НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ ІНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МАТЕМАТИЧНИХ МАШИН ТА СИСТЕМ

На правах рукопису

Бровченко Ігор Олександрович

УДК 532.5.517

ДИСЕРТАЦІЯ

ЧИСЕЛЬНІ ЛАГРАНЖЕВІ МЕТОДИ В ЗАДАЧАХ ПРИБЕРЕЖНОЇ ГІДРОДИНАМІКИ

Спеціальність: 01.02.05

"механіка рідини, газу та плазми"

На здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук

Науковий консультант:

Мадерич Володимир Станіславович, д.ф.-м.н., проф., зав. відділом морських та річкових систем ІПММС НАН України

Київ 2017

Зміст

BC'	${ m T}{ m y}\Pi$	8
ЕЙ.	ЛЕРОВІ ТА ЛАГРАНЖЕВІ ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ	19
1.1	Роль чисельного моделювання для розв'язання гідродинамічних	
	задач	19
1.2	Сіткові методи	20
1.3	Лагранжеві сіткові методи	21
1.4	Ейлерові сіткові методи	22
	1.4.1 Метод скінченних різниць	23
	1.4.2 Метод скінченних елементів	25
	1.4.3 Метод скінченних об'ємів	26
	1.4.4 Спектральний метод	27
1.5	Обмеження сіткових методів	28
1.6	Метод частинок в клітинках (PIC)	30
1.7	Безсіткові методи частинок	31
	1.7.1 Метод MLS	33
	1.7.2 Метод PIM	34
	1.7.3 Метод SPH	35
	1.7.4 Безсітковий лагранжевий метод для розв'язку рівнянь	
	мілкої води	39
1.8	Висновки до розділу	41
ЧИ	СЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПЕРЕНОСУ ТА ЛИФУЗІЇ	
МЕТОЛОМ ЧАСТИНОК 4'		
2.1	 Моделювання процесу дифузії методом випадкових блукань	43
	ВС ЕЙ 1.1 1.2 1.3 1.4 1.5 1.6 1.7 1.8 1.8 ЧИ МЕ 2.1	ВСТУП ЕЙЛЕРОВІ ТА ЛАГРАНЖЕВІ ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ 1.1 Роль чисельного моделювання для розв'язання гідродинамічних задач задач 1.2 Сіткові методи 1.3 Лагранжеві сіткові методи 1.4 Ейлерові сіткові методи 1.4.1 Метод скінченних різниць 1.4.2 Метод скінченних елементів 1.4.2 Метод скінченних об'ємів 1.4.3 Метод скінченних об'ємів 1.4.4 Спектральний метод 1.5 Обмеження сіткових методів 1.5 Обмеження сіткових методів 1.7 Безсіткові методи частинок 1.7.1 Метод MLS 1.7.2 Метод PIM 1.7.3 Метод SPH 1.7.4 Безсітковий лагранжевий метод для розв'язку рівнянь мілкої води 1.7.4 Безсітковий лагранжевий метод для розв'язку рівнянь мілкої води 1.8 Висновки до розділу ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПЕРЕНОСУ ТА ДИФУЗІЇ МЕТОДОМ ЧАСТИНОК 2.1 Моделовання процесу дифузії методом випадкових блукань

		2.1.1	Броунівський рух	43
		2.1.2	Рівняння Ланжевена	44
		2.1.3	Рівняння Фоккера-Планка	46
		2.1.4	Рівняння переносу та дифузії	47
		2.1.5	Методи випадкових блукань для моделювання процесу	
			дифузії	51
		2.1.6	Випадкові блукання з неперервним часом	52
		2.1.7	Одновимірний процес випадкових блукань	55
		2.1.8	Тривимірна схема випадкових блукань	58
		2.1.9	Схема випадкових блукань в горизонтально однорідно-	
			му потоці	63
		2.1.10	Порівняння чисельних схем випадкових блукань різної	
			точності	67
	2.2	Модел	иювання зміни стану речовини	70
	2.3	Оцінк	а точності стохастичних методів моделювання зміни ста-	
		ну реч	ЮВИНИ	74
	2.4	Висно	вки до розділу	77
3	ΓΙΖ	ӶРОДИ	ІНАМІЧНІ ПРОЦЕСИ В ПРИБЕРЕЖНИХ ЗОНА:	Х
	MC	PIB		78
	3.1	Особл	ивості гідродинамічних процесів в прибережних зонах мо-	
		рів .		78
	3.2	Модел	ць взаємодії хвиль та течій	80
		3.2.1	Рівняння моделі	81
		3.2.2	Перевірка моделі на аналітичному розв'язку та лабора-	
			торному експерименті	89
	3.3	Негідр	оостатична модель гідродинаміки прибережних зон морів.	96
		3.3.1	Рівняння моделі	99
		3.3.2	Узагальнена вертикальна система координат	103
		3.3.3	Чисельний алгоритм	106
	3.4	Модел	ь переносу багатофракційних намулів	112
	3.5	Висно	вки до розділу	119

4	ЛА	ЛАГРАНЖЕВА МОДЕЛЬ ПЕРЕНОСУ БАГАТОФРАКЦІЙ-			
	ΗИ	X HA	МУЛІВ	121	
	4.1	Вступ		. 121	
	4.2	Алгор	читм лагранжевої моделі	. 123	
		4.2.1	Загальний опис моделі	. 123	
		4.2.2	Перенос завислих намулів	. 125	
		4.2.3	Параметризація потоку намулів між водним шаром та		
			активним донним шаром в режимі незв'язних намулів .	. 127	
		4.2.4	Алгоритм змучування та осідання частинок	. 128	
		4.2.5	Перенос рухомих донних намулів	. 131	
		4.2.6	Обмін між дном та водним шаром	. 132	
		4.2.7	Параметризація потоку намулів між водним шаром та		
			активним донним шаром в режимі зв'язних намулів	. 134	
		4.2.8	Взаємодія полів течій та каламутних потоків	. 135	
	4.3	Прикл	пади розрахунків	. 136	
		4.3.1	Розвиток шару завислих намулів в горизонтально одно-		
			рідному потоці	. 136	
		4.3.2	Моделювання лабораторного експерименту про перенос		
			намулів у каналі із заглибленням	. 137	
		4.3.3	Дослідження стійкості дна та берегів під дією струмене-		
			вих течій	. 139	
		4.3.4	Моделювання розмиву дна струменем від судового рушія	a 145	
		4.3.5	Моделювання гравітаційних каламутних течій, що ви-		
			кликані конвекцією на шельфі	. 146	
		4.3.6	Моделювання розмиву шельфової зони накатом пооди-		
			нокої внутрішньої хвилі	. 148	
	4.4	Висно	вки до розділу	. 151	
5	ЛА	ГРАН	ЖЕВА МОДЕЛЬ РОЗПОВСЮДЖЕННЯ НАФТС)_	
	ΠP	одук	TIB	153	
	5.1	Вступ		. 153	
	5.2	Модел	ь поверхневої плівки нафти	. 155	
		5.2.1	Рівняння моделі динаміки плівки нафтопродуктів з ура-		
			хуванням впливу обертання Землі	. 155	

		5.2.2	Чисельний алгоритм розв'язку рівняння руху нафтової	
			плівки методом частинок	3
		5.2.3	Автомодельні розв'язки для гравітаційно-в'язкого і гравіта-	
			ційно-турбулентного режиму)
		5.2.4	Автомодельні розв'язки для гравітаційно-в'язко-обертального)
			режиму	3
		5.2.5	Чисельні розрахунки по розтіканню осесиметричної на-	
			фтової плями по поверхні спокійної води)
	5.3	Модел	нь диспергованих нафтових крапель	1
	5.4	Модел	пювання процесів вивітрювання	3
	5.5	Модел	иь нафтового бона	2
	5.6	Ураху	ування використання дисперсантів	5
	5.7	Засто	сування лагранжевої моделі переносу нафтопродуктів до	
		модел	ювання аварійного розливу з танкера "Hebei Spirit" 189)
	5.8	Висно	вки до розділу	3
6	ЛА	ГРАН	ЖЕВА МОДЕЛЬ РОЗПОВСЮДЖЕННЯ РАДІО-	
	AK	ТИВН	ИХ ЗАБРУДНЕНЬ 196	3
	6.1	Вступ		3
	6.2	Рівня	ння моделі переносу радіонуклідів у воді та міграції у дон-	
		них ба	агатофракційних намулах	7
	6.3	Модел	іювання лабораторного експерименту по міграції ¹³⁴ Cs в	
		донни	х намулах	1
	6.4	Перер	озподіл концентрації радіоактивності між поровою водою	
		та нам	лулами в ізольованому шарі дна)
	6.5	Спрот	цення моделі для одношарового представлення дна \ldots . 21()
	6.6	Спроі	цення для багатошарової моделі міграції забруднення в	
		намул	ax	1
	6.7	Чисел	ьні експерименти розповсюдження радіонуклідів в каналі	
		із заг.	ибленням	3
		6.7.1	Довготривале забруднення дна за рахунок дифузії роз-	
			чиненого радіонукліду	3
		6.7.2	Забруднення дна в каналі з урахуванням переносу намулів222	2
	6.8	Лагра	нжевий алгоритм моделі дисперсії радіонуклідів	3

6.8.16.8.26.8.3 Оцінка точності розв'язання рівняння розпаду стохасти-6.8.4Адсорбція/десорбція при однофракційних намулах.... 243 6.8.5Ймовірність фазового переходу частинки як розв'язок 6.8.6 Оцінка точності розв'язання рівнянь адсорбції-десорбції 6.8.7Моделювання системи рівнянь розпаду, коли кількість 6.8.8 Адсорбція/десорбція при багатофракційних намулах . . 254 6.8.9 6.8.10 Дифузія між поровою водою та водним стовпом з ура-6.8.11 Адсорбція/десорбція в багатофракційних донних намулах 262 6.8.12 Обмін між швидкою і повільною реверсивними фазами . 263 6.8.14 Загальний підхід до розрахунку ймовірностей переходу 6.8.15 Загальний опис лагранжевого алгоритму для моделювання переносу, дифузії та зміни станів радіонуклідів у 6.9 Порівняння лагранжевої та ейлерової моделі розповсюдження радіонуклідів на прикладі потоку в каналі 6.10 Моделювання гіпотетичного аварійного викиду ^{137}Cs з AEC

7	′ МОДЕЛЮВАННЯ РОЗПОВСЮДЖЕННЯ ¹³⁷ СS В ОКЕА-		
	\mathbf{HI}	ВНАСЛІДОК АВАРІЇ НА АЕС ФУКУСІМА 295	
	7.1	Вхідні дані для моделювання розповсюдження радіонуклідів пі-	
		сля аварії на АЕС Фукусіма-1	
		7.1.1 Джерела забруднення	
		7.1.2 Граничні умови	
		7.1.3 Розподіл параметрів донних намулів	
	7.2	Розповсюдження ¹³⁷ Cs в океані	
	7.3	Забруднення радіонуклідами донних відкладень	
	7.4	Висновки до розділу	
ът	TOT		
ы		10ВКИ 317	
A	HO	ТАЦІЯ 323	
0	ПС		
0	дс	24 327 327	
	8.1	Алгоритм швидкого сортування частинок	
	8.2	Алгоритм швидкого пошуку частинок в комірках	
	8.3	Алгоритм взаємодії нафтових крапель з берегом та бонами 332	
Бi	бліс	ографія 336	

Вступ

Суть лагранжевих методів для опису суцільного середовища (рідини або газу) полягає у використанні лагранжевих змінних, що рухаються разом з потоком. При чисельному моделюванні суцільного середовища використовується велика кількість рідких частинок, що рухаються разом з потоком та кожна з яких представляє собою певну кількість речовини та має певні властивості (наприклад швидкість, тиск, густина, температура). На відміну від ейлерового підходу, в якому всі характеристики суцільного середовища розглядаються в деякій нерухомій точці простору, в лагранжевому підході всі характеристики розглядаються в рухомій точці середовища. Хоча метод для рідин та газів Лагранжа є більш складним для математичної та чисельної реалізації, але, водночас, він є більш природнім, бо в дійсності будь-яке середовище на молекулярному рівні складається с елементарних частинок, які рухаються та взаємодіють між собою. Лагранжеві чисельні методи для розрахунків переносу домішок та забруднень мають ряд значних переваг у порівнянні з ейлеровими: вони не потребують наперед визначеної незмінної області моделювання (частинки можуть рухатися як завгодно далеко в залежності від сил, що на неї діють); вони дозволяють відслідковувати траєкторію руху кожної частинки середовища; вони дозволяють розглядати мілкомасштабні процеси у великих розрахункових областях; вони вільні від числової дифузії та є консервативними за своєю суттю. Моделювання методами частинок стає все більш популярним з розвитком розрахункових можливостей і паралельних технологій [48], [23]. Важливим моментом як в теоретичних, так і експериментальних дослідженнях є вміння простежувати рух великого числа частинок в полях, створюваних ними самими і під дією зовнішніх сил. В даний час все більш привабливими стають гібридні лагранжево-ейлерові моделі (частинки та сіткові моделі), особливо в гідродинамічних задачах, в яких необхідно розглядати різномасштабні процеси. Термін "моделі частинок" є загальним для класу обчислювальних моделей лагранжевої гідродинаміки, в яких дискретний опис фізичних явищ включає використання взаємодіючих частинок. У більшості застосувань цим частинкам можна прямо зіставити фізичні об'єкти. Кожна частинка може мати набір атрибутів, таких як маса, заряд, положення, швидкість. Стан фізичної системи визначається атрибутами ансамблю частинок, а еволюція системи визначається законами взаємодії цих частинок. Особливість, яка робить моделі частинок привабливими з обчислювальної точки зору, полягає в тому, що ряд атрибутів частинки зберігається, і тому їх не треба змінювати протягом всього часу обчислень.

Актуальність роботи полягає в низці переваг лагранжевих методів та перспектив їх застосування до нерозв'язаних задач прибережної гідромеханіки. Метою роботи є розробка методологічних та технологічних засад для моделювання лагранжевими методами гідродинамічних полів та полів розповсюдження забруднень в задачах, що виникають в прибережній гідродинаміці. Представлена мета передбачає такі основні **задачі**, що підлягають вирішенню в рамках дисертаційної роботи:

- Розробка ефективних лагранжевих методів моделювання переносу забруднень у різних станах та багатофракційних намулів
- Розробка ефективних гідродинамічних моделей прибережних процесів

• Застосування розроблених методів до задач прибережної гідродинаміки

Об'ектом наукового дослідження є розповсюдження забруднень та намулів в прибережних зонах морів.

Предметом наукового дослідження є методи моделювання розповсюдження забруднень та намулів в прибережних зонах морів та гідродинамічні процеси, що на нього впливають.

Наукова новизна одержаних результатів полягає в:

- Розробці узагальненого алгоритму побудови чисельних схем з незміщеними моментами розподілу для розв'язання рівняння переносу та дифузії методом частинок в неоднорідних полях течій та коефіцієнту дифузії. Отриманні нових аналітичних розв'язків для параметрів розподілу частинок для характерних випадків одновимірного руху.
- Застосуванні стохастичних методів до моделювання ймовірності зміни стану речовини. Розробці методу оцінки точності при моделюванні таких процесів методами частинок. Одержанні нових аналітичних розв'язків для процесів розпаду та адсорбції-десорбції радіонуклідів на багатофракційних намулах. Розробці нового алгоритму апроксимації граничних умов у методах частинок через розрахунок ймовірності зміни стану частинки в околі границі
- Розробці та вдосконаленні нових гідродинамічних моделей прибережних процесів, що дозволяють описувати взаємодію хвиль та течій, негідростатичні гравітаційні та струменеві течії для розрахунку переносу намулів та забруднень.
- Розробці нової лагранжевої моделі переносу багатофракційних намулів, що описує суміш зв'язних та незв'язних намулів, міграцію намулів у дон-

них шарах та зміну гранулометричного складу та пористості в донних відкладеннях.

- Розробці нової лагранжевої моделі розповсюдження нафтопродуктів в прибережних зонах, що враховує вплив обертання Землі за рахунок утворення пограничного шару Екмана під поверхневою плівкою нафти, дозволяє моделювати взаємодію з нафтовими бонами та вплив дисперсантів на розповсюдження нафтового забруднення; отриманні нових автомодельних розв'язків для розтікання одновимірних та осесиметричних плям у гравітаційно-в'язкому та гравітаційно-в'язко-обертальному режимах; застосуванні розробленої моделі до моделювання наслідків нафтових аварій.
- Розробці нової лагранжевої моделі розповсюдження радіонуклідів в прибережних зонах, що включає радіоактивний розпад, адсорбцію-десорбцію на багатофракційних намулах, міграцію радіонуклідів у донних відкладеннях та у поровій воді; застосуванні моделі до моделювання наслідків аварії на АЕС Фукусіма.

Практичне значення одержаних результатів полягає в розробці низки математичних та чисельних моделей гідродинаміки та розповсюдження забруднень в прибережних зонах, що дозволяють враховувати більшість основних гідродинамічних процесів, що впливають на розповсюдження забруднень та намулів. Результати роботи знайшли впровадження в багатьох науководослідницьких та прикладних проектах. Розроблені моделі використовувались для моделювання наслідків аварійних забруднень, зокрема, розповсюдження радіонуклідів внаслідок аварії на АЕС Фукусіма. Розроблена модель розповсюдження нафтопродуктів використовується Сінгапурським Національним Університетом для моделювання нафтових розливів у Сінгапурській протоці.

