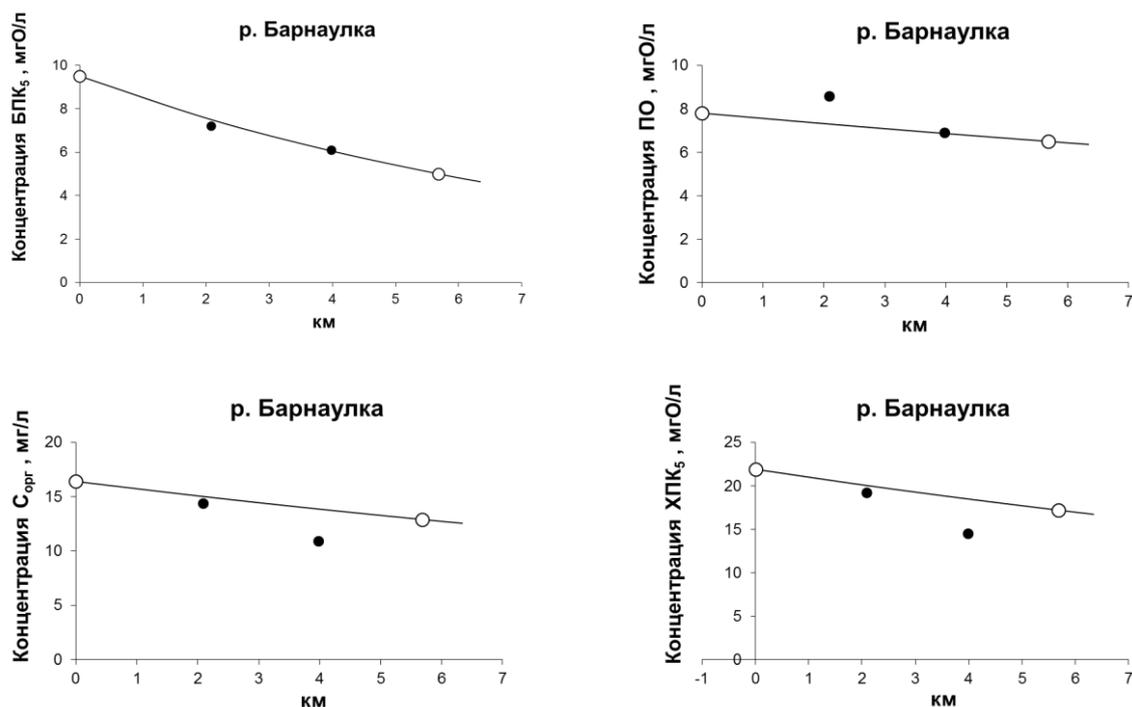


Рис. 16 – Численное восстановление BPK_5 , XPK_5 , $S_{орг}$, PO по измерениям на створах в нижнем течении р. Барнаулки

— — восстановленная по зависимости (8) концентрация,

○, ● - данные наблюдений в опорных и контрольных створах

Вывод. Модель оценивания (8) подтверждает вполне адекватное соответствие с данными наблюдений по BPK_5 . По остальным компонентам наблюдается в одной из контрольных точек измерений некоторые расхождения с результатами моделирования.

Численное восстановление концентраций органических веществ в р. Обь (схема створов отбора проб приведена на рис.6) иллюстрирует рисунок 17.

