Liet. matem. rink., T. 42, spec. nr., 609–614

Matematinis modelis, įvertinantis išsklaidytąją taršą, ir jo skaitinė realizacija

Vytautas KLEIZA, Gaudenta SAKALAUSKIENĖ (MII)
el. paštas: vytautas.kleiza@ktl.mii.lt, gaudenta.sakalauskiene@nt.gamta.lt

1. Turbulentinės difuzijos modeliai

Taršos koncentracijos pasiskirstymas artimoje taškinio šaltinio aplinkoje visomis kryptimis aprašomas Gauso dėsniu, t.y. taršos koncentracija taške (x, y, z), jei šaltinis randasi koordinačių pradžioje yra proporcingas funkcijos

$$p_x = \frac{1}{\sigma_x\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right\}$$

sandaugai iš analogiškų funkcijų pagal y ir z. Čia σ_x^2 – taršos pasiskirstymo kryptimi x dispersija.

Taršos pernešimo aprašymas turbulentinės difuzijos lygtimi paprastai atliekamas fiksuotam erdvės taškui ir tokiu būdu surištas su Eilerio charakteristikomis. Statistiškai aprašant difuzijos procesus paprastai naudojama Lagranžo koordinačių sistema. Todėl norint nustatyti ryšį tarp šių dviejų būdų būtina ištirti ryšius tarp turbulentinės terpės Lagranžo ir Eilerio charakteristikų.

Aprašant difuzinius procesus turbulentinėje terpėje galima išskirti vidutines taršos koncentracijas ir pulsacinius nuokrypius nuo pastarųjų. Tai įgalina taikant įprastinius suvidurkinimo metodus pereiti nuo difuzijos lygties aprašančios momentines koncentracijas prie turbulentinės difuzijos lygties nustatančios vidurkines koncentracijas. Bendriausiu atveju vidurkinių koncentracijų $C(t, x, y, z)$ kitimą nusako lygtis

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial C}{\partial t} + U\frac{\partial C}{\partial x} + V\frac{\partial C}{\partial y} + W\frac{\partial C}{\partial z} \\
&\quad = \frac{\partial}{\partial x}\Big(E_x\frac{\partial C}{\partial x}\Big) + \frac{\partial}{\partial x}\Big(E_y\frac{\partial C}{\partial x}\Big) + \frac{\partial}{\partial x}\Big(E_z\frac{\partial C}{\partial x}\Big) - kC,
\end{aligned} \tag{1}$$

čia ašys x ir y yra horizontalioje plokštumoje, todėl

$$U\frac{\partial C}{\partial x} + V\frac{\partial C}{\partial y}$$

apsprendžia taršos advekciją, o narys

$$W\frac{\partial C}{\partial z}$$

pastarosios konvekciją, t – laikas U, V, W vidutinio taršos judėjimo greičio dedamosios kryptimis x, y, z, E_x, E_y, E_z – horizontalieji ir vertikalusis difuzijos koeficientai, k – koeficientas nusakantys koncentracijos kitimą, kurį sukelia virsmai ir išsklaidytoji tarša.

Sprendžiant konkrečius uždavinius lygties (1) pavidalas dažniausiai supaprastinamas. Stacionarių procesų nagrinėjimas įgalina priimti

$$\frac{\partial C}{\partial t} = 0,$$

t.y. nagrinėti lygtį

$$U\frac{\partial C}{\partial x} + V\frac{\partial C}{\partial y} + W\frac{\partial C}{\partial z}$$
$$= \frac{\partial}{\partial x}\left(E_x\frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left(E_y\frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left(E_z\frac{\partial C}{\partial x}\right) - kC$$

kartu su kraštinėmis sąlygomis.

2. Pirmoji idealizacija

2.1. *Taškinių šaltinių įvertinimas*

Vienamačiu stacionariuoju atveju lygtis

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U\frac{\partial C}{\partial x} = -kC$$

virsta lygtimi

$$U\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x} + kC = 0,$$

nusakančia nusistovėjusį režimą ir jos bendrasis stacionarusis sprendinys (su pradine sąlyga $C(x_0) = c_1$)

$$C(x) = c_1 \exp\{-kx/U\},$$

čia U – upės tekėjimo greitis, k – deoksidacijos koeficientas. Toks modelis įvertina x-advekciją ir vienos taršos komponentės virsmus. Per pradines sąlygas galima įvertinti ir intakų atnešamą taršą.