Достовірність наукових положень дисертації забезпечується: використанням загальноприйнятих моделей рідин; коректною постановкою граничних задач; застосуванням надійних аналітичних методів для розв'язку задач; контрольованою точністю чисельних обчислень; узгодженістю між собою чисельних, аналітичних та експериментальних результатів, отриманих в роботі; несуперечливістю одержаних результатів відповідним опублікованим результатам інших авторів

Особистий внесок здобувача Аналітичні результати, розробка чисельних алгоритмів, що представлені в роботі та їх чисельна реалізація належить автору. В роботах [254,255,256,257,275] автору належить участь у постановці задач по розповсюдженню радіонуклідів у морському середовищі внаслідок аварії на АЕС Фукусіма разом з міжнародною групою співавторів з метою проведення порівняння різних розрахунків та моделей, проведення частини розрахунків власними моделями та обговорення формулювання висновків. В роботах [9,13] автору належить розробка чисельної гідродинамічної моделі негідростатичних гравітаційних течій, розрахунки, участь в обговоренні постановки задач та висновків разом з групою чл.-кор. НАНУ Нікішова В.І., якій належить проведення лабораторного експерименту. В роботах [76,77,78,194] автору належить постановка задач по оцінці стійкості дна під дією струменевих течій та чисельна реалізація розрахунків. В роботах [6,8,16,18] автору належить участь в постановці задач про перенос намулів та радіонуклідів, розробка та впровадження чисельних алгоритмів. В роботах [156,24] автору належить ідея впровадження алгоритмів швидкого пошуку та їх реалізація. В роботах [195,268] автору належить участь у постановці задач, впровадження різних підходів до врахування взаємодії хвиль та течій, проведення частини чисельних розрахунків. В роботах [15,196] автору належить отримання аналітичних результатів щодо розповсюдження нафти по поверхні води, розробка чисельних лагранжевих алгоритмів розв'язку рівнянь, шо описують розповсюдження нафтових забруднень та їх реалізація. В роботах [192,78, 11,12,14,15] автору належить участь у постановці задач та чисельна реалізація їх розв'язку. В роботах [40,193,195,31,41,42,43,44,45,197,32,33] автору належить розвиток гідродинамічних моделей негідростатичних течій та їх чисельна реалізація, постановка задач та інтерпретація результатів належать співавторам. Доповіді на 20-ти конференціях проведені особисто автором, інші доповіді проведено співавторами.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами Робота виконувалась в рамках:

- бюджетних тем та фундаментальних досліджень Інституту Проблем Математичних Машин та Систем НАН України: "Розробка теоретичних основ побудови нових моделей, алгоритмів і розподілених інформаційних технологій підтримки прийняття рішень в системах електронного урядування (Е-СИСТЕМА)"; "Розробка моделюючої системи оперативного прогнозування температури у водоймищі–охолоджувачі АЕС для підтримки прийняття рішень з підвищення ефективності вироблення електроенергії на АЕС у літній період"; "Методи та моделі створення та інтеграції новітніх інформаційних технологій в системах підтримки прийняття рішень різного призначення (ІНТЕГРАЦІЯ)"; "Розробка наукових засад систем підтримки прийняття рішень з збереження та поліпшення навколишнього середовища на основі новітніх Веб та ГІС технологій"; "Комплексна система підтримки прийняття рішень у розподілених середовищах (РЕГЛАМЕНТ)".
- проекту Державного Фонду Фундаментальних Досліджень Ф64/22 "Мо-

делювання змін рівня, температури, солоності у Чорному та Азовському морях та їх впливу на навколишнє природне морське середовище згідно сценаріїв змін клімату в XXI столітті";

- проекту Державного Фонду Фундаментальних Досліджень Ф68/12879 "Перенос радіоактивності між забрудненими донними намулами і морським середовищем після аварій на Чорнобильській та Фукусімській АЕС" разом із Японським Інститутом радіоактивності навколишнього середовища;
- проекту INTAS №03-51-3728 "Північні моря в глобальній кліматичній системі" (2004-2007)
- проекту INTAS №03-51-4620 "Сильно нелінійні внутрішні хвилі в озерах: виникнення, трансформація та перемішування" (2004-2007)
- спільного проекту РФФД (Росія) ДФФД (Україна) "Внутрішні хвилі великої амплітуди в океані із змінною глибиною: аналітичні розв'язки та чисельне моделювання" (2009-2010)
- проекту МАГАТЕ "Моделювання та дані оцінки впливу радіаційних забруднень" (2012-2015)
- спільного проекту РФФД (Росія) ДФФД (Україна) "Внутрішні хвилі великої амплітуди та їх вплив на підводні конструкції та платформи" (2013)
- науково-дослідних роботах молодих вчених НАН України: "Інтелектуальна інформаційна система стану прибережної зони моря" (2005 - 2006);
 "Моделювання плавучих струменевих течій та прогнозування їх впливу

на оточуюче середовище" (2007-2008); "Тривимірне моделювання взаємодії хвиль та течій в задачах прибережної гідродинаміки" (2009-2010)

- стипендії Всесвітньої Федерації вчених (WFS) і МЦНК "Всесвітня лабораторія", "Розробка прогностичної системи для моделювання аварійних нафтових виливів в прибережних зонах" (2007-2008)
- грантів Президента України "Чисельне негідростатичне моделювання струменів та гравітаційних течій та його застосування до проблем прибережної гідродинаміки" (2008,2014)
- гранту Київського міського Голови для талановитої молоді (2010)
- стипендії Президента України для молодих вчених (2010-2012)

Апробація роботи. Матеріали різних розділів дисертації доповідались та обговорювались на 49-ти доповідях на міжнародних та вітчизняних конференціях, зокрема на: 5-ти конференціях "Моделювання" Інституту проблем моделювання в енергетиці ім. Г.Е. Пухова НАН України (2006,2010,2012,2013, 2014); 9-ти конференціях "Математичне та імітаційне моделювання систем" (МОДС) (2006,2007,2008,2009,2010,2011,2013,2014,2016); конференції Euromech Fluid Mechanic Conference, Стокгольм (2006); 6-ти конференціях Європейської Геофізичної Спілки (EGU), Відень (2007,2012,2013,2014,2015,2016); 3х конференціях Американської Геофізичної Спілки (AGU), Сан-Франциско (2007), Портленд (2009), Солт Лейк Сіті (2012); на щорічному з'їзді Корейської Асоціації наук та технологій про океан (KAOST) (2008); на IV Міжнародній Антарктичній конференції, Київ (2009); на V Міжнародній Антарктичній конференції, Київ (2011); на XXIII конференції ICTAM, Пекін (2012); на XXII Науковій Сесії Ради РАН по нелінійній динаміці, Москва (2013); на конференції "Комп'ютерна Гідромеханіка", Київ (2016). Робота в цілому доповідалась на семінарах в Інституті проблем математичних машин та систем НАНУ, на семінарі Ради молодих вчених ІПММС НАНУ (2016), на семінарі Інституту Гідромеханіки НАНУ (2016). Окремі розділи роботи доповідалась на семінарах Першого Океанографічного Інституту (FIO), Циндао, Китай (2012-2016); семінарах Корейского Інституту Наук про Океан та Технологій (KIOST), Ансан, Південна Корея (2010-2016); семінарах Національного Університету Сеулу (SNU), Південна Корея (2011-2014).

Публікації Результати дисертації опубліковано у 85 роботах: у двох главах монографій (у співавторстві), 34 статті у фахових вітчизняних та зарубіжних виданнях (з них 2 одноосібні), 49 робіт в збірниках праць та тез міжнародних конференцій. З опублікованих робіт 17 індексовані у міжнародній наукометричній базі Scopus.

Структура дисертації

Робота складається зі вступу, семи розділів, висновків, додатків та списку використаних джерел з 324 найменувань. Робота включає 305 сторінок основного тексту, 146 рисунків, 9 таблиць, усього 370 сторінок. В *першому розділі* дається огляд існуючих чисельних сіткових, гібридних та безсіткових методів розв'язання гідродинамічних задач, висвітлюються переваги, недоліки, проблеми і складності при моделюванні лагранжевими методами. Поряд з відомими методами, представлено розроблений автором метод розв'язку рівнянь мілкої води безсітковим методом взаємодіючих частинок.

Другий розділ присвячений методам частинок розв'язку рівняння адвекціїдифузії. Викладені теоретичні основи моделювання броунівського руху та дифузії стохастичними методами. Представлений новий алгоритм, що дозволяє будувати чисельні схеми випадкових блукань з незміщеною дисперсією для тривимірного випадку змінних полів течій та коефіцієнту дифузії. Отримано нові аналітичні розв'язки для зміщення центру мас та дисперсії розподілу положення частинки при моделюванні методом випадкових блукань для окремих часткових випадків одновимірного руху. Виведено критерії оцінки максимальних часових кроків для розв'язку рівняння адвекції-дифузії методом частинок. Застосовано теорію стохастичних процесів Маркова до моделювання методом частинок процесів зміну стану речовини, таких як, наприклад, хімічні реакції, радіоактивний розпад та адсорбція-десорбція розчинених речовин на піщинках завислих чи донних намулів. Представлений чисельний алгоритм для загального випадку розрахунку ймовірності зміни стану для кожної частинки протягом часового кроку.

В третьому розділі представлені вдосконалені гідродинамічні моделі, що дозволяють описувати основні гідродинамічні процеси прибережних зон: вплив складного рельєфу та берегової лінії на течії, вітрові поверхневі хвилі, припливні та гравітаційні течії, негідростатичні гравітаційні та струменеві течії. Представлена нова математична модель переносу багатофракційних намулів, що включає міграцію донних намулів у шарі відкладень завдяки механічному перемішуванню донними організмами та відповідну еволюцію гранулометричного складу та пористості донних намулів.

В четвертому розділі описана нова тривимірна лагранжева модель переносу багатофракційних намулів, представлений чисельний алгоритм моделі, результати тестів на аналітичних розв'язках та лабораторних експериментах, наведені приклади застосування моделі.

П'ятий розділ присвячений новій лагранжевій моделі розповсюдження нафтопродуктів. Модель описує розтікання двовимірної плівки нафти по поверхні води, а також тривимірний перенос нафтових крапель в товщі води. Модель враховує вплив обертання Землі при довготривалих розливах за рахунок утворення пограничного шару Екмана під плівкою, що розтікається по поверхні води. Отримано нові автомодельні аналітичні розв'язки для розтікання осесиметричної плівки нафти на поверхні спокійної води для випадку миттєвого та неперервного розливів, які враховують обертання Землі. Робота чисельної моделі була перевірена на отриманих аналітичних розв'язках та при моделюванні відомих аварійних нафтових розливів.

У *шостому розділі* наводиться опис нової тривимірної моделі розповсюдження радіонуклідів. Модель здатна описувати тривимірний перенос та турбулентну дифузію радіонуклідів, процеси адсорбції та десорбції із багатофракційними завислими та донними намулами, а також процес розпаду радіонуклідів. Модель враховує міграцію радіонуклідів у донних відкладеннях за рахунок молекулярної дифузії та механічного перемішування донними організмами. Отримано нові аналітичні розв'язки для розрахунку ймовірностей переходу частинок між станами при радіоактивному розпаді, адсорбціїдесорбції. Побудовано алгоритм моделювання граничних умов для методу частинок, що заснований на розрахунку ймовірності зміни стани частинок біля границі. Робота моделі перевірена на аналітичних розв'язках, на лабораторному експерименті по міграції радіонуклідів в ґрунті.

В сьомому розділі описується застосування розроблених моделей до розрахунку наслідків аварії на АЕС Фукусіма. Проведений аналіз донних вимірювань радіоактивного забруднення у воді та у ґрунті. Проведене моделювання розповсюдження радіонуклідів протягом перших місяців після аварії, та проаналізовано результати моделювання та спостережень.

Автор висловлює щиру вдячність науковому консультантові доктору фізикоматематичних наук Володимиру Станіславовичу Мадеричу за постійну увагу до роботи та корисні дискусії

Розділ 1

ЕЙЛЕРОВІ ТА ЛАГРАНЖЕВІ ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ

1.1 Роль чисельного моделювання для розв'язання гідродинамічних задач

Чисельне моделювання за допомогою комп'ютерів стало дуже важливим підходом до вирішення складних практичних задач в області техніки і науки. Чисельне моделювання переводить важливі аспекти фізичної задачі в дискретну форму математичного опису, відтворює і вирішує задачу на комп'ютері, і показує явища придатними до аналізу відповідно до вимог користувачів. Новітній чисельний підхід дозволяє розв'язувати задачі в усіх їх деталях, не роблячи занадто багато припущень та спрощень, за допомогою збільшення обчислювальної потужності.

Чисельне моделювання забезпечує додатковий інструмент наукового дослідження, замість проведення дорогого, потребуючого багато часу або навіть небезпечного експерименту в лабораторії або в польових умовах. Чисельні інструменти часом є більш корисними, ніж традиційні експериментальні методи з точки зору забезпечення повних та детальних даних, які не можуть бути отримані безпосередніми вимірами або спостереженнями, або важко отримати за допомогою інших засобів.

Чисельне комп'ютерне моделювання відіграє важливу роль в забезпеченні перевірки теорій, дозволяє дослідити і деталізувати експериментальні результати і сприяє в інтерпретації або навіть відкритті нових явищ.

1.2 Сіткові методи

Після вибору відповідної математичної моделі, разом з відповідними граничними і початковими умовами, ми можемо приступити до її розв'язку. У цьому розділі ми коротко розглянемо методи чисельних розв'язків математичних задач які описуються рівняннями в частинних похідних. Як уже обговорювалось, є два фундаментальні підходи до побудови рівнянь, що описують рух суцільного середовища: ейлеровий та лагранжевий. Для прикладу, якщо ми розглянемо рівняння руху, знехтувавши в'язкістю та зовнішніми силами, то в лагранжевій формі отримаємо рівняння

$$\frac{Du_i}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i}$$

А в ейлеровій формі воно має такий вигляд:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i}$$

Різниця між двома підходами полягає у визначенні повної похідної як суми локальної та конвективної похідної:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_j \frac{\partial}{\partial x_j}$$

В лагранжевому підході зміна будь-якої величини в часі визначається в рухомій точці простору, в а ейлеровому - в нерухомій, звідси з'являється додаткова конвективна похідна. Використання різних підходів до опису суцільного середовища призводить до різних типів дискретизації розрахункової області з метою чисельного розв'язку вихідних рівнянь, побудови лагранжевої та ейлерової розрахункової сітки.

1.3 Лагранжеві сіткові методи

При лагранжевому підході вузли розрахункової сітки асоційовані з речовиною та рухаються разом з нею впродовж всього часу моделювання. Так як вузол сітки повторює траєкторію руху речовини, то відносний рух сусідніх вузлів призводить до деформації комірок або елементів розрахункової сітки. Маса, імпульс та енергія переносяться разом з рухом вузлів сітки. Потік маси через границі елементів відсутній, бо маса кожного елемента зберігається. Коли матеріал деформується, розрахункова сітка деформується разом з ним. Використання лагранжевої дискретизації є стандартним в задачах механіки деформівного твердого тіла. Сіткові лагранжеві методи мають деякі переваги [184]:

- 1. Так як у рівняннях відсутні нелінійні конвективні члени, то чисельна дискретизація таких рівнянь є простішою.
- 2. Так як вузли сітки прив'язані до рухомої речовини, то траєкторії руху та кінцеві положення точок можуть бути просто обчислені.
- 3. В лагранжевому підході деякі вузли можуть бути розміщені на рухомих границях області, що полегшує задання граничних умов на відкритих рухомих границях, наприклад, вузли, розташовані на вільній поверхні рухаються разом з речовиною.
- 4. Складна геометрія задачі може бути описана нерегулярною сіткою.

Завдяки цим своїм перевагам, лагранжеві сіткові методи дуже популярні в чисельній механіці твердого деформівного тіла, де відносні деформації не такі великі, як у рідинах.

1.4 Ейлерові сіткові методи

Трьома класичними методами чисельного розв'язання математичних задач, заданих в рівняння з частинними похідними в Ейлеровій постановці є метод скінченних різниць (МСР), метод скінченних елементів (МСЕ) і метод скінченних об'ємів (МСО) [247]. Можна виділити окремо спектральний метод [47], що формально відноситься до скінченно-елементних методів Гальоркіна, але має ряд суттєвих особливостей, що відрізняє його від традиційних скінченно-елементних методів. Метод скінченних різниць є найстарішим і заснований на застосуванні локального розвинення Тейлора для апроксимації диференціальних рівнянь. МСР використовує топологічно прямокутну мережу ліній, щоб побудувати дискретизацію рівняння в частинних похідних. Це є потенційним недоліком при застосуванні до областей складної геометрії в декількох вимірах. Особливості застосування МСР для задач газової динаміки розглянуто в [37]. Щоб позбутися недоліків скінченно-різницевих методів розвинулися чисельні методи, що засновані на використанні інтегральної форми рівнянь, що привело до виникнення та розвитку методів скінченних елементів та скінченних об'ємів. Дамо дуже короткий вступ в ці методи, для чого розглянемо дискретизацію одновимірного рівняння. Це, не в повній мірі, але дозволить проілюструвати геометричну гнучкість МСЕ та МСО, виявити деякі подібності між методами та відзначити відносні переваги та недоліки.



Рисунок 1.1: Дискретизація одновимірної області

1.4.1 Метод скінченних різниць

Цей метод розв'язку використовує рівняння в природній диференціальній формі. Візьмемо для прикладу одновимірне рівняння дифузії з постійним коефіцієнтом дифузії *D*:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \tag{1.1}$$

Вважаємо, що функція C(x,t) задана на деякому наборі координат x_i , $i = \overline{1, N}$, як показано на рис. 1.1. Чисельний розв'язок рівняння ми шукаємо у вигляді набору значень C_i , що є апроксимацією точного розв'язку $C_i \approx C(x_i)$. Покладемо, що всі точки x_i рівномірно розподілені з відстанню між точками $\Delta x = x_{i+1} - x_i$, $i = \overline{1, N-1}$. Таке розбиття розрахункової області будемо називати розрахунковою сіткою. Тоді просторові похідні в точці x_i можна визначити декількома способами:

$$\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{x_i} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{C(x_i + \Delta x) - C(x_i)}{\Delta x} \\
\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{x_i} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{C(x_i) - C(x_i - \Delta x)}{\Delta x} \\
\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{x_i} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{C(x_i + \Delta x) - C(x_i - \Delta x)}{2\Delta x}$$
(1.2)

З математичної точки зору ці означення еквівалентні, так як всі три границі збігаються при $\Delta t \to 0$. Проте, якщо Δt мале, але скінчене, то різні визначення призводять до різних апроксимацій.

$$\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{x_{i}} \approx = \frac{C_{i+1} - C_{i}}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{x_{i}} \approx \frac{C_{i} - C_{i-1}}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{x_{i}} \approx \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta x}$$
(1.3)

Вирази (1.3) називаються скінченими різницями по потоку, проти потоку та центральними, відповідно. Точність таких апроксимацій визначається шляхом розкладання розв'язку в ряд Тейлора та оцінкою порядка членів, що втрачаються при заданій апроксимації. Наприклад, для напрямленої різниці та центральної різниці отримаємо:

$$\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{x_i} = \frac{C_i - C_{i-1}}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\Big|_{x_i} \\
\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{x_i} \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta x} + \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 C}{\partial x^4}\Big|_{x_i}$$
(1.4)

Тому схема напрямлених різниць має перший порядок точності, а схема центральних різниць другий порядок точності. Таким же чином будується апроксимація другої похідної:

$$\left. \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right|_{x_i} = \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \tag{1.5}$$

Похідні по часу наближуються таким же чином. Позначивши верхнім індексом n поточний часовий крок, а n + 1 наступний часовий крок, можна отримати неявну скінченно-різницеву схему для розв'язку рівняння (1.1):

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} = D \frac{C_{i+1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2}$$
(1.6)

Така схема є неявною, бо просторові похідні визначаються на n+1-му часовому кроці та не дозволяють явно визначити з рівняння C_i^{n+1} . Після визначення чисельної схеми задача розв'язання рівняння в частинних похідних зводиться до розв'язання системи лінійних рівнянь методами лінійної алгебри.

1.4.2 Метод скінченних елементів

МСР використовує диференціальну форму вихідних рівнянь. Є два альтернативні методи, які використовують для побудови чисельного методу інтегральні форми рівнянь: МСЕ та МКО. Використання інтегральних форм є кращим, оскільки воно забезпечує більш природне задання граничних умов та джерел завдяки менш строгим вимогам на регулярність та гладкість розв'язку. Крім того, воно краще підходить, ніж МСР для випадків складних геометрій в багатовимірних задачах, так як інтегральні формулювання не залежать від структури розрахункової сітки. Рівняння дифузії можна записати у формі:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{0}^{L} C(x,t)w(x)dx = D \int_{0}^{L} w(x)\frac{\partial^{2}C}{\partial x^{2}}dx \qquad (1.7)$$

Тут w(x) – вагова функція, що визначає схему розв'язку.

В методі скінченних елементів апроксимація розв'язку будується у вигляді розкладення по базових функціях:

$$C^{\delta}(x,t) = \sum_{i=1}^{N} C_i(t) N_i(x)$$
(1.8)

де $N_i(x)$ – базисні функції. Розглянемо МСЕ на прикладі методу Гальоркіна, коли базові функції співпадають з ваговими функціями. Якщо $N_i(x)$ визначені на всій розрахунковій області, то такі методи звуться спектральними. Зазвичай $N_i(x)$ кусково-лінійні функції, що визначені в декількох вузлах навколо *i*. Перетворимо праву частину рівняння (1.7):

$$\int_{0}^{L} w(x) \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dx = w(L) \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{L} - w(0) \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{0} - \int_{0}^{L} \frac{w(x)}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial x} dx$$
(1.9)

Таке спрощення дозволяє зменшити вимоги на гладкість розв'язку та робить симметричною матрицю дискретизованої системи. Значення функцій на кін-

цях інтервалу задаються з граничних умов. Тепер, поклавши, згідно (1.8) $C \approx C^{\delta}(x,t) = \sum_{i=1}^{N} C_i(t) N_i(x)$, та поклавши $w(x) = N_i(x)$ отримаємо з рівняння (1.7):

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{0}^{L} N_i(x) \sum_{i=1}^{N} C_i(t) N_i(x) dx = -D \int_{0}^{L} \frac{dN_i(x)}{dx} \sum_{0}^{L} C_j \frac{dN_i(x)}{dx} dx \qquad (1.10)$$

Після обрання дискретизації по часу, рівняння (1.10) задає систему з N-1лінійних рівнянь (для кожного $i = \overline{2, N}$).

1.4.3 Метод скінченних об'ємів

Для цього методу запис рівняння в інтегральній формі записується не для всієї розрахункової області, а лише для деякого контрольного об'єму Ω_i в околі вузла x_i . Для одновимірного випадку $\Omega_i = [x_{i-1/2}; x_{i+1/2}]$:

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{\partial C}{\partial t} dx = D \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dx$$
(1.11)

Апроксимувавши інтеграл зліва по правилу середньої точки, та обчисливши інтеграл справа аналітично, отримаємо:

$$\frac{\partial C}{\partial t}\Big|_{x_i} \left(x_{i+1/2} - x_{i-1/2}\right) = D\left(\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{x_{i+1/2}} - \frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{x_{i-1/2}}\right)$$
(1.12)

Даний підхід робить чисельну схему консервативною, якщо потік речовини на границі однієї комірки дорівнює потоку на границі сусідньої комірки.