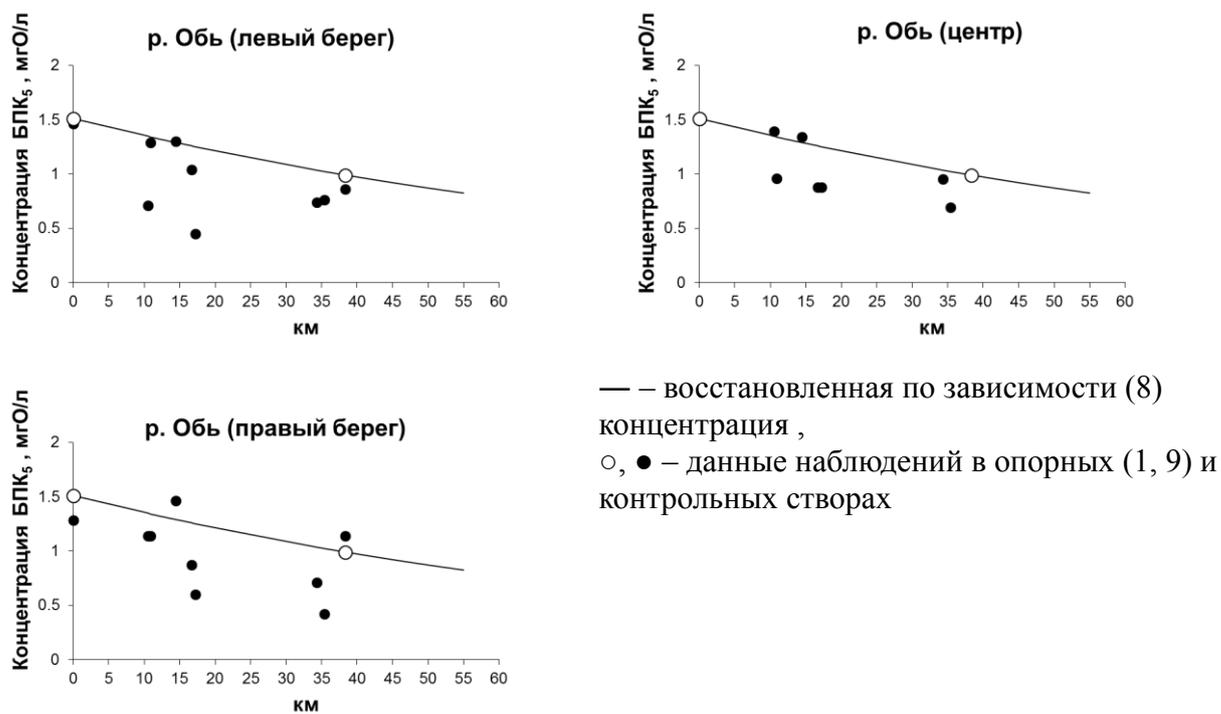


Рис. 17 – Численное восстановление БПК₅, по измерениям на створах р. Обь в районе г.Барнаула

Вывод. Анализ показывает близость численно восстановленной концентрации БПК₅ с результатами измерений на створах 2, 4, 7, что объясняется отсутствием воздействия значимых источников. С другой стороны, резкие понижения концентраций БПК₅ на створах 3, 5, 6, 8 происходят в зонах существенного воздействия р. Барнаулка, КОС 1, КОС 2 соответственно. Также следует отметить мажорантность численно восстановленной концентрации БПК₅ на всём протяжении пилотного участка. Результаты измерений по левому берегу р. Обь ведут согласованно с данными по центру реки. Сравнение же с данными правого берега показывает несколько рассогласованную картину, что объясняется непосредственным влиянием источников на правом берегу Оби.

4. Модель оценивания суммарного стока пассивной (консервативной) примеси от нестационарного источника

Рассмотрим одномерное уравнение переноса в реке пассивной примеси

$$\frac{\partial(\omega c)}{\partial t} + \frac{\partial(Qc)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(E \omega \frac{\partial c}{\partial x} \right) = \Phi(x, t), \quad (1)^5$$

где $c(x, t)$ – концентрация примеси (кг/м³), $Q(x, t)$ – объемный расход (м³/с), $\Phi(x, t)$ – массовая скорость стока (кг/м/с), E – коэффициент продольной дисперсии (м²/с).

Далее в (1) положим

$$\Phi(x, t) = A(t) \cdot \delta(x - x_0),$$

где $A(t)$ – функция, описывающая сток примеси по времени.

Для постоянных U , E , ω запишем уравнение (1) в массовых расходах. Учитывая, что

$$\omega U = Q, \quad \omega = \frac{Q}{U} \text{ и, полагая } G = Qc, \text{ перепишем (1) в виде (2)}$$

$$\frac{1}{U} \frac{\partial}{\partial t} (Qc) + \frac{\partial}{\partial x} (Qc) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{E}{U} \frac{\partial Qc}{\partial x} \right) = A(t) \cdot \delta(x - x_0) \quad (2)$$

и получим

$$\frac{\partial G}{\partial t} + U \frac{\partial G}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(E \frac{\partial G}{\partial x} \right) = U \cdot A(t) \cdot \delta(x - x_0). \quad (3)$$

Интегрируем уравнение (3) по t

$$\int_0^T \frac{\partial G}{\partial t} dt + U \frac{\partial \Phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(E \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) = U \int_0^T A(t) dt \cdot \delta(x - x_0)$$

где $\Phi(x) = \int_0^T G(t, x) dt$, T – достаточно большой интервал времени.