Tegul tiriamas upės ruožas yra segmentas $[x_0, x_{n+1}]$, o jo viduje yra intakai, kurių įtekėjimo koordinatės, debitai ir taršos koncentracijos – x_i, Q_i ir C_i, $i = \overline{1,n}$. Esant prielaidai, kad upės ir intako vanduo pilnai susimaišo intako įtekėjimo vietoje x_i, biocheminio deguonies suvartojimo koncentracija po susimaišymo

$$C_i^+(x_i) = \frac{C_i^-(x_i)Q_i^-(x_i) + Q_iC_i}{Q_i^-(x_i) + Q_i},$$

čia $Q_i^-(x_i)$ ir $C_i^-(x_i)$ – upės debitas ir taršos koncentracija prieš i–tąjį intaką, o $Q_i^+(x_i)$ ir $C_i^+(x_i)$ – po pastarojo. Išsprendus n pradinių uždavinių

$$\begin{cases} U\dfrac{\mathrm{d}C_i}{\mathrm{d}x} + kC_i = 0, & x \in (x_{i-1}, x_i), \\ C_i(x_{i-1}) = C_{i-1}^+(x_i), & i = 1, 2, \ldots, n+1. \end{cases}$$

Galutinai turime

$$C(x) = C_i(x), \quad x \in (x_{i-1}, x_i), \quad i = \overline{1, n+1}.$$

2.2. *Išsklaidytosios taršos įvertinimas*

Jei žinoma, išsklaidytosios taršos koncentraciją $\widetilde{C}(x)$, tai pirmojo modelio pagrindu taršos koncentracijai turime lygtį

$$\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x} + \left[\frac{k(x)}{U(x)} + \frac{Q'(x)}{Q(x)}\right]C = \frac{Q'(x)}{Q(x)}\widetilde{C}(x).$$

Upės atkarpoje, neturinčioje taškinių taršos šaltinių, šios lygties sprendinys tenkinantis pradinę sąlygą $C(x_0) = C_0$:

$$C(x) = C_0 \exp\{-N(x_0, x)\} + \exp\{-N(x_0, x)\} \int_{x_0}^{x} \widetilde{C}(y)\frac{Q'(y)}{Q(y)} \exp\{N(y, x)\}\, \mathrm{d}y,$$

čia

$$N(u, v) = \int_{u}^{v} \left[\frac{k(\tau)}{U(\tau)} + \frac{Q'(\tau)}{Q(\tau)}\right] \mathrm{d}\tau.$$

3. Antroji idealizacija

3.1. *Taškinių šaltinių įvertinimas*

Vienamačiu stacionariuoju atveju lygtis

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(E_x\frac{\partial C}{\partial x}\right) - kC$$

virsta lygtimi

$$E_x\frac{\mathrm{d}^2 C}{\mathrm{d}x^2} - U\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x} - kC = 0,$$

nusakančia nusistovėjusį režimą ir jos bendrasis stacionarusis sprendinys

$$C(x) = c_1 \exp\{\lambda_1 x\} + c_2 \exp\{\lambda_2 x\},$$

čia $\lambda_{1,2} = \frac{U}{2E}\left(1 \pm \sqrt{1 + kE/U^2}\right)$. Suprantama, kad atskiras sprendinys turi tenkinti kraštines sąlygas:

$$C(x_p) = C_p, \quad C(x_g) = C_g.$$

Toks modelis įvertina x-advekciją, difuziją x-kryptimi ir vienos taršos komponentės virsmus.