Для рівномірних прямокутних структурованих сіток всі три методи (МСР, МСЕ, МСО) можуть приводити до однакових чисельних схем [247], але МСЕ та МСО дозволяють використовувати більш загальний підхід, що дозволяє оперувати з нерівномірними та неструктурованими сітками, що є значною перевагою для задач складної геометрії.

1.4.4 Спектральний метод

Як вже було зазначено в розділі 1.4.2, спектральний метод використовує розкладення функції по базисним функціям (1.8) та належить до класу скінченно-елементних методів Гальоркіна, в якому базисні функції визначені на всій розрахунковій області. В цьому сенсі спектральний метод, як і традиційний метод Гальоркіна є глобальними [47]. На відміну методу скінчених елементів, значення коефіцієнтів при базисних функціях в розкладі (1.8) не відповідають вузловим значенням функції. Іншою суттєвою відмінністю спектрального методу є те, що в якості базисних функцій мають використовуватись ортогональні функції, тобто такі, що:

$$\int_{-\infty}^{\infty} N_i(x) N_j(x) dx = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ \neq 0, & i = j \end{cases}$$
(1.13)

Прикладами таких функцій можуть бути ряди Фур'є, поліноми Лежандра, поліноми Чебишева. Використання ортогональних функцій дозволяє значно спростити вигляд диференціальних рівнянь, та в деяких випадках отримати розв'язки високої точності при невеликій кількості членів розкладу наближеного розв'язку [47].

Розглянемо розв'язок рівняння дифузії (1.1) спектральним методом за допомогою розкладення функції в ряд Фур'є з кількістю членів N:

$$C^{\delta}(x,t) = \sum_{i=1}^{N} C_i(t) e^{ikx}$$
(1.14)

Тоді

$$\frac{\partial C^{\delta}(x,t)}{\partial t} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial C_i(t)}{\partial t} e^{ikx}$$
(1.15)

$$\frac{\partial^2 C^\delta(x,t)}{\partial x^2} = -\sum_{i=1}^N C_i(t) k^2 e^{ikx}$$
(1.16)

Підставляючи значення похідних у вихідне рівняння, та використовуючи теорему Гейне-Кантора, отримаємо систему диференціальних рівнянь відносно коефіцієнтів Фур'є, в якій відсутня похідна по координаті:

$$\frac{\partial C_i(t)}{\partial t} = -k^2 C_i(t) \tag{1.17}$$

Тепер ці рівняння є звичайними диференціальними рівняннями, а не рівняннями в частинних похідних. Розв'язувати їх можна будь-якими скінченно різницевими методами. Для того, щоб знайти початкові значення коефіцієнтів Фур'є $C_i(0)$ можна скористатись швидким перетворенням Фур'є [104] для початкового розподілу концентрації. Детальніше про задання граничних та початкових умов в спектральних методах викладено в [47].

1.5 Обмеження сіткових методів

Звичайні сіткові чисельні методи є традиційними та загальновживаними методами обчислювальної гідромеханіки. Незважаючи на зручність та успішність їх застосування, їх використання пов'язано з деякими складностями, що обмежують їх застосування до багатьох задач [184]. Побудова розрахункової сітки, що завжди передує розрахункам, може виявитись складною задачею, особливо для областей складної неправильної форми. Сама задача побудови сітки вимагає складних математичних перетворень та розрахунків, що, в деяких випадках, може бути більш складною та ресурсомісткою проблемою, ніж, власне, самі розрахунки, для яких вона будується. Рухома вільна поверхня, рухомі бічні границі, та границі розділу між рідинами завжди стають проблемою при використанні ейлерових сіткових методів в механіці рідин та газів. Для лагранжевих сіткових методів обмеженням є великі деформації. Значні деформації лагранжевих сіток вимагають спеціальних підходів, адаптивної перебудови сітки, що сильно впливає на складність алгоритму та на точність обчислень. Складності та обмеження сіткових методів переконливо проявляються в задачах про вибух або про розповсюдження ударних хвиль. В таких задачах одночасно присутні таки особливості, як сильна неоднорідність, великі деформації, рухома вільна поверхня та границі. Такі властивості задач становлять значні перешкоди до чисельного розв'язання сітковими методами.

Для подолання проблем з вільною поверхнею було розроблено декілька модифікацій ейлерових сіткових методів. Деякі проблеми з вільною поверхнею розв'язуються модифікованими сітковими методами, наприклад, метод маркерів в клітинці (МАС, [138]). В методі МАС пасивні маркери, що заповнюють всю область, що займає рідина або газ, використовуються для відстежування рівня вільної поверхні та рухомих границь. Положення маркерів, що рухаються з швидкостями течії показують заповнені та пусті розрахункові клітинки та нове положення рухомих границь. Метод МАС належить до сіткових методів, хоча і використовує лагранжеві частинки в розрахунках. Подібну ідею відслідковування вільної поверхні використовують методи VOF (Volume Of Fluids, методи об'ємів рідини). Такі методи (наприклад SLIC [236], VOF [142], Young [321], FLAIR [56], HELMIT [132]) основані на використанні скалярної функції, що вказує на ступінь заповненості клітинки рідиною. Значення функції 0 відповідає "сухій" клітинці, а 1 – повністю заповненій клітинці. Проміжні значення означають, що в клітинці проходить поверхня розділу. В залежності від складності алгоритму, поверхня розділу може вважатися однорідною в середині клітинки, або лінійною, або можуть використовуватися більш складні апроксимації. Для визначення скалярної функції, тобто об'ємної концентрації рідини в клітинці, розв'язується рівняння переносу, використовуючи поле швидкостей, що задане у вузлах сітки.

Такий метод дозволяє моделювати декілька рідин, що не змішуються, так як в одній клітинці може знаходитися декілька рідин одночасно. Для кожної рідини необхідно окремо розв'язувати рівняння для своєї скалярної функції. Хоча наведені вище приклади дещо розширюють область застосовності класичних сіткових методів, однак, вони є дещо штучними, і вносять нові складності, пов'язані з чисельною реалізацією подібних алгоритмів, зокрема чисельна дисперсія та стійкість.

1.6 Метод частинок в клітинках (PIC)

Лагранжево-Ейлеровий метод частинок в клітинках (Particle-In-Cell Method PIC) з'явився приблизно одночасно з методом MAC [119]. Подібно методу МАС він також використовує лагранжеві частинки та нерухому ейлерову розрахункову сітку. Але, на відміну від МАС, в методі РІС частинки окрім свого положення в просторі (координат) мають додаткові властивості, такі як маса та густина рідини. Метод PIC є, по суті змішаним Ейлерово-Лагранжевим методом, бо для опису руху рідини він використовує лагранжеві частинки, а для розрахунку сил, що діють на частинку використовує нерухому розрахункову сітку. Огляд та класифікація таких методів дані в [184]. Розв'язок рівняння динаміки в методі РІС відбувається класичними сітковими методами, наприклад методом скінченних різниць. Але швидкості та інші властивості вузлів сітки спершу розраховується методом усереднення властивостей частинок у клітинці. Потім, нове поле швидкості на наступному часовому кроці отримується з розв'язку рівняння динаміки на сітці. А далі відбувається рух частинок згідно нового поля швидкості в нове положення. Можна розглядати метод PIC як модифікований метод MAC із зворотнім впливом частинок не тільки на визначення рівня вільної поверхні, а й на властивості

вузлів розрахункової сітки.

1.7 Безсіткові методи частинок

Основна ідея безсіткових методів полягає в тому, щоб використовувати для розв'язку рівнянь гідродинаміки положення вузлів (частинок) без структури зв'язку між цими вузлами. Наявність структури зв'язку між вузлами, власне, і визначає розрахункову сітку. Розв'язок розглядається в рухомих, або нерухомих точках, які ніяким чином не пов'язані одна з одною. Детальний огляд безсіткових методів викладений в [185]. Спільною рисою для всіх безсіткових методів є початкова генерація та заповнення розрахункової області та границі області незв'язаними між собою вузлами, або частинками. Вузли можуть бути розміщені нерівномірно. Визначається область впливу для кожного вузла, в якій буде враховуватися значення змінних у вузлі для інтерполяції змінних та впливу між вузлами. Так як в безсіткових методах немає структурованої сітки, що пов'язує вузли, то інтерполяція змінних для довільної змінної у довільній точці *х* відбувається через значення змінної у вузлах, що попадають в область впливу

$$u(x) = \sum_{i=1}^{n} \phi_i(x) u_i$$
 (1.18)

де n- кількість вузлів, в чию область впливу входить точка x, u_i - значення змінної у вузлі i, $\phi_i(x)$ - функція ядра i-го вузла. Для простоти обмежимось розглядом одновимірних задач. Функція ядра приймає ненульові значення лише в області впливу вузла. За межами цієї області $\phi_i(x)$ обертається в нуль. Для чисельного розв'язку задачі рівняння задачі дискретизуються за допомогою функції ядра. Процедура розв'язку дискретизованих рівнянь подібна до кінцево-елементних методів.

Розвиток деяких безсіткових методів розпочався понад 70-80 років тому з

методів колокації [276,65]. Деякі з методів починались з узагальненого методу скінченних різниць (GFDM) з довільними сітками [246,134]. Одним із найстарших і найвідоміших безсіткових методів частинок є метом SPH (Smoothed Particle Hydrodynamic), метод гідродинаміки згладжених частинок, який спочатку використовувався для моделювання астрофізичних явищ, таких, як вибух зірок та розповсюдження хмар пилу, що не мають границь. Явний метод гідродинаміки згладжених частинок (SPH) [188,107,223,224,222,306] та неявний метод рухливих частинок (MPS) [135] опираються на модель Лагранжа й не використовують обчислювальні сітки. Ці методи з успіхом використовуються при моделюванні складних течій, в тому числі руху рідини із вільною поверхнею, при моделюванні турбулентних течій, при моделюванні поведінки багатофазних сумішей, при моделюванні пересування річкового русла, при моделюванні плавання тіл, при моделюванні тривимірних течій.

Основні безсіткові методи частинок можна розділити за методами вибору та представлення інтерполюючої функції та знаходження просторових похідних. Методи SPH відносяться до методів інтегрального представлення функції через функцію ядра. Рухомий метод найменших квадратів (MLS– Moving Least squares) був вперше винайдений в роботі [178]. В основі методу MLS лежить представлення функцій у вигляді скінченних рядів. Метод PIM (Point Interpolation Method) також використовує скінчені ряди, але базисні функції розраховується не для всіх вузлів, що потрапляють в область впливу точки. В методі PIM використовується локальний розподіл вузлів, що дозволяє зменшити кількість членів ряду у порівнянні з методом MLS.

Існують інші способи класифікації безсіткових методів, крім зазначеної класифікації за вибором інтерполюючої функції. Безсіткові методи можна також поділити за формою запису вихідних рівнянь у сильній формі, слабій формі, та у змішаних формах, коли деякі групи вузлів можуть мати різні властивості. Також безсіткові методи поділяються на об'ємні (domain-type) та граничні (boundary-type) методи. Більш повна та детальна класифікація викладена в роботах [128,184,185,234,186,161]. В наступних кількох параграфах більш детально описані основні методи згідно класифікації за методом інтерполювання.

1.7.1 Метод MLS

Рухомий метод найменших квадратів був розвинений для побудови гладких поверхонь при апроксимації даних, що задані в неструктурованих точках. Апроксимація деякої функції u в розрахунковій області пропонується у вигляді поліному m-го порядку, але зі змінними коефіцієнтами. Локальна апроксимація в точці x в околі деякої точки x' визначається так:

$$u(x) = \sum_{i=0}^{m} x^{m} a_{i}(x') = \mathbf{p}^{T}(x) \mathbf{a}(x')$$
(1.19)

де

$$\mathbf{p}^{T} = (1 \ x \ x^{2} \ \dots \ x^{m})$$
$$\mathbf{a}^{T}(x) = (a_{0}(x) \ a_{1}(x) \ a_{2}(x) \ \dots \ a_{m}(x))$$

Невідомі коефіцієнти $a_i(x)$ визначаються в будь-якій точці x через мінімізацію функціонала I(x), що визначається через зважені різниці по всім вузлам $i \in [1, n]$, де визначені значення функції u_i :

$$I(x) = \sum_{i=1}^{n} W(x - x_i) \left[u(x_i, x) - u_i \right]^2 = \sum_{i=1}^{n} W(x - x_i) \left[\mathbf{p}^T(x_i) \mathbf{a}(x) - u_i \right]^2$$
(1.20)

де n- кількість вузлів в околі точки x, де вагова функція $W(x - x_i)$ не дорівнює нулеві.

Екстремум функціоналу I(x) знаходиться з умови рівності нулю похідних

від I(x) по коефіцієнтах $a_i(x)$:

$$\sum_{i=1}^{n} W(x - x_i) 2p_j(x_i) \left[\mathbf{p}^T(x_i) \mathbf{a}(x) - u_i \right]^2 = 0, \qquad j = \overline{1, n} \qquad (1.21)$$

Розв'язуючи систему лінійних рівнянь (1.21), знаходяться невідомі коефіцієнти $a_i(x)$, а по ним відтворюється функція u(x) згідно представлення (1.19). Так як коефіцієнти a(x) є функціями від x, то в результаті такого алгоритму будується неперервна, гладка крива або поверхня.

1.7.2 Метод РІМ

В методі точкового інтерполювання (PIM– Point Interpolation Method), подібно до методу MLS також використовується поліноміальне представлення функції:

$$u(x) = \sum_{i=0}^{m} x^{m} a_{i} = \mathbf{p}^{T}(x)\mathbf{a}$$
(1.22)

На відміну від MLS, в методі PIM коефіцієнти a_i не залежать від координати. Для того, щоб визначити коефіцієнти a_i , визначається область навколо точки x, що містить n вузлів із значеннями функції. Коефіцієнти a_i визначаються з умови рівності кривої або поверхні (1.22) вузловим значенням функції:

$$\begin{cases} u_1 = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \dots a_m x_1^m \\ u_2 = a_0 + a_1 x_2 + a_2 x_2^2 + \dots a_m x_2^m \\ \vdots \\ u_n = a_0 + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + \dots a_m x_n^m \end{cases}$$
(1.23)

Систему лінійних рівнянь можна записати в матричному вигляді

$$\mathbf{u} = \mathbf{P}\mathbf{a} \tag{1.24}$$

 $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_n)^T$, $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \dots, a_n)^T$. **Р** матриця коефіцієнтів системи. Розв'язок системи можна представити у вигляді:

$$\mathbf{a} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{u} \tag{1.25}$$

При цьому необхідно задовольнити існування оберненої матриці \mathbf{P}^{-1} . За умовами існування такої матриці можна звернутися до [186]. Знайдені таким чином коефіцієнти a_i не змінюються при зміні координати x, зміна коефіцієнтів відбувається тільки при зміні шаблону з n вузлів, по на якому розв'язується система лінійних рівнянь.

Підставляючи розв'язок (1.25) у представлення (1.22), отримаємо:

$$u(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^{T}(x)\mathbf{P}^{-1}\mathbf{u} = \sum_{i=1}^{n} \phi_{i}u_{i} = \Phi^{T}(\mathbf{x})\mathbf{u}$$
(1.26)

де

$$\Phi^{T}(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^{T}(\mathbf{x})\mathbf{P}^{-1} = (\phi_{1}(\mathbf{x}), \phi_{2}(\mathbf{x}), \dots, \phi_{n}(\mathbf{x}))$$

Від таких функцій легко знайти похідні, тому що інтерполяційна функція має поліноміальний вигляд. Похідна *l*-го ступеня може бути обчислена так:

$$\Phi^{(l)}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \phi_1^{(l)}(\mathbf{x}) \\ \phi_2^{(l)}(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \phi_n^{(l)}(\mathbf{x}) \end{cases} = \frac{\partial^l \mathbf{p}^T(\mathbf{x})}{\mathbf{x}^l} \mathbf{P}^{-1}$$
(1.27)

Відмітимо, що, на відміну від методу MLS, метод PIM при побудові інтерполяційної кривої або поверхні точно задовольняє рівність значень кривої у вузлових точках. Водночас, знайдені коефіцієнти поліному є постійним для вибраного шаблону, тому побудована поверхня може бути не такою гладкою, як при використанні методу MLS.

1.7.3 Метод SPH

Особливість методу SPH полягає у введенні штучної обчислювальної стисливості рідини з високим показником політропи для того, щоб зробити рівняння задачі гіперболічними та обмежити область їх інтегрування. Рух в'язкої ньютонівської рідини в деякій області Ω описується рівняннями Нав'є-Стокса

$$\rho \frac{dv^a}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial x^a} + \frac{\partial}{\partial x^b} \left(\mu \varepsilon_{ab}\right) + \rho F^a, \qquad (1.28)$$

рівнянням нерозривності

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho div\vec{v} = 0, \qquad (1.29)$$

та рівнянням стану

$$p = p(\rho). \tag{1.30}$$

Тут верхні та нижні індекси a, b = 1,2 (2D) або a, b = 1,2,3 (3D) пов'язані із координатними напрямками x, y, z, відповідно; $\vec{v} = \{v^a\}$ - компоненти вектора швидкості; p, μ, ρ - тиск, коефіцієнт динамічної в'язкості та густина рідини, відповідно; $\varepsilon_{ab} = \frac{\partial v^a}{\partial x^b} + \frac{\partial v^b}{\partial x^a} - \frac{2}{3} div \vec{v} \cdot \delta_{ab}$ — компоненти тензора швидкостей деформації; δ_{ab} — дельта Кронекера.

Рідина моделюється ансамблем взаємодіючих "рідких" частинок. Введемо максимальну відстань взаємодії між частинками *h* (довжина згладжування). Обмежимося спочатку двовимірним рухом рідини. Якщо навколо кожної індивідуальної частинки описати коло радіусом 2*h*, тоді тільки в середині цього кола заходяться частинки, які взаємодіють із центральною частинкою.

Нехай *А* деяка скалярна функція. Інтерполяція за просторовими координатами за методом SPH заснована на наступній інтегральній інтерполяції

$$\langle A(r) \rangle = \int_{\sigma} A(r') W(r - r', h') dr', \qquad (1.31)$$

де W(r - r', h') — це інтерполяційне ядро, а h' представляє собою масштаб згладжування для довільної частинки із області σ . Представляючи інтеграл в (1.31) у вигляді інтегральної суми, маємо

$$A_{s}(r_{j}) = \sum_{i=1}^{n} A_{i} \frac{M_{i}}{\rho_{i}} W_{ij}.$$
 (1.32)
Тут r_i , M_i , ρ_i — радіус-вектор, маса та густина *i*-частинки, відповідно; n — число "рідких" частинок (може змінюватися у майбутньому); $W_{ij} = W(r_j - r_i, h_i)$ — кусково-неперервна кубічна сплайн-функція Монахама (інтерполяційне ядро або вагова функція) [223].