С учётом, что $G(T) = G(0)$ равны фоновому расходу, получим

$$U \frac{\partial \Phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(E \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) = U \cdot M \cdot \delta(x - x_0), \quad (4)$$

где $M = \int_0^T A(t) dt$ – суммарный вынос примеси.

⁵ Нумерация формул внутри раздела

Положим на входном створе, т. е. при $x = x_1$ ($x_1 < x_0 < x_2$, x_2 - выходной створ)

$$\Phi/x = x_1 = R_1, \quad \frac{d\Phi}{dx}/x = x_1 = 0. \quad (5)$$

Интегрируя уравнение (4) с условиями (5), приходим к соотношению

$$\begin{aligned} \Phi(x) &= M * \exp\left(\frac{U}{E}(x_0 - x)\right) + R_1, \quad x > x_0 \\ \Phi(x) &= R_1, \quad x < x_0 \end{aligned} \quad (6)$$

Из соотношения (6) вытекает оценка для суммарного стока примеси от нестационарного источника примеси

$$M = (R_2 - R_1) \cdot \exp\left(\frac{U}{E}(x - x_0)\right). \quad (7)$$

Соотношение (7) даёт возможность оценить суммарный сток примеси для произвольной функции $A(t)$, описывающей сток примеси от диффузного источника по времени в зависимости от основных гидродинамических параметров реки.

Оценка агрегированного гидрологического параметра $\frac{U}{E}$

Для оценивания величины $\frac{U}{E}$ используем данные наблюдений 1984, 1986, 1988 гг. на Верхней Волге в окрестности г. Твери и результаты исследований, приведённые в статье [10].

Исходя из соотношения (7), величина R_2 соответствует суммарному сносу загрязняющих примесей в рассматриваемые годы через выходной створ (пос. Эммаус). Для **хлоридов** он составил:

в 1984 г. – 11682 т; в 1986 г. – 22847 т; в 1988 г – 19634 т.

Величина R_1 соответствует суммарному сносу загрязняющих примесей в рассматриваемые годы через входные створы (пос. Мигалово и с. Медное). Для **хлоридов** он составил:

в 1984 г. – 9070 т; в 1986 г. – 18196 т; в 1988 г – 13420 т.

Согласно данным статьи [10] талый сток хлоридов с территории Твери составил:

в 1984 г. – 1296 т; в 1986 г. – 2184 т; в 1988 г – 4104 т.

С учётом этих данных и соотношения (7) получаем следующие оценки величины

$$\exp\left(\frac{U}{E}(x_2 - x_0)\right):$$

в 1984 г. – 2; в 1986 г. – 2.1; в 1988 г – 1.5.

Проведём аналогичные оценки для **сульфатов**.

Величина R_2 в рассматриваемые годы на выходном створе (пос. Эммаус) для **сульфатов** составила:

в 1984 г. – 24405 т; в 1986 г. – 43848 т; в 1988 г – 37760 т.

Величина R_1 суммарного выноса через входные створы (пос. Мигалово, с. Медное). для **сульфатов** составила:

в 1984 г. - 15045 т; в 1986 г. – 33856 т; в 1988 г – 23183 т.

Согласно данным статьи [10] талый сток сульфатов с территории Твери составил:

в 1984 г. – 5280; в 1986 г. – 12480; в 1988 г – 8160.

С учётом этих данных и соотношения (7) получаем следующие оценки величины

$$\exp\left(\frac{U}{E}(x_2 - x_0)\right):$$

в 1984 г. – 1.8; в 1986 г. – 0.8; в 1988 г – 1.8.

Полученные оценки величины $\exp\left(\frac{U}{E}(x_2 - x_0)\right)$ находятся, в основном, в пределах 1.5 – 2, что позволяет с соответствующей точностью выполнять оценки суммарного нестационарного сноса пассивных примесей с

территории г. Твери по величинам суммарных расходов на входном и выходном створах реки Волги. Следует отметить, что функциональное задание нестационарного сноса с территории города в предлагаемом подходе не является обязательным.