3.2. *Išsklaidytosios taršos įvertinimas*

Antrosios idealizacijos atveju taršos koncentraciją, esant išsklaidytajai taršai $\widetilde{C}(x)$, galima rasti sprendžiant atvirkštinį uždavinį nehomogeninei lygčiai

$$E_x \frac{\mathrm{d}^2 C}{\mathrm{d}x^2} - U \frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x} - kC = \widetilde{C}(x),$$

kurio tiksli formuluotė tokia. Tegul $\bar{C}(x, \widetilde{C})$ – visi kraštinių uždavinių

$$\begin{cases} E_x \dfrac{\mathrm{d}^2 C}{\mathrm{d}x^2} - U \dfrac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x} - kC = \widetilde{C}(x) \\ C(x_p) = C_p, \quad C(x_g) = C_g \end{cases}$$

sprendiniai, o $C_1, C_2, \ldots, C_n$ – papildomi taršos koncentracijos matavimai taškuose $x_i \in (x_p, x_g)$, tada galima pilnai definuoti vektorius $\mathbf{V}_M = (C_1, C_2, \ldots, C_n)$ ir vektorių klasę

$$\mathbf{V}_{\widetilde{C}}(\bar{C}(x_1, \widetilde{C}), \bar{C}(x_2, \widetilde{C}), \ldots, \bar{C}(x_n, \widetilde{C})).$$

Tegul $\widetilde{C}_0(x)$ tokia, kad

$$\min_{\widetilde{C}} ||\mathbf{V}_M - \mathbf{V}_{\widetilde{C}}|| = ||\mathbf{V}_M - \mathbf{V}_{\widetilde{C}_0}||,$$

tada taršos koncentracija, esant išsklaidytajai taršai, antrosios idealizacijos atveju yra kraštinio uždavinio

$$\begin{cases} E_x \dfrac{\mathrm{d}^2 C}{\mathrm{d}x^2} - U \dfrac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x} - kC = \widetilde{C}_0(x), \\ C(x_p) = C_p, C(x_g) = C_g \end{cases}$$

sprendinys.

4. Modelių adaptavimas

Lietuvoje adaptuojant matematinius modelius upės kokybės vertinimui, galima pasinaudoti esamais faktiniais matavimų duomenimis. Pagal Valstybinę aplinkos monitoringo programą kartą per mėnesį matuojama apie 40 įvairių upės vandens kokybę atspindinčių parametrų.

Adaptuojant vandens kokybės modelį, ne visi parametrai, įeinantys į modelį, yra matuojami. Parametrai, kurie yra nematuojami apibrėžiami empirinėmis formulėmis arba gauti adaptuojant modelį. Parametrai: debitas (Q), upės tekėjimo greitis (U), biocheminio deguonies suvartojimo koncentracija (C) yra matuojami kartą per mėnesį. Empirinėmis formulėmis yra apibrėžiami: difuzijos koeficientas (E_x), koeficientas nusakantys koncentracijos kitimą (k). Adaptuojant modelį išsklaidytoji tarša ($\tilde{C}$) yra apibrėžiama mažiausių kvadratų metodu.

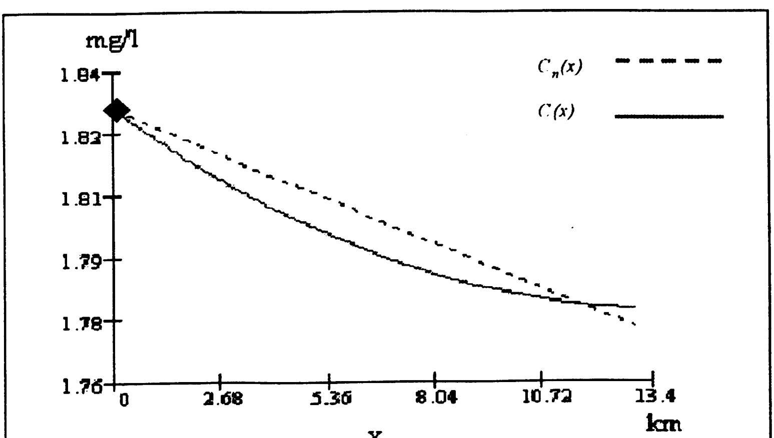
Modelių įvertinimui pasinaudota taip vadinamu *goodness of fit* metodu.

Remiantis Neries ir Žeimenos upės hidrologiniais bei hidrocheminiais valstybinio monitoringo duomenimis, įvertinta išsklaidytoji tarša pagal biocheminį deguonies suvartojimą (BDS_7) bei palyginta pirmojo ir antrojo modelio idealizacijos.