Використовуючи властивості ядра, запишемо частинні похідні за просторовими змінними:

$$\nabla A_i = \sum_j \frac{M_j}{\rho_j} A_j \nabla_i W_{ij}.$$
(1.33)

Отже, інтерполяція за методом SPH полягає у тому, що за рахунок взаємодії тільки сусідніх частинок, всі члени у рівняннях (1.28)-(1.30) представляються у вигляді (1.32) або (1.33). Тобто основні рівняння набувають вигляду:

Рівняння неперервності

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \sum_j M_j \left(v_i - v_j \right) \cdot \nabla_i W_{ij}; \tag{1.34}$$

або

$$\rho_i = \sum_j M_j W_{ij}; \tag{1.35}$$

рівняння Нав'є-Стокса

$$\frac{dv_i^a}{dt} = -\sum_j M_j \left(\frac{p_i + p_j}{\rho_i \rho_j} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^a} + \Pi_{ij}^{ab} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^b} \right) + F_i^a;$$
(1.36)

рівняння стану

$$p(\rho) = P_0 \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\gamma} - 1 \right]$$
(1.37)

та рівняння руху частинок для визначення нового положення частинки

$$\frac{dr_i}{dt} = v_i + \omega \sum_j M_j \left(\frac{v_{ji}}{\bar{\rho}_{ij}}\right) W_{ij}.$$
(1.38)

В'язкий член для рівняння (1.36) у загальному випадку має вигляд :

$$\Pi_{ij}^{ab} = \frac{\mu_i \varepsilon_i^{ab} + \mu_j \varepsilon_j^{ab}}{\rho_i \rho_j},\tag{1.39}$$

$$\varepsilon_{i}^{ab} = \sum_{j} \frac{M_{j}}{\rho_{j}} v_{ji}^{b} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_{i}^{a}} + \sum_{j} \frac{M_{j}}{\rho_{j}} v_{ji}^{a} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_{i}^{b}} - \left(\frac{2}{3} \sum_{j} \frac{M_{j}}{\rho_{j}} v_{ji}^{a} \cdot \nabla_{i} W_{ij}\right) \delta_{ab} \qquad (1.40)$$

Тут ω – це параметр релаксації ($0 \leq \omega \leq 1$); $v_{ji}^a = v_j^a - v_i^a$, $\bar{\rho}_{ij} = (\rho_i + \rho_j)/2$. Нехай ρ_0 – це деяка початкова густина рідини (індекс "0" вказує, що параметр знаходиться у стані спокою або на нескінченності); γ – політропний індекс в рівнянні стану : $\gamma = \gamma_a = 1.4$ для повітря та $\gamma = \gamma_w = 7$ для води. Згідно введеної штучної обчислювальної стисливості рідини, початковий тиск P_0 буде пов'язаний із швидкістю звуку в рідині (c_s):

$$c_s = \sqrt{\gamma P_0 / \rho_0}.\tag{1.41}$$

Рівняння стану (1.37) для частинки тоді набуває вигляду:

$$p_i = B\left[\left(\frac{\rho_i}{\rho_0}\right)^7 - 1\right]^{1/7},\tag{1.42}$$

де $B = c_s^2 \rho_0 / 7$, $\rho_0 = 1000 \text{ kg/m}^3$. Для моделі SPH, що розглядається, будемо вважати $c_s \approx 10 \ u_{max}$, де u_{max} – це максимальна швидкість "рідкої" частинки. Якщо при цьому у модель входить гідростатичний тиск, тоді початковий розподіл густини знаходять із рівняння стану (1.42) у вигляді:

$$\rho_i = \rho_0 \left(1 + \frac{\rho_0 g(d - x_2^i)}{B} \right)^{1/7}.$$
(1.43)

Тут *d* – початковий рівень рідини, x_2^i – вертикальна координата частинки. Інші параметри в рівнянні (1.43) ті ж самі, що й в рівнянні (1.42).

1.7.4 Безсітковий лагранжевий метод для розв'язку рівнянь мілкої води

Для течій з вільною поверхнею в полі сили тяжіння рівняння мілкої води отримуються з рівнянь Нав'є-Стокса шляхом усереднення за глибиною, припускаючи, що горизонтальний масштаб набагато більший за вертикальний, вертикальна компонента швидкості та її прискорення малі у порівнянні з горизонтальною, вертикальний градієнт тиску близький до нуля, горизонтальна компонента швидкості є рівномірною за глибиною.

Рівняння мілкої води можуть бути розв'язані методом частинок [3] методом, подібним до SPH, але без гіпотези штучної стисливості. Розглянемо для простоти випадок плоского дна, та знехтуємо силою Коріоліса. Тоді рівняння мілкої води матимуть вигляд:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \vec{\nabla}(\vec{u}h) = 0$$

$$\frac{D\vec{u}}{Dt} = g\vec{\nabla}h + \vec{F}$$
(1.44)

де t - час, h - товщина шару; $\vec{u} = (u, v)$ - усереднена по товщині шару швидкість у декартовій системі координат $\vec{x} = (x, y)$, $\vec{\nabla}$ - горизонтальний диференціальний оператор. \vec{F} може включати в себе зовнішні сили, сили вязкого тертя, силу Коріоліса, $\vec{F} = \vec{F}(\vec{u}, h, t)$

Для розв'язання системи рівнянь лагранжевим методом проведемо дискретизацію в часі рівняння динаміки. Так як повна похідна записується для рухомої частинки, то

$$\frac{D\vec{u}}{Dt} \approx \frac{\vec{u}^{n+1} - \vec{u}^n}{\Delta t} \tag{1.45}$$

Тоді чисельна схема для розв'язку рівняння динаміки виглядатиме так:

$$\vec{u}^{n+1} = \vec{u}^n + \frac{1}{\Delta t} \left(g \vec{\nabla} h + \vec{F}(\vec{u}, h, t) \right)$$
(1.46)

В залежності від того, на якому кроці визначати \vec{u} в правій частині рівняння, і в залежності від вигляду функції $\vec{F}(\vec{u}, h, t)$ можна отримати явні, або неявні чисельні схеми. Детальніше про конкретні види чисельних схем обговорюється в розділі 5.2.2. В поточному розділі подано загальні методи побудови чисельного алгоритму для розв'язку рівнянь мілкої води методом SPH.

Для визначення товщини шару h та його похідних $\vec{\nabla}h$, скористаємось, представленням (1.32,1.33).

$$h(r_j) = \sum_{i=1}^{n} \frac{M_i}{\rho_i} W_{ij}$$
(1.47)

$$\vec{\nabla}h = \sum_{j} \frac{M_j}{\rho_j} \vec{\nabla}W_{ij} \tag{1.48}$$

Тут W_{ij} – двовимірна вагова функція. Огляд по вибору можливих вагових функцій можна побачити, наприклад, в [184]. Зазвичай вибираються симетричні "гаусоподібні" функції або їх поліноміальні наближення, щоб було просто розрахувати як саму функцію, так і її перші похідні. Відмінність від класичного методу SPH полягає в тому, що замість рівняння для знаходження тиску використовується рівняння (1.47) для знаходження товщини шару рідини. Градієнт гідростатичного тиску в рівняннях мілкої води (1.44) виражається через $\vec{\nabla}h$, тому немає необхідності у використанні штучної стисливості рідини подібно до класичних методів SPH.

Таким чином, використовуючи (1.46) з представленнями (1.47,1.48) знаходиться поле швидкостей в кожній точці положення частинки. Двовимірне рівняння нерозривності є, по суті, рівнянням переносу, тому, при відомому полі швидкостей, розв'язок такого рівняння зводиться до інтегрування рівнянь руху для кожної частинки.

$$\frac{\mathrm{d}\vec{x}}{\mathrm{d}t} = \vec{u} \tag{1.49}$$

Представлений метод розв'язання рівнянь мілкої води вперше був запропонований автором [3], схожі методи було розвинуто в роботах [63],[266]. Метод взаємодіючих частинок для розв'язання рівнянь мілкої води використано в розділі 5 для моделювання розтікання нафтових плівок по поверхні води.

1.8 Висновки до розділу

В розділі дано короткий огляд ейлерових та лагранжевих, сіткових та безсіткових методів розв'язання гідродинамічних задач, висвітлюються переваги, недоліки, проблеми і складності при моделюванні лагранжевими методами. Представлено новий метод розв'язку рівнянь мілкої води безсітковим методом взаємодіючих частинок.

Розділ 2

ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПЕРЕНОСУ ТА ДИФУЗІЇ МЕТОДОМ ЧАСТИНОК

Молекули рідини, або частинки домішок у рідині на мікроскопічному рівні рухаються за рахунок хаотичного випадкового руху молекул рідини, що називається броунівським рухом (рис. 2.1). На більших масштабах рух частинок визначається випадковим каскадом вихорів, що спричиняє турбулентну дифузію. Хоча молекулярна та турбулентна дифузія є різними явищами за своєю природою, однак, для моделювання цих процесів можна застосовувати подібні математичні методи. Методи моделювання дифузії частинок домішок у рідині розглянуті в наступних розділах.



Рисунок 2.1: Механізми молекулярної та турбулентної дифузії

2.1 Моделювання процесу дифузії методом випадкових блукань

2.1.1 Броунівський рух

Явище броунівського руху було відкрите у 1827 ботаніком Робертом Броуном, який при дослідах із маленьким частинками спор грибів у воді помітив неперервний хаотичний рух таких частинок. Рух такої броунівської частинки визначається рівнодійною всіх сил, що спричинені зіткненнями з молекулами середовища. А. Ейнштейн в роботі [116] з умови того, що всі можливі рухи рівноймовірні, та можна знехтувати інерцією частинки отримав, що в такому випадку середній квадрат зміщення частинки пропорційний часу та коефіцієнту молекулярної дифузії:

$$\overline{x^2} = 2Dt \tag{2.1}$$

Також Ейнштейн отримав вираз для коефіцієнту дифузії, як функції температури, в'язкості та діаметру частинки. Співвідношення (2.1) лежить в



Рисунок 2.2: Приклад двовимірного Броунівського руху [229]

основі чисельних методів випадкових блукань, що основані на розрахунку випадкового зміщення частинки протягом часового кроку чисельної моделі. Броунівський рух називають випадковими блуканнями, тому що в кожний момент часу частинка отримує випадкове зміщення незалежно від свого попереднього стану.

Детально математична теорія броунівського руху викладена в [312,233, 229]. З математичної токи зору, броунівський рух є *Вінерівсьским процесом*. Приклад двовимірного броунівського руху частинку зображений на рис. 2.2. Такий процес можна описувати стохастичними рівняннями Ланжевена для траєкторії руху частинки, або за допомогою рівняння Фоккера-Планка, що є детермінованим та описує щільність розподілу положення частинки.

2.1.2 Рівняння Ланжевена

Рівняння Ланжевена є наслідком застосування другого закону Ньютона для частинки, що рухається в рідині. Позначимо *m* - маса частинки, **v**відносна швидкість частинки та рідини, тоді

$$m\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F} - \gamma \mathbf{v} + \eta(t), \qquad (2.2)$$

$$\gamma = 6\pi a \rho \nu$$

де *а*-радіус частинки, ν – кінематична в'язкість рідини. $\eta(t)$ - випадковий Броунівський процес, що представляє собою сили випадкових зіткнень з молекулами рідини. За означенням броунівського руху всі напрямки зіткнень рівноймовірні, тому матсподівання випадкової величини $\overline{\eta(t)} = 0$. Сили, що діють на частинку в різні моменти часу рівноймовірні, тому немає кореляції, між випадковими величинами $\overline{\eta(t)\eta(t')} = 2D\gamma^2\delta(t-t')$, тут $\delta(t)$ - дельта функція Дірака. Тобто, середній добуток сил в довільні різні моменти часу дорівнює нулю. В той же час середній квадрат сили є постійною додатною величиною.

Якщо припустити, що маса частинки настільки мала, що можна знехтувати інерційним членом, то рівняння (2.2) спроститься до вигляду:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{\gamma}\eta(t) \tag{2.3}$$

З рівняння (2.3) слідує, що якщо знехтувати масою частинки, швидкість частинки пропорційна випадковій силі, що на неї діє. Таке рівняння є схемою випадкових блукань, де випадкове переміщення в будь-який момент часу не залежить від переміщення в попередні моменти часу. Рівняння (2.3) можна проінтегрувати, щоб отримати випадкову траєкторію [67]:

$$x(t) = \frac{1}{\gamma} \int_{0}^{t} \eta(t') dt'$$
 (2.4)

Так як середнє випадкової величини $\overline{\eta(t)} = 0$, то і матсподівання траєкторії

 $\overline{x(t)} = 0$. Середній квадрат зміщення визначається як

$$\overline{x^{2}(t)} = \frac{1}{\gamma^{2}} \int_{0}^{t} \int_{0}^{t} \overline{\eta(t')\eta(t'')} dt' dt'', \qquad (2.5)$$

Звідки, скориставшись незалежністю випадкових величин $\eta(t')$, $\eta(t'')$, отримаємо вираз для середнього квадрату зміщення частинки протягом часу t

$$\overline{x^2} = 2Dt,$$

що співпадає з виразом (2.1), тобто *D* є коефіцієнтом дифузії, для якого можна використовувати формулу Ейштейна-Стокса [115] для випадкових рухів, що викликані молекулярними силами:

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\rho\nu a},\tag{2.6}$$

де k_B – стала Больцмана, T - температура.

2.1.3 Рівняння Фоккера-Планка

Броунівський рух частинки можна описувати не у вигляді стохастичного рівняння траєкторії частинки, а у вигляді функції розподілу положення частинки f(x,t) такої, що ймовірність знаходження частинки в інтервалі $[x; x + \Delta x]$ протягом інтервалу часу $[t; t + \Delta t]$ дорівнює:

$$p = f(x, t)\Delta x\Delta t$$

Причому

$$\int_{-\infty}^{-\infty} f(x,t) dx = 1$$

у будь-який момент часу.

Розглянемо одновимірне рівняння Ланжевена, що не враховує інерцію частинки у вигляді:

$$\frac{dx}{dt} = u(x,t) + \xi(t)\sqrt{2D}$$
(2.7)

Тут u(x,t)-детерміноване поле швидкості, що переносить частинку, $\xi(t)$ стандартний вінерівський процес (тобто $\xi(t), \xi(s)$ є незалежними та $\xi(t) - \xi(s)$ мають нормальний розподіл), такий, що $\overline{\xi^2(t)} = t$. Для такого стохастичного рівняння відповідне рівняння для щільності ймовірності розподілу положення частинки виглядає так:

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial u(x,t)f(x,t)}{\partial x} + \frac{\partial^2 D(x,t)f(x,t)}{\partial x}$$
(2.8)

Рівняння (2.8)– рівняння Фоккера-Планка для стохастичного процесу (2.7). Тут розглядається випадок змінного в просторі і часі коефіцієнту дифузії, це буде важливо для подальшого розгляду чисельних методів розв'язання цього рівняння та для порівняння з рівнянням адвекції-дифузії.

2.1.4 Рівняння переносу та дифузії

Розглянемо тепер процес дифузії як процес перемішування і взаємного проникнення атомів чи молекул одної речовини з іншою. Дифузія призводить до виникнення руху у речовині при неоднорідному розподілі частинок і призводить з часом до їх рівномірного розподілу. Згідно першого закону Фіка, потік речовини, що проходить через деякий переріз пропорційний градієнту концентрації цієї речовини та площі перерізу. Потік направлений в сторону зменшення концентрації:

$$J = -DS\frac{dC}{dx} \tag{2.9}$$

тут *S*– площа уявного перерізу, *D*– коефіцієнт дифузії. Якщо на дифундуючи частинки речовини діє зовнішня сила та вони рухаються з середньою швидкістю *u*, тоді питомий потік на одиницю площі дорівнює

$$J = -D\frac{dC}{dx} + uC \tag{2.10}$$

З першого закону Фіка шляхом розгляду балансу речовини в елементі Δx протягом часу Δt , та переходячи до границі при $\Delta x, \Delta t \to 0$, можна отримати рівняння дифузії:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial u(x,t)C(x,t)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}D(x,t)\frac{\partial C(x,t)}{\partial x}$$
(2.11)

Рівняння дифузії тут записано в одновимірному вигляді та із змінним в часі і просторі коефіцієнтом дифузії. Рівняння (2.8) описує одновимірну функцію розподілу однієї частинки в полі швидкості та змінного коефіцієнту дифузії. Якщо n частинок мають щільність розподілу f(x,t) то середня концентрація буде дорівнювати $\bar{C}(x,t) = nm_p f(x,t)$, де m_p – масса або заряд однієї частинки. Домноживши рівняння (2.8) на nm_p отримаємо рівняння переносу для середньої концентрації речовини. Якщо коефіцієнт дифузії є постійним, то рівняння Фоккера-Планка (2.8), що домножене на масу частинки та рівняння дифузії (2.11) збігаються. Однак в загальному випадку вони не ідентичні.

Перепишемо рівняння дифузії (2.11) таким чином, щоб привести його до вигляду рівняння (2.8):

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(u(x,t) + \frac{\partial D(x,t)}{\partial x} \right) C(x,t) + \frac{\partial^2 D(x,t) C(x,t)}{\partial x^2}$$
(2.12)

Рівняння (2.12) відповідає рівнянню Фоккера-Планка (2.8) із зміненою детермінованою частиною ($u + \frac{\partial D}{\partial x}$ замість u). По модифікованому рівнянню Фоккера-Планка можна відтворити відповідний стохастичний процес:

$$\frac{dx}{dt} = u(x,t) + \frac{\partial D(x,t)}{\partial x} + \xi(t)\sqrt{2D(x,t)}$$
(2.13)

Розглянемо тепер перенос частинок турбулентним потоком. Обмежимось, як і раніше одновимірним випадком. Знехтувавши молекулярною дифузією запишемо рівняння переносу:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial u C}{\partial x} \tag{2.14}$$

Представивши поля концентрації та швидкості як суму середніх детермінованих величин $\overline{u}, \overline{C}$ та випадкових відхилень u', C'. Тоді, зробивши усереднення по ансамблю, отримаємо рівняння для турбулентного переносу:

$$\frac{\partial \overline{C}}{\partial t} = -\frac{\partial \overline{u}\overline{C}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{u'C'}}{\partial x}$$
(2.15)

Для використання рівняння (2.15) необхідно визначити кореляцію $\overline{u'C'}$. Одним із поширених замикань теорії турбулентності є напівемпірична теорія, що основана на гіпотезі Бусінеска [35], яка пов'язує кореляції флуктуацій швидкості та концентрації з градієнтом середньої концентрації:

$$\overline{u'C'} = -D\frac{\partial\overline{C}}{\partial x}$$

Де *D*– коефіцієнт турбулентної дифузії. В рамках цієї гіпотези рівняння турбулентного переносу перетворюється на рівняння дифузії

$$\frac{\partial \overline{C}}{\partial t} = -\frac{\partial \overline{u}\overline{C}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}D\frac{\partial \overline{C}}{\partial x}$$
(2.16)

відносно середніх полів концентрації і течії з коефіцієнтом турбулентної дифузії замість молекулярної. Якщо відомий коефіцієнт турбулентної дифузії, то для моделювання рівняння (2.16) методом частинок можна застосувати рівняння Ланжевена (2.13) та будь-яку з чисельних схем його розв'язку.

Відомо, що рівняння дифузії не досить коректно працює в околі діючого або миттєвого джерела забруднення ([180] з посиланням на [316]), тому що складно визначити коефіцієнт дифузії в таких умовах. Також відомо, що траєкторії частинок в турбулентному потоці – криволінійні криві, сполучені раптовими змінами напрямків ([296], рис. 2.3). Тобто, рухи частинок не рівноймовірні в кожний момент часу. Деякий час частинка може зберігати напрямок свого руху, або незначно відхилятися від нього. Це означає, що, строго кажучи, на маленьких часових інтервалах процес турбулентної дифузії не є марківським, який не залежить від стану системи в попередні моменти



Рисунок 2.3: Експериментальні траєкторії частинок, які на початку знаходилися на відстані 2мм одна від одної [242]

часу, а залежить тільки від стану систему в поточний момент часу. В роботі [315] обговорюються методи моделювання турбулентного перемішування в атмосферному пограничному шарі для різних режимів турбулентності в залежності від характеристик турбулентності. В нашій роботі вважається, що рівняння адвекції-дифузії описує процес турбулентного переносу та перемішування з достатньою точністю. Основними параметрами є змінне в просторі поле швидкостей та коефіцієнта турбулентного перемішування.

В наступних розділах більш детально розглядаються чисельні схеми, що приводять до розв'язку рівняння переносу та дифузії методом частинок в одномірному та загальному випадках.

2.1.5 Методи випадкових блукань для моделювання процесу дифузії

Для чисельної реалізації рівняння (2.13) необхідно використовувати генератор випадкових чисел, щоб відтворити випадковий процес $\xi(t)$. Так як $\xi(t)$ стандартний вінерівський процес, то в кожний момент часу $\xi(t)$ є випадковою величиною з нульовим матсподіванням та середньоквадратичним відхиленням, рівним 1. Для чисельного розв'язку цього рівняння при часовій дискретизації для моделювання такого процесу можна використовувати на кожному часовому кроці випадкову величину, що має будь-який розподіл з нульовим матсподіванням та дисперсією 1. Наприклад, якщо r нормально розподілена величина з параметрами N(0,1), то чисельний алгоритм може виглядати так:

$$x^{n+1} = x^n + \left(u + \frac{\partial D}{\partial x}\right)\Delta t + r\Delta t \sqrt{2D/\Delta t}$$
(2.17)

Якщо *r* – випадкова величина, що рівномірно розподілена на [-1;1], то зробивши масштабування цієї величини, щоб забезпечити дисперсію рівну 1, отримаємо чисельний алгоритм з іншим коефіцієнтом:

$$x^{n+1} = x^n + \left(u + \frac{\partial D}{\partial x}\right)\Delta t + r\Delta t \sqrt{6D/\Delta t}$$
(2.18)

Алгоритми (2.17) та (2.18) є прикладами схеми випадкових блукань для чисельного розв'язку методом частинок рівняння адвекції-дифузії із змінним в просторі і часі коефіцієнтом дифузії.