Заключение

Рассмотренные методы оценки диффузного стока с урбанизированных территорий путем решения обратных задач моделирования качества воды реализованы в виде математических моделей (1), математических и компьютерных моделей, апробированных на пилотных участках рек (в том числе на участке р. Волга в районе г. Тверь (2)–(4). Данные для калибровки и апробации разрабатываемых методов применительно к пилотным участкам рек Обь и Барнаулка получены из архивных и фондовых материалов и результатов экспедиционных наблюдений 2018 г. Данные по диффузному загрязнению рек Волга и Тверца предоставлены Н.В. Кирпичниковой, с.н.с., к.т.н., ИВП РАН.

Содержание работ 4-го этапа:

1. Разработка и апробация методов оценки диффузного стока с урбанизированных территорий (субрегиональный масштаб) путем решения обратных задач моделирования качества воды на пилотном участке реки (с использованием данных экспедиционных исследований)

Список использованных источников

1. Brown L. C., Barnwell T. O., Jr. The Enhanced Stream Water Quality Models QUAL2E and QUAL2E-UNCAS. Athens, Georgia, USA: U. S. Environmental Protection Agency, 1987.

2. Ambrose R. D., Jr., Wool T. A. Martin J. L., Connolly J. P., Schanz R. W. WASP5.X A Hydrodynamic and water quality model. – Athens: EPA, 1991. – 349 p.

3. Handbook of Hydrology. / ed. Maidment D. R. – New York: Mc GrowHill, 1992. – 518 p.
4. Стокер Дж. Дж. Волны на воде. Математическая теория и приложения: Пер. с англ. – М.: Изд-во иностр. лит., 1959. – 617 с.
5. Rayan R. J., Harleman D. R. F., Stolzenbach. Surface heat loss from cooling ponds // Water resources research. – 1974. – Vol. 10, № 5. – P. 930-938.
6. Воеводин А. Ф., Никифоровская В. С. Математическое моделирование характеристик качества воды в системах открытых русел // Сборник докладов симпозиума по вопросам математического моделирования качества воды водоемов (Новосибирск, 1976). – М.: Издательство Секретариата СЭВ, 1978. – С. 114-129.
7. Somlyódy L., Varis O. Water Quality Modeling of Rivers and Lakes. – Laxenburg: IIASA, WP-92-41. – 85 p.
8. Vasiliev O. F. Mathematical modeling of water quality in river channels and its systems. – Laxenburg: IIASA, WP-79-121.
9. Калиткин, Н.Н. Численные методы / Калиткин, Н.Н. -М.: Наука, 1978.
10. Гордин И.В., Винницкая И.П., Кирпичникова Н.В. Идентификация неконтролируемых залповых поступлений сточных вод в нестационарном потоке // Химия и технология воды, № 11, т. 12, 1990, с. 967-973.
11. Научно-прикладной справочник: Основные гидрологические характеристики рек бассейна Верхней Волги // Коллектив авторов; под редакцией Георгиевского В.Ю. [Электронный ресурс]. <http://www.hydrology.ru/sites/default/files/Books/verhvolga.pdf>. Ливны: 2015. 129 с.
12. ГИС портал Центра регистра и кадастра. Информационная система по водным ресурсам и водному хозяйству бассейнов рек России // <http://gis.vodinfo.ru/>
13. Борзилов В.А., Седунов Ю.С., Новицкий М.А. и др. Прогнозирование вторичного радиоактивного загрязнения рек

тридцатикилометровой зоны Чернобыльской АЭС // Метеорология и гидрология. – 1989. – № 2. - С. 5-13.

14. Дегерменджи А.Г., Косолапова Л.Г., Белолипецкий В.М. Математическое моделирование динамики радиоэкологических и гидрофизических характеристик речных систем (р. Енисей) // Сибирский экологический журнал. - 1996. - № 5. - С. 473-483.

15. Новицкий М.А. Модель долгосрочного переноса радионуклидов в речном русле // Метеорология и гидрология. - 1993. - № 1. - С. 80-83.

16. Закономерности распределения и миграции радионуклидов в долине р. Енисей /Под ред. В.Ф. Шабанова, А.Г. Дегерменджи. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, Филиал “Гео”, 2004. – Гл. 4. – С. 151-160.

17. Семчуков А.Н., Квон В.И. Определение интенсивности сброса загрязняющих веществ в реку по данным наблюдений в расположенном ниже створе // Метеорология и гидрология. – 1999. - № 7. – С. 84-91.

18. Джеймс, А. Математические методы контроля загрязнения воды. М.: Мир, 1981, 471 с.

19. Бутковский А.Г. Характеристики систем с распределёнными параметрами. М.: Наука, 1979. 224 с.