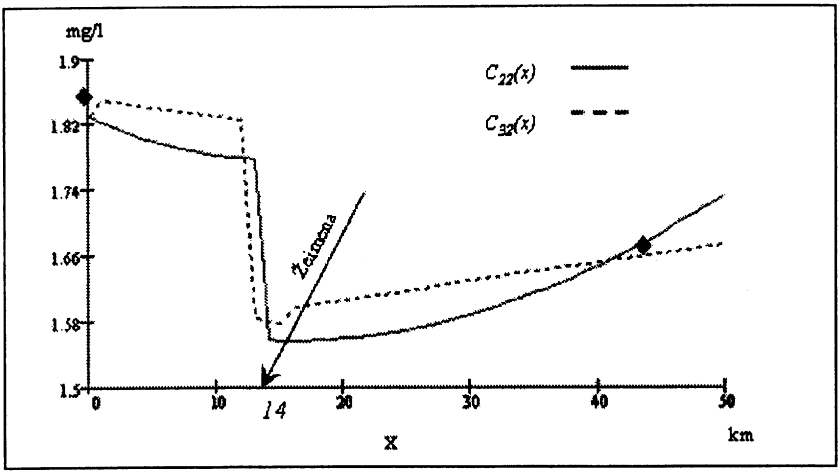
Kaip jau buvo minėta, abi idealizacijos adaptuotos Neries upei, t.y. 42 km atkarpai, kurioje yra 2 valstybinio monitoringo tyrimo vietos bei 14 km įteka Žeimenos upė, kurioje irgi yra valstybinio monitoringo tyrimo vieta netoli žiočių.

Taigi, adaptuodami pirmos idealizacijos modelius Neries upės atkarpai gauname, kad neįvertindami išsklaidytosios taršos biocheminiam deguonies suvartojimui determinacijos koeficientas yra 1,14 kartų mažesnis negu įvertinus išsklaidytąją taršą (1 pav.).

Kaip jau buvo minėta ir pavaizduota 1 pav., išsklaidytoji tarša turi reikšmingą įtaką upės vandens kokybei. Taigi, panagrinėsime pirmosios ir antrosios idealizacijos gautus skirtumus vertinant išsklaidytąją taršą. Nagrinėdami šias idealizacijas gauname, kad pirmos idealizacijos modelį pritaikę Neries upei išsklaidytoji tarša biocheminiam deguonies



1 pav. *Pirmoji idealizacija* (neįvertinus išsklaidytąją taršą – $C_n(x)$, įvertinus išsklaidytąją taršą – $C(x)$, faktinės monitoringo reikšmės – ♦.



2 pav. *Matematinių modelių idealizacijos, įvertinus išsklaidytąją taršą* (pirmoji idealizacija – $C_{22}(x)$, antroji idealizacija – $C_{32}(x)$, faktinės monitoringo reikšmės – ♦.

suvartojimui yra mažesnė negu išsklaidytoji tarša gauta pritaikius antrąją idealizaciją. Pagal pirmąją idealizaciją išsklaidytosios taršos kiekis yra 8 g·m^{-3}·d^{-1} (2 pav., $C_{22}(x)$) ir jis yra 1,125 kartus mažesnis negu išsklaidytosios taršos kiekis, gautas pagal antrąją idealizaciją, t.y. 9 g·m^{-3}·d^{-1} (2 pav., $C_{32}(x)$).

Pirmąją ir antrąją idealizaciją galima taikyti ne tik biocheminiam deguonies suvartojimui, bet ir kitiems cheminiams upės vandens kokybės parametrams, pvz.: nitritams, nitratams, amonio azotui, fosforui, fosfatams ir pan.

Literatūra

[1] S.C. Chapra, *Surface Water Quality Modelling*, WCB. P., Boston, 137–190 (1996).

[2] *USEPA*, Technical guidance manual for developing total maximum daily loads, Book 2: streams and rivers, Part 1: Biochemical oxygen demand, dissolved oxygen and nutrients/eutrophication, Washington, DC 20460 (1997).

Mathematical model of evaluatiing dissipated pollution and its numerical realization

V. Kleiza, G. Sakalauskienė

The paper considers pollution spreading models, based on turbulent diffusion equation, as well as their numerical realization using particular data of rivers in Lithuania.