Алгоритми випадкових блукань можуть будуватися різними методами [221]. Головна особливість методу, те, що положення частинок у наступні моменти часу визначається випадковим чином. Що, власне, випливає з назви методу. Теорія випадкових блукань викладена в [67], а короткий огляд практичних реалізацій при застосуванні до задач біодифузії (перемішування біологічними організмами) викладений в [221]. Одною з найпростіший схем випадкових блукань є схема "п'яного матроса", в якій в кожний дискретний момент часу робиться крок рівної довжини, випадковим є напрямок пересування. В такому випадку положення частинки розподілене на колі навколо початкового положення частинки. Якщо довжина стрибку має певний розподіл, то положення частинки стає розподіленим по деякій області. Різні методи побудови схем випадкових блукань для розв'язку рівняння переносу та дифузії обговорюються в наступних підрозділах.

2.1.6 Випадкові блукання з неперервним часом

В загальному випадку для моделювання процесу дифузії використовують метод випадкових блукань з неперервним часом (СТRW - Continuous Time Random Walk), що вперше був представлений в роботі [227] як узагальнення фізичного процесу дифузії. Випадкові блукання з неперервним часом дозволяють описати процеси аномальної дифузії: випадки супердифузії та субдифузії. Аномальна дифузія – це процес дифузії з нелінійною залежністю від часу, на відміну від "нормальної" дифузії, коли середньоквадратичне відхилення пропорційне часу $\sigma^2 \sim Dt$. При аномальній дифузії ця залежність описується степеневим законом $\sigma^2 \sim Dt^{\alpha}$. При $\alpha < 1$ говорять про субдифузію, при $\alpha > 1$ явище називають супердифузією, яка виникає, наприклад, при розповсюдженні рідини в неоднорідних пористих середовищах [20,174]. При цьому супердифузія спостерігається, якщо проникність зростає зі збільшенням насиченості. Якщо ж, навпаки, проникність зменшується, то відбувається субдифузія.

У механізмі випадкового блукання з неперервним часом випадковим є не тільки зміщення частинки в кожний момент часу, але й час очікування між

стрибками. Такі моделі застосовуються, наприклад, коли події перемішування відбуваються дуже нерегулярно, та інтервали між подіями можуть бути великі, як, наприклад при біотурбації [82]. Випадковий час очікування та, власне, випадкове зміщення мають певний розподіл. Тоді траєкторію руху частинки можна представити у вигляді суми випадкових зміщень:

$$x_N = x_{N-1} + J_N = x_0 + \sum_{i=1}^N J_i$$
(2.19)

А загальний час складається з суми часів очікування.

$$t_N = t_{N-1} + J_N = t_0 + \sum_{i=1}^N t_i$$
(2.20)

В загальному випадку вважається, що час очікування та зміщення частинки, що в час t знаходиться в положенні x має спільну функцію розподілу $\Psi(x',t';x,t)$, таку, що

$$\iint_{0 \to \infty}^{\infty} \Psi(x', t'; x, t) \mathrm{d}x' \mathrm{d}t' = 1$$
(2.21)

Якщо випадкові величини та незалежні, а їх розподіл не залежить від поточного положення та часу, то

$$\Psi(x',t';x,t) = \Psi_{\tau}(t')\Psi_{\lambda}(x') \tag{2.22}$$

де $\Psi_{\tau}(t'), \Psi_{\lambda}(x')$ розподіл часу очікування та довжини стрибка, що повністю визначають траєкторію частинки.

Якщо в початковий момент часу розподіл концентрації якоїсь речовини був $C_0(x)$, то в роботі [221] показано, що рівняння для еволюції концентрації виглядатиме так:

$$C(x,t) = C_0(x) \left(1 - \int_0^t \Psi_\tau(t') dt' \right) + \int_{0-\infty}^{t} \int_{-\infty}^\infty \Psi_\tau(t') \Psi_\lambda(x') C(x - x', t - t') dx' dt'$$
(2.23)

Середній час очікування, середнє зміщення та середньоквадратичне відхилення визначаються як

$$\bar{t} = \int_0^\infty t' \Psi_\tau(t') dt'$$

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^\infty x' \Psi_\lambda(x') dx'$$

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^\infty (x' - \bar{x})^2 \Psi_\lambda(x') dx'$$

(2.24)

З цього еволюційного рівняння можна отримувати конкретні схеми випадкових блукань, підставляючи відомі вирази для розподілів $\Psi_{\tau}(t'), \Psi_{\lambda}(x')$. Наприклад, якщо схема з детермінованим часовим кроком t_c , то $\Psi_{\tau}(t') = \delta(t' - t_c)$, і тоді рівняння еволюції концентрації для кожного часового кроку буде таким:

$$C_{N+1}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{\lambda}(x') C_N(x-x') \mathrm{d}x'$$
(2.25)

В роботі [221] було проведено класифікація режимів дифузії в залежності від вигляду функцій $\Psi_{\tau}(t'), \Psi_{\lambda}(x')$. У випадку, якщо $\Psi_{\tau}, \Psi_{\lambda}$ мають вигляд дельта функції або мають скінчене середнє та середньоквадратичне відхилення, то такий процес описує "нормальну" дифузію. Якщо Ψ_{λ} має нескінченну дисперсію, то в такий спосіб можна описати супердифузію. Якщо Ψ_{τ} має нескінченне середнє, то маємо процесс субдифузії. В роботі [221] було показано, що, якщо мати справу з нормальною дифузією, то через час $t \gg \bar{t}$ згідно закону великих чисел розподіл концентрації збігається до розв'язку рівняння дифузії, з коефіцієнтом дифузії, що визначається через середній час очікування та дисперсію зміщення:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\sigma^2}{\bar{t}} \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} \tag{2.26}$$

В нашій роботі не розглядаються процеси аномальної дифузії. Чисельні методи, що використовуються для розрахунків, основані на схемі випадкових

блукань з детермінованим часом очікування. Основна увага приділяється методам побудови функції розподілу зміщення для розв'язку рівняння адвекціїдифузії в неоднорідному полі швидкості та при неоднорідному коефіцієнті перемішування.

2.1.7 Одновимірний процес випадкових блукань

В роботах [146],[307] було показано, що чисельний алгоритм (2.17) або (2.18), хоча і призводять до правильного зміщення центра мас частинки (матсподівання), але некоректно відтворює дисперсію розподілу, що має відповідати рівнянню адвекції-дифузії при неоднорідній дифузії. В роботах [146],[307] отримано, що, якщо у випадку, коли коефіцієнт дифузії змінюється лінійно в околі положення частинки $D = D_0 + xD'_0$, то коректний алгоритм має виглядати так:

$$\Delta x = (u + D'_0)\Delta t + r\Delta t \sqrt{2D(x_0 + (u + D'_0)t/2)/\Delta t}$$
(2.27)

Тобто, коефіцієнт дифузії має бути розрахований не в точці де знаходилась частинка в попередній момент часу, а в точці посередині шляху детермінованого зміщення центру масс.

Узагальнимо цей підхід для випадку неоднорідної швидкості. Для цього розрахуємо моменти розподілу частинки, що рухається в змінному полі швидкості і коефіцієнту дифузії згідно одновимірного рівняння адвекції-дифузії. Рівняння (2.11) записано в консервативній формі (за умови $\partial u/\partial x = 0$). Але для змінної швидкості в одновимірному випадку використаємо рівняння адвекції-дифузії в неконсервативній формі:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u\frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}D\frac{\partial C}{\partial x}$$
(2.28)

для спрощення припустимо, що u, D не залежать від часу. Будемо шукати

моменти розподілу

$$M_n = \int_{-\infty}^{\infty} x^n C dx \tag{2.29}$$

Домножимо рівняння 2.11 на x^n та проінтегруємо в межах $[-\infty;\infty]$

$$\frac{dM_n}{dt} = -\int_{-\infty}^{\infty} x^n u \frac{\partial C}{\partial x} dx + \int_{-\infty}^{\infty} x^n \frac{\partial}{\partial x} D \frac{\partial C}{\partial x} dx \qquad (2.30)$$

Проінтегрувавши два рази частинами, та враховуючи, що $x^n C, x^n \partial C / \partial x$ прямує до нуля на нескінченності, отримаємо

$$\frac{dM_n}{dt} = n \int_{-\infty}^{\infty} x^{n-1} (u+D') C dx + \int_{-\infty}^{\infty} x^n u' C dx + n(n-1) \int_{-\infty}^{\infty} x^{n-2} D C dx \quad (2.31)$$

Якщо, ми розглядаємо розподіл окремої частинки, то відповідні початкові умови є такими:

$$C(x,0) = \delta(x)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} C(x,0)dx = 1$$

$$M_1(0) = 0$$

$$M_2(0) = 0$$
(2.32)

Та всі моменти вищих порядків дорівнюють нулеві. Нас будуть цікавити тільки перші два моменти, які визначають матсподівання та дисперсію зміщення частинки. Розкладемо швидкість та коефіцієнт дифузії в ряд Тейлора в околі початкового положення точки $x = x_0$, та залишимо лише перші два члени:

$$u(x) = u_0 + u'_0 x$$

$$D(x) = D_0 + D'_0 x$$
(2.33)

Отримаємо рівняння для перших двох моментів:

$$\frac{dM_1}{dt} = u_0 + D'_0 + 2u'_0 M_1$$

$$\frac{dM_2}{dt} = 2(u_0 + D'_0)M_1 + 3u'_0 M_2 + 2D_0 + 2D'_0 M_1$$
(2.34)

Перше рівняння можна розв'язати незалежно, з відповідними початковими умовами розв'язок має вигляд:

$$M_1(t) = \frac{u_0 + D'_0}{2u'_0} \left(e^{2u'_0 t} - 1 \right)$$
(2.35)

Підставляючи отриманий розв'язок в друге рівняння системи та інтегруючи його з початковою умовою $M_2(0) = 0$, отримаємо:

$$M_{2}(t) = \frac{2D_{0}}{3u_{0}'} \left(e^{3u_{0}'t} - 1\right) - \frac{(u_{0} + D_{0}')^{2}}{12u_{0}'^{2}} \left(e^{u_{0}'t} - 1\right)^{2} \left(2e^{u_{0}'t} + 1\right) + \frac{D_{0}'(u_{0} + D_{0}')}{3u_{0}'^{2}} \left(e^{u_{0}'t} - 1\right)^{2} \left(2e^{u_{0}'t} + 1\right)$$

$$(2.36)$$

Тепер можна знайти дисперсію розподілу

$$M_{2} - M_{1}^{2} = \frac{2\left(e^{3u'_{0}t} - 1\right)}{3u'_{0}} \left(D_{0} + D'_{0}M_{1}\frac{\left(2e^{u'_{0}t} + 1\right)}{\left(e^{u'_{0}t} + 1\right)\left(e^{2u'_{0}t} + e^{u'_{0}t} + 1\right)} - \frac{\left(u_{0} + D'_{0}\right)^{2}\left(e^{u'_{0}t} - 1\right)^{3}\left(3e^{u'_{0}t} + 1\right)}{8u'_{0}^{2}\left(e^{3u'_{0}t} - 1\right)}\right)$$
(2.37)

Легко пересвідчитись, що переходячи до границі при $u'_0 \to 0$, отримаємо формулу, що було отримано в роботі [146]

$$M_2 - M_1^2 = 2D(M_1/2)t (2.38)$$

Тобто рівняння (2.37) є узагальненням одновимірного рівняння (2.38) для випадку змінної в просторі швидкості. В одновимірному випадку змінна швидкість означає, що не виконується умова нерозривності ($\partial u/\partial x = 0$). Такі задачі можуть виникати, якщо частинка, що рухається не є пасивною домішкою в потоці. Наприклад, якщо частинка має прискорення внаслідок суттєвої маси, якою не можна знехтувати. Або при моделюванні осідання частинок зв'язних намулів, коли відбувається процес флокуляції. При флокуляції швидкість осідання частинок може не бути постійною, а залежати від локальної концентрації намулів та характеристик турбулентності. В такому випадку чисельна схема реалізації стохастичного процесу виглядатиме:

$$\Delta x = M_1(\Delta t) + R\sqrt{M_2(\Delta t) - M_1^2(\Delta t)}$$
(2.39)

Де *R*– випадкова величина з нульовим матсподіванням та одиничною дисперсією. Таким чином побудовано новий алгоритм, що задається формулами (2.35,2.37,2.39) для моделювання одновимірного переносу та дифузії в неоднорідному полі течії та коефіцієнта перемішування.

2.1.8 Тривимірна схема випадкових блукань

Для того, щоб побудувати чисельну схему випадкових блукань з незміщеною дисперсією, розглянемо тепер тривимірне рівняння адвекції-дифузії в консервативному вигляді та методи його розв'язання лагранжевим методом

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial u C}{\partial x} - \frac{\partial v C}{\partial y} - \frac{\partial w C}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} D \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} D \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} D \frac{\partial C}{\partial z}$$
(2.40)

Тут C = C(x, y, z, t), u = u(x, y, z), v = u(x, y, z), w = u(x, y, z), D = D(x, y, z) Як і в одновимірному випадку будемо будувати такий розподіл положення кожної окремої частинки, щоб задовольнити рівність матсподівання та дисперсії розв'язку рівняння (2.40). Введемо позначення для моментів тривимірної випадкової величини

$$M_{i,j,k} = \iiint_{-\infty - \infty}^{\infty \infty} x^i y^j z^k C \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \, \mathrm{d}z \tag{2.41}$$

Тоді, домножуючи обидві частини рівняння (2.40) на $x^i y^j z^k$ отримаємо систему звичайних диференціальних рівнянь для моментів розподілу випадкової величини:

$$\frac{\mathrm{d}M_{i,j,k}}{\mathrm{d}t} = i \iiint_{-\infty-\infty}^{\infty} x^{i-1}y^j z^k (u+D'_x)C \,\mathrm{d}x \,\mathrm{d}y \,\mathrm{d}z + j \iiint_{-\infty-\infty-\infty}^{\infty} x^i y^{j-1} z^k (v+D'_y)C \,\mathrm{d}x \,\mathrm{d}y \,\mathrm{d}z + k \iiint_{-\infty-\infty-\infty}^{\infty} x^i y^j z^{k-1} (w+D'_z)C \,\mathrm{d}x \,\mathrm{d}y \,\mathrm{d}z + i(i-1) \iiint_{-\infty-\infty-\infty}^{\infty} x^{i-2}y^j z^k DC \,\mathrm{d}x \,\mathrm{d}y \,\mathrm{d}z + j(j-1) \iiint_{-\infty-\infty-\infty}^{\infty} x^i y^{j-2} z^k DC \,\mathrm{d}x \,\mathrm{d}y \,\mathrm{d}z + k(k-1) \iiint_{-\infty-\infty-\infty}^{\infty} x^i y^j z^{k-2} DC \,\mathrm{d}x \,\mathrm{d}y \,\mathrm{d}z$$
(2.42)

Для того, щоб знайти інтеграли в рівняннях (2.42), розкладемо невідомі функції u(x, y, z), v(x, y, z), w(x, y, z), D(x, yz) в ряди Маклорена:

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{n! \, m! \, l!} \frac{\partial^{(n+m+l)}}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l} u(0,0,0) x^n y^m z^l$$

$$v = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{n! \, m! \, l!} \frac{\partial^{(n+m+l)}}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l} v(0,0,0) x^n y^m z^l$$

$$D = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{n! \, m! \, l!} \frac{\partial^{(n+m+l)}}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l} D(0,0,0) x^n y^m z^l$$

$$w = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{n! \, m! \, l!} \frac{\partial^{(n+m+l)}}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l} w(0,0,0) x^n y^m z^l$$

$$D = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{n! \, m! \, l!} \frac{\partial^{(n+m+l)}}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l} D(0,0,0) x^n y^m z^l$$

Тепер, підставляючи вирази (2.43) в (2.42) отримаємо загальні рівняння для знаходження моментів:

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}M_{i,j,k}}{\mathrm{d}t} &= i\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{n!\,m!\,l!}\frac{\partial^{(n+m+l)}u_0}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l}M_{i+n-1,j+m,k+l} + \\ &\quad i\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{n}{n!\,m!\,l!}\frac{\partial^{(n+m+l)}D_0}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l}M_{i+n-2,j+m,k+l} + \\ &\quad j\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{n!\,m!\,l!}\frac{\partial^{(n+m+l)}v_0}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l}M_{i+n,j+m-1,k+l} + \\ &\quad j\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{m}{n!\,m!\,l!}\frac{\partial^{(n+m+l)}D_0}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l}M_{i+n,j+m-2,k+l} + \\ &\quad k\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{n!\,m!\,l!}\frac{\partial^{(n+m+l)}w_0}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l}M_{i+n,j+m,k+l-1} + \\ &\quad k\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{n!\,m!\,l!}\frac{\partial^{(n+m+l)}D_0}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l}M_{i+n,j+m,k+l-2} + \\ &\quad i(i-1)\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{n!\,m!\,l!}\frac{\partial^{(n+m+l)}D_0}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l}M_{i+n,j+m,k+l} + \\ &\quad j(j-1)\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{n!\,m!\,l!}\frac{\partial^{(n+m+l)}D_0}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l}M_{i+n,j+m,k+l-2} + \\ &\quad k(k-1)\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{n!\,m!\,l!}\frac{\partial^{(n+m+l)}D_0}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l}M_{i+n,j+m,k+l-2} \end{aligned}$$

Для того, щоб знайти матсподівання да дисперсію у напрямку осей, достатньо знайти моменти у напрямку цих осей ($M_{i,0,0}, M_{0,j,0}, M_{0,0,k}$), для яких можна отримати простіші вирази:

$$\frac{\mathrm{d}M_{i,0,0}}{\mathrm{d}t} = i\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{n!\,m!\,l!}\frac{\partial^{(n+m+l)}u_0}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l}M_{i+n-1,m,l} + i(i-1)\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{n}{n!\,m!\,l!}\frac{\partial^{(n+m+l)}D_0}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l}M_{i+n-2,m,l} + i(i-1)\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{n!\,m!\,l!}\frac{\partial^{(n+m+l)}D_0}{\partial x^m \partial y^l}M_{i+n-2,m,l}$$
(2.45)

$$\frac{\mathrm{d}M_{0,j,0}}{\mathrm{d}t} = j \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{n! \, m! \, l!} \frac{\partial^{(n+m+l)} v_0}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l} M_{n,j+m-1,l} + j \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{m}{n! \, m! \, l!} \frac{\partial^{(n+m+l)} D_0}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l} M_{n,j+m-2,l} + j(j-1) \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{n! \, m! \, l!} \frac{\partial^{(n+m+l)} D_0}{\partial x^m \partial y^l} M_{n,j+m-2,l}$$
(2.46)

$$\frac{\mathrm{d}M_{0,0,k}}{\mathrm{d}t} = k \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{n! \, m! \, l!} \frac{\partial^{(n+m+l)} w_0}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l} M_{n,m,k+l-1} + k \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{n! \, m! \, l!} \frac{\partial^{(n+m+l)} D_0}{\partial x^n \partial y^m \partial z^l} M_{n,m,k+l-2} + k(k-1) \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{n! \, m! \, l!} \frac{\partial^{(n+m+l)} D_0}{\partial x^m \partial y^l} M_{n,m,k+l-2}$$
(2.47)

Формули (2.44,2.45,2.46,2.47) є точними та дозволяють обчислити моменти високих порядків якщо відомі всі похідні від швидкості течії та коефіцієнту дифузії. $M_{1,0,0}, M_{0,1,0}, M_{0,0,1}$ – х,у,г координати положення центру мас. $D[x] = M_{2,0,0} - M_{1,0,0}^2$ – дисперсія у напрямку х, $D[y] = M_{0,2,0} - M_{0,1,0}^2$ – дисперсія у напрямку у, $D[z] = M_{0,0,2} - M_{0,0,1}^2$ – дисперсія у напрямку z. Отримаємо тепер наближені вирази для двовимірної чисельної схеми. Щоб знайти матсподівання та дисперсії двовимірної випадкової величини нас будуть цікавити моменти $M_{1,0}, M_{0,1}, M_{2,0}, M_{0,2}, M_{1,1}$. Враховуючи, що $M_{0,0} = 1$, випишемо рівняння для цих моментів відкидаючи члени вище другого порядку в рядах Маклорена:

$$\frac{dM_{1,0}}{dt} = u_0 + D'_x + \frac{\partial}{\partial x} (u_0 + D'_x) M_{1,0} + \frac{\partial}{\partial y} (u_0 + D'_x) M_{0,1}
\frac{dM_{0,1}}{dt} = v_0 + D'_y + \frac{\partial}{\partial x} (v_0 + D'_y) M_{1,0} + \frac{\partial}{\partial y} (v_0 + D'_y) M_{0,1}
\frac{dM_{1,1}}{dt} = (u_0 + D'_x) M_{0,1} + (v_0 + D'_y) M_{1,0} + \frac{\partial}{\partial x} (v_0 + D'_y) M_{2,0}
+ \frac{\partial}{\partial y} (u_0 + D'_x) M_{0,2} + \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}\right) M_{1,1}
\frac{dM_{2,0}}{dt} = 2D_0 + 2(u_0 + 2D'_x) M_{1,0} + 2u'_x M_{2,0} + 2D'_y M_{0,1} + 2u'_y M_{1,1}
\frac{dM_{0,2}}{dt} = 2D_0 + 2(v_0 + 2D'_y) M_{0,1} + 2v'_y M_{0,2} + 2D'_x M_{1,0} + 2v'_x M_{1,1}$$
(2.48)

Перші два рівняння можуть бути розв'язані незалежно від інших і є рівняннями траєкторії руху центру мас. Останній член третього рівняння обертається в нуль внаслідок рівняння нерозривності. В загальному випадку інтегрування даної системи виглядає дуже громіздким, тому для практичного використання можна скористатися чисельними схемами розв'язання системи лінійних диференціальних рівнянь першого порядку. В деяких окремих випадках простих течій рівняння можуть бути проінтегровані аналітично для аналізу точності чисельної схеми.

Після того, як знайдений розв'язок системи (2.48) через часовий крок Δt , нове положення частинки слід отримати згідно алгоритму:

$$x^{n+1} = x^n + M_{1,0}(\Delta t) + R\sqrt{M_{2,0}(\Delta t) - M_{1,0}^2(\Delta t)}$$

$$y^{n+1} = y^n + M_{0,1}(\Delta t) + R\sqrt{M_{0,2}(\Delta t) - M_{0,1}^2(\Delta t)}$$
(2.49)

Тут *R*– будь-яка випадкова величина, що має нульове матсподівання та одиничну дисперсію. Використовуючи викладений в цьому розділі підхід можна отримати схеми більш високих порядків, залишаючи більше членів нескінченних рядів та знаходячи моменти вищих порядків. В загальному випадку, при неоднорідному полі швидкості та коефіцієнті дифузії, розподіл випадкової величини може стати несиметричним, і потрібно розраховувати асиметрію, ексцес розподілу, та генерувати випадкову величину з відповідним законом розподілу. Якщо ж задовольнитися тільки другими моментами та лінійним наближенням невідомих функцій, то можна провести моделювання за допомогою симетричних випадкових величин.

2.1.9 Схема випадкових блукань в горизонтально однорідному потоці

В попередніх параграфах, розглянуто метод побудови загальної схеми випадкових блукань з незміщеною дисперсією в одно- дво- та тривимірних випадках. Для одновимірного випадку отримано аналітичний розв'язок у випадку, якщо швидкість та коефіцієнт дифузії є лінійними функціями координати в околі точки положення частинки. В цьому параграфі знаходиться інший аналітичний одновимірний розв'язок для матсподівання та дисперсії для випадку квадратичного коефіцієнту дифузії. Для цього розглянемо одновимірну задачу, в якій коефіцієнт дифузії описується квадратичною функцією, тобто має скінчену другу похідну у всій області моделювання. Така задача виникає, наприклад, при розгляді переносу завислих намулів в горизонтально однорідному каналі. Відповідна постановка ейлерової задачі буде мати вигляд

$$\frac{\partial C}{\partial t} + w_s \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial C}{\partial z},$$

$$z = a - H : K_z \frac{\partial C}{\partial z} = w_s C_a;$$

$$z = 0 : K_z \frac{\partial C}{\partial z} = w_s C;$$

$$t = 0 : C = 0.$$
(2.50)

де w_s – постійна швидкість осідання піщинок, $K_z = K_z(z)$ – коефіцієнт вертикальної дифузії. Профіль коефіцієнту вертикальної дифузії заданий у вигляді:

$$K(z) = \kappa u_* z \left(1 - \frac{z}{H} \right).$$

Рівняння (2.50) має аналітичний стаціонарний розв'язок (профіль Рауза).

$$C(z) = C_a \left(\frac{h-z}{z} \frac{a}{h-a}\right)^{\frac{w_s}{\kappa u_*}}.$$
(2.51)

Для розв'язку рівняння 2.50 методом частинок знайдемо вирази для моментів розподілу частинок застосувавши формули 2.42. Розв'яжемо спочатку задачу використавши змістивши початок координат в точку положення частинки z_0 та розклавши коефіцієнт дифузії в ряд Маклорена в околі положення точки:

$$K(z) = K_0 + K'_0 z + \frac{K''_0}{2} z^2$$
$$K_0 = \kappa u_* z_0 \left(1 - \frac{z_0}{H}\right), \qquad K'_0 = \kappa u_* \left(1 - \frac{2z_0}{H}\right), \qquad K''_0 = -2\frac{\kappa u_*}{H}$$

Отримаємо рівняння для перших двох моментів:

$$\frac{\mathrm{d}M_1}{\mathrm{d}t} = -w_s + K_0' + K_0'' M_1$$

$$\frac{\mathrm{d}M_2}{\mathrm{d}t} = 2(-w_s + K_0')M_1 + 3K_0'' M_2 + 2K_0' M_1 + 2K_0$$
(2.52)

Розв'язавши систему з початковими умовами $M_1(0) = M_2(0) = 0$, отримаємо розв'язки для середнього зміщення та дисперсії:

$$M_1(t) = \frac{-w_s + K'_0}{K''_0} \left(e^{K''_0 t} - 1 \right)$$
(2.53)

$$M_{2}(t) - M_{1}^{2}(t) = \frac{2(e^{3K_{0}^{\prime\prime}t} - 1)}{3K_{0}^{\prime\prime}} \cdot \left[K_{0} + K_{0}^{\prime}\frac{M_{1}}{2}\frac{(e^{K_{0}^{\prime\prime}t} - 1)(e^{K_{0}^{\prime\prime}t} + 2)}{e^{3K_{0}^{\prime\prime}t} - 1} + K_{0}^{\prime\prime}\frac{M_{1}^{2}}{2}\frac{(e^{K_{0}^{\prime\prime}t} - 1)}{e^{3K_{0}^{\prime\prime}t} - 1}\right]$$
(2.54)

Або, якщо використати розкладення коефіцієнту дифузії в ряд Маклорена, то можна отримати більш компактний запис:

$$D(t) = M_2(t) - M_1^2(t) = \frac{2(e^{3K_0''t} - 1)}{3K_0''} \frac{K(z_1) + K(z_2)}{2}$$

$$z_{1,2} = M_1 \frac{e^{K_0''t} - 1}{2(e^{3K_0''t} - 1)} \left[2 + e^{K_0''t} (1 \pm \sqrt{3})\right]$$
(2.55)

У випадку квадратичної залежності коефіцієнту дифузії обчислення дисперсії не звелося до обчислення коефіцієнту дифузії в одній точці, як у випадку лінійного коефіцієнту. У випадку квадратичного K(z) обчислення дисперсії зводиться до обчислення значення коефіцієнту дифузії в двох точках. Обидві точки лежать у проміжку $z_{1,2} \in (0, M_1)$, тобто в проміжку від початкового положення до точки зміщення центру мас. В початкові моменти часу

$$z_{1,2} = \frac{M_1}{2} \left(1 \pm \frac{1}{\sqrt{3}} \right)$$

А при прямуванні часу до нескінченності дві точки збігаються до одного значення:

$$\lim_{t \to \infty} z_{1,2} = M_1$$

Якщо підставити відомі вирази для коефіцієнту дифузії, то отримаємо такі рівняння для перших двох моментів:

$$\frac{dM_1}{dt} = -w_s + \kappa u_* - 2\frac{\kappa u_*}{H}M_1$$

$$\frac{dM_2}{dt} = (4\kappa u_* - 2w_s)M_1 - 6\frac{\kappa u_*}{H}M_2$$
(2.56)

Так як ми використали вираз для K_z як ряд Тейлора в околі точки z = 0, то початкові умови для моментів виглядають так:

$$M_1(0) = z, \qquad M_2(0) = z^2$$

Розв'язок цієї системи з відповідними початковими умовами виглядає таким

чином:

$$M_{1} = \frac{\kappa u_{*} - w_{s}}{2\kappa u_{*}}H + \left(z - \frac{\kappa u_{*} - w_{s}}{2\kappa u_{*}}H\right)e^{-2\frac{\kappa u_{*}}{H}t}$$

$$M_{2} = 2(2\kappa u_{*} - w_{s})\left[\frac{\kappa u_{*} - w_{s}}{12\kappa^{2}u_{*}^{2}}H^{2} + \left(\frac{zH}{4\kappa u_{*}} - \frac{\kappa u_{*} - w_{s}}{8\kappa^{2}u_{*}^{2}}H^{2}\right)e^{-2\frac{\kappa u_{*}}{H}t}\right] + \left(z^{2} - 2(2\kappa u_{*} - w_{s})\left[\frac{\kappa u_{*} - w_{s}}{24\kappa^{2}u_{*}^{2}}H^{2} + \frac{zH}{4\kappa u_{*}}\right]\right)e^{-6\frac{\kappa u_{*}}{H}t}$$

$$(2.57)$$

вираз для дисперсії $D = M_2 - M_1^2$ буде мати такий вигляд:

$$D(t) = \frac{\kappa^2 u_*^2 - w_s^2}{12\kappa^2 u_*^2} H^2 + \frac{w_s}{2\kappa u_*} \left(z - \frac{\kappa u_* - w_s}{2\kappa u_*} \right) e^{\frac{-2\kappa u_* t}{H}} - \left(z - \frac{\kappa u_* - w_s}{2\kappa u_*} \right)^2 e^{\frac{-4\kappa u_* t}{H}} + \left(z^2 - \frac{2\kappa u_* - w_s}{2\kappa u_*} H^2 \left(\frac{w_s - \kappa u_*}{6\kappa u_*} - \frac{z}{H} \right) \right) e^{\frac{-6\kappa u_* t}{H}}$$
(2.58)

З розв'язку видно, що при прямуванні часу до нескінченності матсподівання ти дисперсія приймають скінчені граничні значення:

$$\lim_{t \to \infty} M_1 = \frac{\kappa u_* - w_s}{2\kappa u_*} H, \qquad \lim_{t \to \infty} D = \frac{\kappa^2 u_*^2 - w_s^2}{12\kappa^2 u_*^2} H^2$$

Зміст значення матсподівання на нескінченності – це координата, в якій швидкість осідання піщинки врівноважується похідною від коефіцієнту дифузії.

Розв'язки (2.53-2.55) та (2.57-2.58) є еквівалентними. Формули (2.53-2.55) є зручним для застосування в чисельних моделях, тому що записані в системі координат, що рухається з частинкою та використовують значення функції та похідних в точці положення точки. У формулах (2.57-2.58) використовуються аналітичні вирази для функцій та дозволяють аналізувати залежність від фізичних величин.

2.1.10 Порівняння чисельних схем випадкових блукань різної точності

В цьому розділі досліджується застосування різних схем випадкових блукань на прикладі задачі про одновимірний перенос в горизонтально однорідному потоці, що був розглянутий в розділі 2.1.9. При моделюванні методом частинок, схеми випадкових блукань відрізняються між собою способом обчислення положення центру мас частинки через заданий час t, тобто перший момент розподілу M_1 , та дисперсії розподілу положення частинки D, що визначається через другий момент розподілу $D = M_2 - M_1^2$. Розглянемо такі чисельні схеми розрахунку параметрів розподілу при початковому положенні частинки в точці з координатою z_0 :

Перший спосіб. При зміщенні центру мас враховується тільки швидкість осідання. Для обчислення дисперсії використовується значення коефіцієнту дифузії в точці положення частинки

$$M_1 = z_0 - w_s t, \qquad D = 2K(z_0)t$$
 (2.59)

Ця схема є точною тільки для постійної швидкості осідання та коефіцієнту дифузії. Такий спосіб використовують моделі, що нехтують вертикальною неоднорідністю коефіцієнту дифузії, наприклад моделі [249,305].

Другий спосіб. При зміщенні центру мас враховується швидкість осідання та похідна коефіцієнту дифузії в точці положення частинки. Для обчислення дисперсії використовується значення коефіцієнту дифузії в точці положення частинки

$$M_1 = z_0 - w_s t + \frac{\mathrm{d}K(z_0)}{\mathrm{d}z}t, \qquad D = 2K(z_0)t$$
 (2.60)

Ця формула задає точне зміщення центру мас та наближену дисперсію у випадку постійної швидкості та при лінійному коефіцієнті дифузії. Такий підхід використовуються в таких моделях як [50, 273]





Рисунок 2.4: Залежність зміщення центру мас з часом при $w_s/\kappa u_* = 0.1$, z/H = 0.9

Рисунок 2.5: Дисперсія розподілу положення частинки з часом при $w_s/\kappa u_* = 0.1$, z/H = 0.9

Tpemiŭ cnociб. При зміщенні центру мас враховується швидкість осідання та похідна коефіцієнту дифузії в точці положення частинки. Для обчислення дисперсії використовується значення коефіцієнту дифузії в точці, шо зміщена на половину зміщення центру масс відносно початкового положення частинки

$$M_1 = z_0 - w_s t + \frac{\mathrm{d}K(z_0)}{\mathrm{d}z}t, \qquad D = 2K((M_1 + z_0)/2)t$$
 (2.61)

Ця схема є точною для постійної швидкості та лінійного коефіцієнту дифузії. Такий підхід використовується в алгоритмах, шо базується на роботах [146,307].

Четвертий спосіб. Зміщення центру мас та дисперсія задаються точними формулами (2.57,2.58). Ці формули виведені автором в представлені роботі та є точними для постійної швидкості та квадратичного коефіцієнту дифузії.

На рис. (2.4-2.15) показані обчислені зміщення центру мас частинки та дисперсії для чотирьох описаних чисельних підходів. Для відображення результатів у безрозмірних змінних було обрано такі масштаби. Для вертикаль-





Рисунок 2.6: Залежність зміщення центру мас з часом при $w_s/\kappa u_* = 0.1$, z/H = 0.5

Рисунок 2.7: Дисперсія розподілу положення частинки з часом при $w_s/\kappa u_* = 0.1$, z/H = 0.5

ної координати $z_* = z/H$, для часу $t_* = 1/K'' = H/(2\kappa u_*)$, для дисперсії – $D_* = \kappa u_* H/4$, що є максимальним значенням коефіцієнту дифузії. Графіки побудовані для різних значень параметра $R_* = w_s/\kappa u_*$, що показує відношення дії осідання до дифузійного переносу. При $R_* = 0.1$ домінуючим є дифузійний перенос, $R_* = 1$ обидва процеси рівнозначні, при $R_* = 10$ домінує процес осідання. На графіках цифрами 1, 2, 3, 4 позначені обчислені, виконані відповідною чисельною схемою.

З графіків та аналітичних розв'язків видно, що лінійними наближеннями можна користуватися при часових кроках $\Delta t \ll 1/K''$ при обчисленні центру мас положення частинки та $\Delta t \ll 1/3K''$ при обчисленні дисперсії. Якщо для значення K'' невідомий аналітичний вираз, а друга похідна оцінюється по шаблону з декількох вузлових значень коефіцієнту дифузії в околі точки розташування піщинки, то часовий крок треба обирати з умови, що зміщення центру мас M_1 не виходило за межі шаблону протягом одного ча-





Рисунок 2.8: Залежність зміщення центру мас з часом при $w_s/\kappa u_* = 1.0$, z/H = 0.9

Рисунок 2.9: Дисперсія розподілу положення частинки з часом при $w_s/\kappa u_* = 1.0$, z/H = 0.9

сового кроку. Таким чином одержана оцінка для часових кроків, що можуть бути використані в моделях, які використовують лінійні наближення при обчислені положення центру мас та дисперсії. Моделювання переносу частинок з використанням чисельної схеми №2 наведено в розділі 4.3.1.

2.2 Моделювання зміни стану речовини

В даному параграфі розглядаються стохастичні процеси, що можуть вважатися марківськими та до яких можна застосувати рівняння Колмогорова [26] для опису розподілу ймовірностей різних станів речовини. Розглянемо випадки, коли частинка, що рухається у водному середовищі може змінювати свій стан. Наприклад, це може бути крапля нафти, що може рухатись у складі поверхневої плівки, або у вигляді диспергованих крапель в товщі води, або прилипнути до дна або до берегової лінії. Це може бути хімічна або радіоактивна речовина, що може адсорбуватись на намулах, або органі-





Рисунок 2.10: Залежність зміщення центру мас з часом при $w_s/\kappa u_* = 1.0$, z/H = 0.5

Рисунок 2.11: Дисперсія розподілу положення частинки з часом при $w_s/\kappa u_* =$ 1.0, z/H = 0.5

чних речовинах. Або частинки можуть зникати внаслідок хімічних реакцій, випаровування або радіоактивного розпаду. Всі наведені стани можна розглядати як різні фази перебування одної частинки, що представляє собою певну кількість речовини. Частинка може змінювати стани свого існування в деякі моменти часу з деякими ймовірностями. Якщо в будь-який момент часу ймовірність переходу в інший стан для речовини не залежить від попередньої історії перетворень речовини, то такий процес є марківським, та до нього може бути застосована теорія стохастичних рівнянь марківських процесів.

Нехай деяка система має скінчений набір дискретних станів $S_1, S_2, ..., S_n$. Ставиться задача визначити ймовірності $p_i(t)$ перебування системи в кожному з можливих станів в кожний момент часу. Ймовірність переходу визначається щільностями переходу:

$$\lambda_{ij} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{p_{ij}(\Delta t)}{\Delta t} \tag{2.62}$$

де $p_{ij}(\Delta t)$ – ймовірність переходу зі стану i в стан j за час Δt . Такі систе-





Рисунок 2.12: Залежність зміщення центру мас з часом при $w_s/\kappa u_* = 10.0$, z/H = 0.9

Рисунок 2.13: Дисперсія розподілу положення частинки з часом при $w_s/\kappa u_* =$ 10.0 , z/H = 0.9

ми прийнято зображати графами. Приклад такого графа показаний на рис. 2.16, тут зображена система, що може перебувати в трьох станах S_1, S_2, S_3 , напрямки переходу позначені стрілочками, а щільності ймовірностей символами λ_{ij} . Тоді з означення щільності переходу можна виписати систему диференціальних рівнянь, що описують ймовірності перебування системи з кожному стані. Для графу 2.16 така система має вигляд:

$$\begin{cases} \frac{\partial p_1}{\partial t} = \lambda_{31} p_3(t) - \lambda_{13} p_1(t) - \lambda_{12} p_1(t) \\ \frac{\partial p_2}{\partial t} = \lambda_{12} p_1(t) + \lambda_{32} p_3(t) - \lambda_{23} p_2(t) \\ \frac{\partial p_3}{\partial t} = \lambda_{13} p_1(t) + \lambda_{23} p_2(t) - \lambda_{31} p_3(t) - \lambda_{32} p_3(t) \end{cases}$$
(2.63)

Система (6.80) є системою рівнянь Колмогорова [26] для розподілу ймовірностей між можливими станами системи. Розв'язок цієї системи $p_i(t)$ з початковими умовами $p_i(0) = p_{i0}$ визначає розподіл ймовірностей перебування в кожному стані системи, причому $\sum_{i=1}^{3} p_i(t) = 1$. Якщо відомо, що




Рисунок 2.14: Залежність зміщення центру мас з часом при $w_s/\kappa u_* = 10.0$, z/H = 0.5

Рисунок 2.15: Дисперсія розподілу положення частинки з часом при $w_s/\kappa u_* =$ 10.0, z/H = 0.5



Рисунок 2.16: Приклад графу неперервного марківського процесу

система перебуває в деякому стані S_i , тобто в деякий момент часу $t_0 = 0$ $p_i = 1, p_j = 0, j \neq i$ ймовірність залишитися в цьому ж стані через час Δt дорівнює $p = p_i(\Delta t)$, а значить ймовірність q змінити свій стан буде дорівнювати:

$$q = 1 - p_i(\Delta t) \tag{2.64}$$

Загальний вигляд рівняння Колмогорова для системи з *п* можливих станів:

$$\frac{dp_i}{dt} = \sum_{j=1}^n \alpha_{i,j} p_j, \qquad i = \overline{1, n}$$
(2.65)

Це система лінійних однорідних звичайних диференціальних рівнянь. Така система є інтегровною в елементарних функціях або квадратурах. Нехай $p_{i0}, i = \overline{1, n}$ – початкові умови для системи (2.65). Позначимо $p = p_{ij}(\Delta t)$ ймовірність переходу зі стану *i* в стан *j* за час Δt при умові, що в початковий момент часу система знаходилася в положенні *i*, тобто $p_{i0} = 1, p_{j0} = 0, j \neq i$. Тоді, щоб повністю визначити ймовірності всіх можливих переходів частинки необхідно отримати *n* розв'язків системи (2.65) з початковими умовами $p_{i0} = 1, p_{j0} = 0, j \neq i$ для кожного $i = \overline{1, n}$. Таблиця з n^2 функцій $p_{ij}(\Delta t)$ повністю визначає ймовірності всіх можливих фазових переходів частинки. Таким чином, задача моделювання фазових переходів частинки зводиться до визначення коефіцієнтів рівняння Колмогорова, що описують відповідні фазові перетворення та до методів розв'язку такого рівняння. Більш детально методи побудови та розв'язку рівняння Колмогорова для конкретних прикладів розглянуті в розділі 6.8.

2.3 Оцінка точності стохастичних методів моделювання зміни стану речовини

При розв'язанні рівнянь Колмогорова для розподілу ймовірностей станів деякої системи методом частинок постає питання точності отриманого розв'язку. Точність розв'язку може залежати від кількості частинок, що використовуються при моделюванні, від часового кроку та від обраної чисельної схеми чи аналітичного співвідношення. Розглянемо в загальному вигляді рівняння Колмогорова у матричному вигляді:

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \mathbf{Q}\mathbf{P} \tag{2.66}$$

де $\mathbf{P} = (p_1, p_2, ..., p_n)^T$ - вектор розв'язків системи, а \mathbf{Q} -матриця коефіцієнтів системи:

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \alpha_{1,1} & \alpha_{1,2} & \dots & \alpha_{1,n} \\ \alpha_{2,1} & \alpha_{2,2} & \dots & \alpha_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_{n,1} & \alpha_{n,2} & \dots & \alpha_{n,n} \end{pmatrix}$$
(2.67)

Тоді розв'язок системи можна записати в матричному вигляді:

$$\mathbf{P} = e^{\mathbf{Q}t}\mathbf{P}_0,\tag{2.68}$$

де $\mathbf{P}_0 = (p_{10}, p_{20}, ..., p_{n0})^T$ – вектор початкових умов.

Нехай знайдено точний розв'язок системи $\mathbf{P}(t) = (p_1(t), p_2(t), ..., p_n(t))^T$. Тоді можемо знайти ймовірності всіх можливих переходів, задаючи відповідні початкові умови:

$$p_{i,j}(\Delta t) = p_j(\Delta t),$$
 при умові $p_{i0} = 1, p_{j0} = 0, \quad i \neq j$ (2.69)

Таким чином заповнюємо матрицю переходу ймовірностей **A** протягом часового кроку Δt :

$$\mathbf{A}(\Delta t) = \begin{pmatrix} p_{1,1} & p_{2,1} & \dots & p_{n,1} \\ p_{1,2} & p_{2,2} & \dots & p_{n,2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ p_{1,n} & p_{2,n} & \dots & p_{n,n} \end{pmatrix}$$
(2.70)

Тоді, при довільних початкових умовах $\mathbf{P}_0 = (p_{10}, p_{20}, ..., p_{n0})^T$ вектор розв'язку на першому часовому кроці визначиться як

$$\mathbf{P}(\Delta t) = \mathbf{A}(\Delta t)\mathbf{P}_0, \qquad (2.71)$$

Так як матриця \mathbf{A} є точним розв'язком системи диференціальних рівнянь протягом часу Δt , то

$$\mathbf{A} = e^{\mathbf{Q}\Delta t} \tag{2.72}$$

Тоді, зробивши *т* часових кроків, отримаємо вектор розв'язку:

$$\mathbf{P}(m\Delta t) = \mathbf{A}^m \mathbf{P}_0 = e^{\mathbf{Q}m\Delta t} \mathbf{P}_0 = e^{\mathbf{Q}t} \mathbf{P}_0, \qquad (2.73)$$

Тобто, отриманий таким чином чисельний розв'язок залишається точним розв'язком системи протягом довільної кількості часових кроків. Якщо ми обрали для моделювання n частинок, то кожна з цих частинок через час tбуде мати розподіл $\mathbf{P}(t) = \mathbf{A}^m \mathbf{P}_0$. Математичне сподівання кількості частинок у кожному стані буде дорівнювати точному розв'язку системи. А середньоквадратичне відхилення визначається з біноміального розподілу. Можемо отримати вектор середньоквардратичнх відхилень

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \sqrt{\frac{\mathbf{P}(t)(\mathbf{1} - \mathbf{P}(t))}{n}}$$
(2.74)

де $\mathbf{1} = (1, 1, ..., 1)^T$ – одиничний вектор.

Якщо замість точного розв'язку використовується наближення Ã ≈ A, то математичне сподівання такого чисельного розв'язку вже не буде дорівнювати точному розв'язку. Тоді нев'язку через деякий час t можна виразити таким чином:

$$\Delta \mathbf{P} = \left(\tilde{\mathbf{A}}^m - e^{\mathbf{Q}t}\right) \mathbf{P}_0, \qquad (2.75)$$

де матричну експоненту можна знайти за означенням з будь-якою бажаною точністю:

$$e^{\mathbf{Q}t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathbf{Q}^n t^n}{n!} \tag{2.76}$$

Рівняння (2.76) можна використовувати для отримання розв'язку системи (2.66) за відомою матрицею коефіцієнтів **Q**.

2.4 Висновки до розділу

Викладені теоретичні основи моделювання броунівського руху та дифузії стохастичними методами. Представлений новий алгоритм, що дозволяє будувати чисельні схеми випадкових блукань з незміщеною дисперсією для тривимірного випадку змінного поля течії та коефіцієнту дифузії. Отримано нові аналітичні розв'язки для зміщення центру мас та дисперсії розподілу частинки при моделюванні методом випадкових блукань для окремих часткових випадків одновимірного руху. Виведено критерії оцінки максимальних часових кроків для розв'язку рівняння адвекції-дифузії методом частинок. Застосовано теорію стохастичних процесів Маркова до моделювання методом частинок процесів зміну стану речовини, таких як, наприклад, хімічні реакції, радіоактивний розпад та адсорбція-десорбція радіонуклідів на піщинках завислих чи донних намулів. Представлена чисельна схема для загального випадку розрахунку ймовірності зміни стану для кожної частинки протягом часового кроку. Отриманий вираз для математичного сподівання та дисперсії розподілу стану речовини при розв'язанні рівняння Колмогорова для моделювання зміни станів речовини в залежності від часового кроку та кількості частинок. На основі отриманих результатів побудовані узагальнені чисельні алгоритми розв'язку рівнянь переносу та дифузії неконсервативних домішок методом частинок.

Розділ 3

ГІДРОДИНАМІЧНІ ПРОЦЕСИ В ПРИБЕРЕЖНИХ ЗОНАХ МОРІВ

3.1 Особливості гідродинамічних процесів в прибережних зонах морів

Гідродинамічні процеси, та розповсюдження забруднень, що відбуваються в прибережних зонах морів мають суттєві особливості, на відміну від випадків глибокої води далеко від берегів.

- 1. Наявність берегової лінії. Найбільшої шкоди навколишньому середовищу, життєдіяльності людей, забруднення чинить саме в прибережній зоні. Прибережні зони є найбільш заселеними, з найбільшою кількістю морських споруд. Активність морських організмів, риб та рослинності найбільша в шельфових районах, на невеликих глибинах. Тому саме в таких місцях забруднення можуть завдавати найбільшу шкоду навколишньому середовищу. Типи берегових ліній та рельєфу дна можуть бути дуже різноманітними і вимагати особливих підходів до чисельних алгоритмів гідродинамічних моделей та побудову розрахункових сіток
- 2. Вплив поверхневих вітрових хвиль. В прибережних зонах, на глиби-

нах, що співставні з довжиною хвиль, вітрові хвилі можуть спричиняти вздовжберегові течії, які можуть досягати порядку 1м/с. Такі течії можуть впливати на стійкість дна та берегів. При взаємодії з особливостями берегової лінії можуть утворювати "rip currents" – струменеві течії, напрямлені від берегу, що можуть становити загрозу для плавців та впливати на локальний характер течії. Хвилі підсилюють донне тертя та спричиняють додатковий розмив дна за рахунок орбітальних хвильових швидкостей.

- 3. Донні намули можуть рухатись у придонному шарі або підніматись і рухатись як завислі намули через придонні напруження тертя, прибережні течії та турбулентне перемішування. Також джерелами намулів можуть бути річки, що впадають в моря і можуть виносити значну кількість донного матеріалу. Наявність завислих намулів впливає на прозорість та густину води, через це впливає на морську рослинність, живі організми, гідродинамічні процеси, розповсюдження теплових потоків у приповерхневому шарі води. Тип та характерні розміри намулів впливають на розповсюдження забруднень. Наприклад радіоактивні речовини, що розчинені у воді, адсорбуються на піщинках зависли і донних намулів. Концентрація та характеристики намулів можуть суттєво впливати на швидкість адсорбції, концентрацію розчинених радіонуклідів, забруднення донних відкладень та міграцію радіонуклідів у дні.
- При розвиненому судноплавстві корабельні гвинти на мілині можуть підсилювати турбулентне перемішування, спричиняти перенос донних намулів, впливати не переформування дна, стійкість берегової лінії.



Рисунок 3.1: Схема взаємодії хвиль та течій

3.2 Модель взаємодії хвиль та течій

В даному розділі представлена моделююча система нелінійної взаємодії хвиль та течій що основана на неструктурованих сітках та придатна для крупномасштабних досліджень з високої роздільною здатністю. Тривимірна гідродинамічна модель циркуляції (SELFE, [324]) поєднана зі спектральною моделлю вітрових хвиль (WWM-II,[267]). Моделі поєднані в одному програмному коді та працюють на однакових розрахункових сітках, використовуючи паралельну імплементацію засобами MPI. Застосовність моделі SELFE-WWM продемонстрована на ряді аналітичних розв'язках, лабораторних та польових дослідженнях, що довело придатність моделі для застосування при різноманітних масштабах та навколишніх умовах.

Нелінійна взаємодія між течіями з великим часовим масштабом (наприклад припливні течії) з короткоперіодними (<30 с) хвилями відіграє важливу роль особливо в прибережних районах через декілька механізмів. Потік імпульсу від хвильових рухів до середніх течій, що визначається "радіаційними напруженнями", які приводять до генерації течій, що вперше були отримані [187], а потім узагальнені на тривимірний випадок [215,216,217,218,318,57] Хвилі підсилюють поверхневе тертя та турбулізують приповерхневий шар [105]. Також хвилі спричиняють додаткові донні напруження в мілководних районах [136,319]. В приповерхневому шарі хвилі викликають стоксів дрейф, що має бути врахований при моделюванні розповсюдження забруднень у поверхневих шарах морів. На рис. 3.1 зображено схема взаємодії спектральної моделі хвиль та моделі циркуляції. Окрім вже згаданих радіаційних та донних напружень в моделі хвиль розраховується потік імпульсу що передається течіям внаслідок перекидання хвиль, а також шорсткість поверхні води, що впливає на вітрові напруження та теплообмін з атмосферою. В свою чергу, модель циркуляції передає в хвильову модель усереднені за глибиною та поверхневі поля течій, рівень вільної поверхні та зміну розрахункової області внаслідок затоплення чи осушення. В цьому розділі надається опис спектральної моделі хвиль, тривимірної гідродинамічної моделі, алгоритму їх взаємодії, та приклади валідації та застосування.

3.2.1 Рівняння моделі

Спектральна модель хвиль

Рівняння для хвильової дії записується наступним чином ([166])

$$\frac{\partial}{\partial t}N_{\text{Зміна в часі}} + \underbrace{\nabla_{\mathbf{X}}\left(\dot{X}N\right)}_{\text{адвекція}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \sigma}\left(\dot{\theta}N\right) + \frac{\partial}{\partial \theta}\left(\dot{\sigma}N\right)}_{\text{перенос в спектральному просторі}} = \underbrace{S_{tot}}_{\text{джерела}},$$
(3.1)

де хвильова дія визначається як

$$N_{(t,X,\sigma,\theta)} = \frac{E_{(t,X,\sigma,\theta)}}{\sigma},$$
(3.2)

тут Е – щільність розподілу рівнів вільної поверхні моря. Швидкості переносу в різних фазових просторах задаються наступним чином:

$$\dot{X} = c_X = \frac{dX}{dt} = \frac{d\omega}{dk} = c_g + U_{A_{(k)}}$$
(3.3)

$$\dot{\theta} = c_{\theta} = \frac{1}{k} \frac{\partial \sigma}{\partial d} \frac{\partial d}{\partial m} + k \cdot \frac{\partial U_{A(k)}}{\partial s}$$
(3.4)

$$\dot{\sigma} = c_{\sigma} = \frac{\partial \sigma}{\partial d} \left(\frac{\partial d}{\partial t} + U_A \cdot \nabla_X d \right) - c_g k \frac{\partial U_{A(k)}}{\partial s}$$
(3.5)

Тут **s** представляє координату вздовж напрямку розповсюдження хвилі, а **m** перпендикулярну до неї. **X** – декартові координати (х,у) в географічному просторі, d – глибина, **k** – вектор хвильових чисел, с_g – групова швидкість ∇_X – оператор градієнту в географічному просторі. Групова швидкість розраховується з лінійного дисперсійного співвідношення. Ефективна швидкість переносу $U_{A(k)}$ в загальному випадку залежить від вектору хвильового числа кожної хвильової компоненти, в моделі вона була апроксимована через поверхневу течію. На мілкій воді $U_{A(k)}$ може бути апроксимоване через усереднену по глибині течію ([92]).

Права частина рівняння 3.1 S_{tot} – це функція джерела, що включає в себе потік енергії за рахунок вітру (S_{in}) , нелінійну взаємодію на глибокій та мілкій воді $(S_{nl4}$ та $S_{nl3})$, дисипацію енергії на глибокій та мілкій воді за рахунок бурунців та перекидання хвиль $(S_{ds}$ and $S_{br})$ та дисипація енергії за рахунок донного тертя (S_{bf}) :

$$\frac{DN}{Dt} = S_{total} = S_{in} + S_{nl4} + S_{ds} + S_{nl3} + S_{br} + S_{bf}$$
(3.6)

Для розв'язку рівняння відносно хвильової дії використовується чисельний метод розщеплення [320]:

$$\frac{\partial N^*}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(c_{\theta} N \right) = 0; \left[N^*_{(t=0)} = N_0 \right] \text{ Ha } [0, \Delta t]$$
(3.7)

$$\frac{\partial N^{**}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(c_{\sigma} N^* \right) = 0; \left[N^{**}_{(t=0)} = N^*_{(t=\Delta t)} \right] \quad \text{Ha} \quad [0, \Delta t] \tag{3.8}$$

$$\frac{\partial N^{***}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(c_x N^{**} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(c_y N^{**} \right) = 0 \; ; \left[N^{***}_{(t=0)} = N^{**}_{(t=\Delta t)} \right] \; \text{ Ha } \left[0, \Delta t \right] \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial N^{****}}{\partial t} = S_{(N**)_{,tot}}; \left[N_{(t=0)}^{****} = N_{(t=\Delta t)}^{***} \right] \text{ Ha } [0, \Delta t]$$
(3.10)

Більш детально чисельний метод алгоритм описаний в [268]

Фізичне формулювання функцій джерела

Більшість функцій джерела визначаються з напівемпіричних співвідношень, окрім інтегралу Больцмана, що описує нелінійний перенос енергії на глибокій воді (S_{nl4}), який може бути отриманий точно ([303]) для довільного хвильового спектру. Для практичного застосування використання точного розв'язку не виглядає доцільним через складність чисельного алгоритму. В [140] знайдено апроксимацію для чотирихвильової взаємодії, що зветься DIA (Discrete Interaction Approximation). Ця апроксимація дозволила запровадити цей базовий фізичний процес в спектральні хвильові моделі.

Член с генерацією хвиль вітром та дисипацією має багато відомих параметризацій [153,64], що неперервно оновлюються та вдосконалюються на підставі нових даних та поліпшеному розумінню фізичних процесів. WWM-II має дві основні параметризації для вітрової генерації та дисипації [70] та [59]. Перекидання хвиль на мілкій воді основане на [66]. Дисипація енергії за рахунок тертя о дно основане на результатах експерименту JONSWAP [139].

Гідродинамічна модель

За допомогою тривимірної гідростатичної гідродинамічної моделі циркуляції SELFE [324] розв'язуються усереднені за Рейнольдсом рівняння Нав'є-Стокса (RANS) використовуючи скінченно-елементний підхід та неструктуровані розрахункові сітки. Вихідними рівняннями є рівняння збереження маси, імпульсу, солі та тепла в гідростатичному наближенні Бусінеска:

$$\nabla \cdot \vec{u} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \tag{3.11}$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \nabla \cdot \int_{-h}^{h} \vec{u} dz = 0 \tag{3.12}$$

$$\frac{D\vec{u}}{Dt} = -f\vec{k} \times \vec{u} + \alpha g \nabla \hat{\psi} - \frac{1}{\rho_0} \nabla p_a - \frac{g}{\rho_0} \int_{-h}^{h} \nabla \rho d\varsigma + \nabla \cdot (K_M \nabla \vec{u}) - g \nabla \eta + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_t \frac{\partial \vec{u}}{\partial z} + \vec{R}_s \right)$$
(3.13)
$$DS = \partial \left(-\partial S \right) + \nabla \cdot \nabla q = 0 \quad (2.14)$$

$$\frac{1}{Dt} = \frac{1}{\partial z} \left(\nu_t \frac{\partial z}{\partial z} \right) + F_s \tag{3.14}$$

$$\frac{DT}{Dt} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_t \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{Q}{\rho_0 C_p} + F_h \tag{3.15}$$

Тут (x,y) - горизонтальні декартові координати, в [м], z – вертикальна координата, додатна нагору, в [м], t - час [c]

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}\right), \quad \frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}\nabla + w\frac{\partial}{\partial z}$$

 η – рівень вільної поверхні, в [м]; h– глибина, в [м]; $D = H + \eta$ – товщина водного шару, в [м]; $\vec{v} = (u, v)$ – горизонтальна швидкість з декартовими компонентами (u,v), в [м с⁻¹]; w– вертикальна швидкість, в [м с⁻¹]; f– параметр Коріоліса, в [с⁻¹]; g - прискорення вільного падіння, в [м с⁻²]; $\tilde{\psi}$ – припливний потенціал Землі, [м]; α – ефективний коефіцієнт пружності Землі; ρ – густина води, відлікова величина $\rho_0 = 1025 \text{ kg m}^{-3}$; p_a – атмосферний тиск на вільній поверхні, [H м⁻²]; S, T – солоність та температура води [practical salinity units (psu), o C]; ν_t – вертикальний коефіцієнт турбулентної дифузії, [м² с⁻¹]; K_M – горизонтальний коефіцієнт турбулентної дифузії, [м² с⁻¹]; F_s, F_T –горизонтальна дифузія в рівняннях переносу.

Для члену з радіаційними напруженнями \mathbf{R}_{s} існує багато різноманітних формулювань ([215,216,217,318,68]) які мають різний вертикальний розподіл напружень. Було проведено перевірку деяких параметризацій, а також класичного двовимірного формулювання [187]:

$$\begin{cases}
\mathbf{R}_{s} = (R_{sx}, R_{sy}) \\
R_{sx} = -\frac{1}{\rho_{0}H} \frac{\partial S_{xx}}{\partial x} - \frac{1}{\rho_{0}H} \frac{\partial S_{xy}}{\partial y} \\
R_{sy} = -\frac{1}{\rho_{0}H} \frac{\partial (HS_{yy})}{\partial y} - \frac{1}{\rho_{0}H} \frac{\partial (HS_{xy})}{\partial x} \\
\begin{cases}
S_{xx} = E \left[n \cos^{2} \theta_{w} + n - 0.5 \right] \\
S_{yy} = E \left[n \sin^{2} \theta_{w} + n - 0.5 \right] \\
S_{xy} = En \sin \theta_{w} \cos \theta_{w} \\
n = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{2kH}{\sinh 2kH} \right)
\end{cases}$$
(3.16)
$$(3.17)$$

де $H = h + \eta$ – загальна глибина води, θ_w – кут між віссю x та домінуючим напрямком хвиль, k – хвильове число. Радіаційні напруження є рівномірно розподіленими по глибині при цьому формулюванні

На мілкій воді підсилене хвилями донне тертя у придонному примежовому шарі може мати визначальну роль у переносі намулів. В моделі використані параметризації [136,323]. В цих параметризаціях початкове донна шорсткість (тобто діаметр намулів) замінюється на ефективну донну шорсткість z_{0b} , як подано нижче. З квадратичного закону тертя:

$$\tau_b = \rho_0 C_D |\mathbf{u}| \mathbf{u}$$

$$C_D = \left[\kappa / \log(z_b/z_0)\right]^2$$
(3.18)

де $\kappa = 0.4$ – константа Кармана, z_b – відстань від дна до першого розрахункового вузла, and z_0 – донна шорсткість, що пов'язана з розміром донних відкладень.

Максимальний хвильове донне напруження визначається як:

$$\tau_w = 0.5\rho_0 f_w U_w^2 \tag{3.19}$$

де U_w величина орбітальної швидкості:

$$U_w = \frac{a_w \omega}{\sinh kH} \tag{3.20}$$

Тут a_w – амплітуда хвилі, ω – кутова частота. Множник f_w є функцією від параметрів як хвиль, так і течій [323]:

$$\begin{cases} \gamma = \frac{|\tau_b|}{\tau_w} \\ C_\gamma = \left(1 + 2\gamma |\cos\theta_w| + \gamma^2\right)^{1/2} \\ f_w = C_\gamma \exp\left[5.61 \left(\frac{C_\gamma U_w}{30z_0\omega}\right)^{-0.109} - 7.3\right] \end{cases}$$
(3.21)

Рівняння (3.25) та (3.27) розв'язуються ітеративно відносно $(\gamma, C_{\gamma}, \tau_w)$ з першим наближенням $\gamma = 0, C_{\gamma} = 1$. Збіжність зазвичай досягається за кілька ітерацій. Після того, як знайдені ці величини, ефективна шорсткість знаходиться таким чином:

$$z_{0b} = \delta_{wc} \left(\frac{\delta_{wc}}{z_0}\right)^{-\sqrt{|\tau_b|/(C\gamma\tau_w)}}$$
(3.22)

де товщина хвильового пограничного шару:

$$\delta_{wc} = \frac{\sqrt{\frac{C_{\gamma}\tau_w}{\rho_0}}}{\omega} \exp\left[2.96\left(\frac{C_{\gamma}U_w}{30z_0\omega}\right)^{-0.071} - 1.45\right].$$
(3.23)

Ефективна шорсткість z_{0b} , що задається рівнянням (3.22) має використовуватись замість z_w в рівнянні (4.19). Як було показано в розрахунках [268] ефективна шорсткість може бути значно більшою за z_0 навіть при помірних хвилях в естуаріях.

Затухання хвиль через "бурунці" та перекидання, що викликане зміною глибини також призводить до передачі імпульсу до течій [258]. Взагалі, потік імпульсу від хвиль, що перекидаються має бути розподілений на деякій товщині [105].

В горизонтальному напрямку в SELFE використовується трикутна сітку, в той час, як у вертикальному напрямку модель використовує гібридні координати: вздовж-рельєфні S-координати та частково Z-координати, хоча в коді всі рівняння записані в Z-системі координат. Правильне представлення горизонтальних похідних в S-системі досягається вертикальною інтерполяцією змінних.

В SELFE використовується Generic Length Scale (GLS) замикання турбулентності [295] яке складається з двох рівнянь для турбулентної кінетичної енергії та узагальненого масштабу турбулентності:

$$\frac{DK}{Dt} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_k^{\psi} \frac{\partial K}{\partial z} \right) + \nu M^2 + \mu N^2 - \varepsilon$$

$$\frac{D\psi}{Dt} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + \frac{\psi}{K} \left(C_{\psi 1} \nu M^2 + + C_{\psi 3} \mu N^2 - C_{\psi 2} F_w \varepsilon \right)$$
(3.24)

де ν_k^{ψ} та ν_{ψ} коефіцієнти вертикальної дифузії, $C_{\psi 1}$, $C_{\psi 2}$, $C_{\psi 3}$ - константи моделі, F_w пристінна функція, M та N зсув та плавучість, ε швидкість дисипації енергії турбулентності. Узагальнений масштаб турбулентності визначається як

$$\psi = \left(C^0_\mu\right)^p K^m \ell^n$$

де $C^0_{\mu} = \sqrt{0.3}$ та ℓ масштаб турбулентного перемішування. Вибір констант p, m, n призводить до різних видів замикань: $k - \varepsilon$ [265], $k - \omega$ [314], $q^2 - q^2 \ell$ [212].

$$\nu = \sqrt{2}s_m K^{1/2} \ell$$
$$\mu = \sqrt{2}s_h K^{1/2} \ell$$
$$\nu_k^{\psi} = \frac{\nu}{\sigma_k^{\psi}}$$
$$\nu_{\psi} = \frac{\nu}{\sigma_{\psi}}$$

де σ_k^ψ , σ_ψ константи моделі.

На поверхні води в моделі забезпечується баланс між внутрішніми напруженнями Рейнольдса та прикладеними до поверхні вітровим напруженням $\vec{ au_a}$:

$$\nu \frac{\partial \vec{u}}{\partial z} = \frac{\vec{\tau}_a}{\rho_0} \quad . \tag{3.25}$$

На вільній поверхні для кінетичної енергії турбулентності та масштабу турбулентності задаються граничні умови Діріхлє:

$$K = \frac{1}{2} B_1^{2/3} \left| \vec{\tau}_w \right|, \quad l = \kappa d_s \tag{3.26}$$

Тут
 κ - константа Кармана, d_s - відстань від поверхні до першого розраху
нкового вузла.

В придонному шарі постійних напружень граничні умови записуються як

$$\nu \frac{\partial \vec{u}}{\partial z} = \vec{\tau_b},\tag{3.27}$$

де донне тертя $\vec{\tau}_b$ знаходиться з (4.19).

Описаний алгоритм взаємодії хвиль та течій був також впроваджений для взаємодії хвильової моделі SWAN ([80]) та гідродинамічної моделі THREETOX [203,192,195]. Для цих моделей була впроваджена одностороння взаємодія, тобто вплив моделі циркуляції на хвильову модель не враховувався, для розрахунку радіаційних напружень та ефективної донної шорсткості використовувались попередньо розраховані стаціонарні поля хвильових параметрів. Детально ця моделююча система описана в роботі [195]. Моделювання лабораторного експерименту, що описане в параграфі 3.2.2 було проведена за допомогою поєднання моделей SWAN та THREETOX.

3.2.2 Перевірка моделі на аналітичному розв'язку та лабораторному експерименті

Аналітичний розв'язок

Longuet-Higgins та Stewart [187] отримали аналітичний розв'язок для накату хвиль на похилий уклін дна. В цій простій одновимірній стаціонарній задачі досягається баланс сил між градієнтом тиску та радіаційними напруженнями:

$$g\frac{\partial\eta}{\partial x} = -\frac{1}{\rho_0 H} \frac{\partial E(2n-0.5)}{\partial x}.$$
(3.28)

Розв'язок дається в двох зонах: всередині та зовні зони прибою. Зовні зони прибою ($x \ge x_B$) маємо:

$$\eta = -\frac{a^2k}{2\sinh 2kh} \tag{3.29}$$

Закон збереження енергії хвиль приводить до:

$$a^2 = \frac{n_0 k}{n k_0} a_0^2 \tag{3.30}$$

де індекс "0" означає параметри набігаючої хвилі.

Всередині зони прибою ($x \leq x_B$), амплітуда хвилі пропорційна локальній глибині:

$$a = \beta(h+\eta), \tag{3.31}$$

де $\beta = 0.41$ константа перекидання хвиль. Якщо ми припустимо, що справедливо довгохвильове дисперсійне співвідношення в цій зоні (тобто n=1), то отримаємо:

$$\eta = \frac{1}{1 + \frac{2}{3\beta^2}} (h_B - h) + \eta_B \tag{3.32}$$

де індекс "B" означає параметри при $x = x_B$.

Співставляючи розв'язки (4.27) та (3.71) отримаємо 4 рівняння для чотирьох невідомих (h_B, η_B, a_B, k_B) , які можуть бути зменшені для знаходження одного невідомого k_B :

$$k_B^{10} - \frac{8}{c_0} \left(1 + \frac{2}{\beta^2} \right) \hat{k} k_B^5 + \frac{16}{c_0} \hat{k}^4 = 0$$
(3.33)

де $c_0 = a_0^2 n_0 / k_0$, $\hat{k} = \omega^2 / g$. Потім k_B знаходиться з рівняння (4.28), повний розв'язок може бути побудований для кожної зони.



Рисунок 3.2: Схема чисельного експерименту для порівняння з розв'язками [187]



Рисунок 3.3: Збіжність до стаціонарного стану при x = 0.38 m (h = 0.038 m)



Рисунок 3.4: Порівняння аналітичного (пунктирна лінія) з чисельним розв'язком (суцільна лінія) для (а) хвильового нагону та (б) висоти хвиль x = 0.38 m (h = 0.038 m)

Для перевірки роботи моделі взаємодії хвиль та течій генерувалися монохроматичні хвилі з амплітудою 9см та періодом 1.5с на правій границі; початкові рівні вільної поверхні та швидкості дорівнювали нулеві. Моделі хвиль та гідродинаміки обмінювалися даними на кожному часовому кроці 0.05с. По горизонталі використовувалась однорідна розрахункова сітка з роздільною здатністю 12.5см, по вертикалі використовувалось 9 рівномірно розподілених σ рівнів. Для відповідності аналітичному розв'язку було задане нульове донне тертя. Загальний час моделювання - 1 година для досягнення стаціонарного розподілу. На рис. 3.3 показано затухання осциляцій рівня вільної поверхні при досягненні стаціонарного стану після близько півгодини моделювання. Рис. 3.4 показує порівняння розрахунків з аналітичним розв'язком для рівня вільного поверхні та висоти хвилі.

Моделювання лабораторного експерименту

В цьому параграфі модельні розрахунки співставляється з даними лабораторного експерименту [308], эксперимент №4. В цьому експерименті монохроматичні хвилі генерувались в лабораторному басейні з розмірами 8.253м поперек берегу та 17м вздовж берегу. Лабораторний басейн мав постійний уклін дна 0.05 з максимальною глибиною 0.35 м на відкритій границі (Рис. 3.5).

Для відтворення тривимірної структури течій було використано параметризації, що отримані в роботах [217,218]. В цьому випадку тензор радіаційних напружень записується у вигляді:

$$S_{\alpha\beta} = kE\left(\frac{k_{\alpha}k_{\beta}}{k}F_{CS}F_{CC} - \delta_{\alpha\beta}F_{SC}F_{SS}\right) + \delta_{\alpha\beta}E_D, \qquad (3.34)$$

де

$$F_{SS} = \frac{\sinh kD(1+s)}{\sinh kD}, \ F_{CS} = \frac{\cosh kD(1+s)}{\sinh kD},$$
$$F_{SC} = \frac{\sinh kD(1+s)}{\cosh kD}, \ F_{CC} = \frac{\cosh kD(1+s)}{\cosh kD}.$$

k –модуль хвильового числа поверхневих хвиль, k_{α} – компоненти вектора хвильового числа, $\delta_{\alpha\beta}$ – символ Кронекера, c – модуль фазової швидкості лінійних поверхневих хвиль. Фазова швидкість знаходиться з дисперсійного співвідношення для лінійних поверхневих хвиль

$$c = \frac{\sigma}{k} = \sqrt{\frac{g}{k} \tanh kD},\tag{3.35}$$

де σ -хвильова частота. Модуль групової швидкості $c_g=cn\,,$ де

$$n = \frac{1}{2} \frac{kD}{\sinh kD}.$$
(3.36)

Модифікована дельта функція E_D в рівнянні (3.34) введена наступним чином:

$$\int_{-H}^{\tilde{\eta}} E_D dz = \frac{E}{2}, E_D = 0 \text{ при } z = 0$$
(3.37)



Рисунок 3.5: Схема експерименту [308]. Стрілками вказані напрямки хвиль та напрямки течій, що ними викликані.

Швидкість U_{α} включає середню ейлерову швидкість течі
й \hat{U}_{α} та стоксову швидкість U^s_{α}

$$U_{\alpha} = \hat{U}_{\alpha} + U_{\alpha}^s \tag{3.38}$$

Стоксова швидкість знаходиться із співвідношення

$$U_{\alpha}^{s} = \frac{2k_{\alpha}E}{c}\frac{\cosh 2k(z+H)}{\sinh 2kD}$$
(3.39)

Моделювалося розповсюдження монохромної хвилі висотою 0.076м, періодом 1.02с, що падає під кутом 19.9° до берегової лінії. Використовувалась рівномірно розрахункова сітка з 550 вузлів поперек берега (вісь ОХ) та 100 вузлів вздовж берега (вісь ОҮ). В розрахунках використовувалось 20 рівномірно розподілених напрямків в секторі від 5° до 24.8° та 30 частот. Результатами розрахунків хвильової моделі були двовимірні поля висот хвиль, середніх напрямків, хвильових чисел, а також швидкість дисипації хвильової енергії за рахунок "бурунців" на гребнях хвиль. В подальшому розраховані поля хвильових характеристик використовувались в моделі гідродинаміки для розрахунку радіаційних напружень, коефіцієнту ефективної шорсткості



Рисунок 3.6: Щільність енергії хвиль в розрізі на вісь ОХ



Рисунок 3.7: Хвильове число в розрізі на вісь ОХ

та напруження тертя на поверхні за рахунок перекидання хвиль. На рис. 3.6-3.7 показані розподіли хвильових характеристик вздовж вісі ОХ перпендикулярної до берегу. Графіки побудовані вздовж перерізу посередині розрахункової області.

В гідродинамічній моделі використовувалась нерівномірна прямокутна сітка 300 на 72 вузли. Роздільна здатність по вісі OX змінювалась від 40см до 1.5 см, а по вісі OY була рівномірною і складала 10см. В моделі використовувалось 10 вертикальних σ -рівнів. Для розрахунку коефіцієнтів вертикальної в'язкості та дифузії використовувалась $k - \epsilon$ модель турбулентності, для розрахунку горизонтальної в'язкості використовувалась модель підсіткової в'язкості Смагоринського. Часовий крок складав 0.004с.

Метою моделювання даного експерименту є відтворення вздовжберегового струменя, що виникає при падінні хвиль під кутом до берега, порівняння з добре документованими експериментальними даними та відтворення тривимірної структури течій. Результати розрахунків представлені на рис. 3.8-3.9.

На рис. 3.8-3.9 представлені профілі середньої швидкості та зміни рівня вільної поверхні при розрахунку усереднених по глибині радіаційних напружень згідно [187], при розрахунках за формулами (3.34) та експериментальні профілі. Порівняння показує, що використання двовимірного представлення



0.01

0

-2

-0.005

≥ 0.01 ÷ 0.005



Рисунок 3.8: Профіль середньої швидкості. Тут 1 - виміри, 2 - двовимірне представлення радіаційних напружень, 3 - тривимірне представлення радіаційних напружень



х. м

2

0

радіаційних напружень в тривимірній моделі призводить до суттєвого заниження вздовжберегового струменя у порівнянні з експериментальними даними.

На рис. 3.10-3.11 показано залежність результатів розрахунків від врахування механізмів додаткового хвильового тертя та передачі імпульсу від хвиль до течій при перекиданні хвиль. Рис. 3.10-3.11 демонструють необхідність враховувати як придонні хвильові напруження, так і перекидання поверхневих хвиль.

На рис. 3.12-3.13 представлена тривимірна структура течій в розрізі *ZOX* при двовимірному представлені радіаційних напружень [187] та при використанні тривимірного представлення радіаційних напружень разом із додатковим хвильовим придонним тертям та імпульсом від хвиль, що перекидаються.

Рис. 3.14 демонструє зміну придонного напруження при розрахунку ефективного хвильового тертя за формулою и (3.22). Порівняння показує збільшення придонного тертя на 30% в експерименті, що розглядається.

Більш детально модель та розрахунки описані в роботах [195],[268].

10

8

2

3



Рисунок 3.10: Профіль середньої швидкості. Тут 1 - виміри, 2 - тривимірне представлення радіаційних напружень при наявності перекидання хвиль та хвильового тертя, 3 - тривимірне представлення радіаційних напружень без хвильового тертя та перекидання хвиль, 4 - тривимірне представлення радіаційних напружень з хвильовим тертям, але без перекидання хвиль, 5 - розрахунок при наявності тільки перекидання хвиль (без радіаційних напружень)



Рисунок 3.11: Зміна рівня вільної поверхні. Тут 1 - виміри, 2 - тривимірне представлення радіаційних напружень при наявності перекидання хвиль та хвильового тертя, 3 - тривимірне представлення радіаційних напружень без хвильового тертя та перекидання хвиль, 4 - тривимірне представлення радіаційних напружень з хвильовим тертям, але без перекидання хвиль, 5 - розрахунок при наявності тільки перекидання хвиль (без радіаційних напружень)



Рисунок 3.12: Переріз швидкості при двовимірному представленні радіаційних напружень 3.3 Негідростатична модель гідродинаміки прибережних зон морів

В розділі 3.2.1 описана тривимірна гідродинамічна модель, що основана на розв'язанні рівняння Нав'є-Стокса в гідростатичному наближенні, тобто



Рисунок 3.13: Переріз швидкості при тривимірному представленні радіаційних напружень



Рисунок 3.14: Придонні напруження у розрізі вздовж вісі ОХ. Тут 1 - тривимірне представлення радіаційних напружень при наявності перекидання хвиль та хвильового тертя, 2 - тривимірне представлення радіаційних напружень при наявності перекидання хвиль, але без хвильового тертя

нехтуючи прискоренням вертикальної швидкості та враховуючи тільки гідростатичну складову тиску. Відомо, що для широкого класу задач прибережної гідродинаміки, таких, як, наприклад, струменеві течії ([7],[192]), внутрішні і поверхневі хвилі великих амплітуд ([9],[193],[40]), таке наближення не є прийнятним. Саме тому став необхідним перехід до моделей наступного рівня, які враховують прискорення вертикальної швидкості та динамічну компоненту тиску. Таким підходом є безпосереднє інтегрування вихідних рів-

нянь гідродинаміки. В середині 90х років були розвинені двовимірні чисельні моделі, що базуються на розв'язанні двовимірних у вертикальній площині рівнянь Ейлера [176], і Нав'є – Стокса [309] за допомогою яких вдалося описати важливі процеси еволюції сильно-нелінійних хвиль. Обчислювальні труднощі і вимоги до комп'ютерних ресурсів перешкоджали розвитку тривимірних моделей заснованих на рівняннях Нав'є-Стокса. Проте, в 1996-1998 роках були розвинені так звані "негідростатичні" моделі» ([200]; [201]; [91]). Цей підхід ґрунтувався на тому, що у вертикальному напрямку домінуючим є гідростатичний баланс. Тому розв'язання здійснювалося шляхом розщеплення повного тиску і швидкості на гідростатичну і негідростатичну компоненти і послідовного знаходження цих компонент, що істотно прискорювало процедуру розрахунку. Ряд відомих моделей циркуляції був перетворений із квазі-гідростатичних у негідростатичні, використовуючи вказану процедуру ([157]; [159]). Спочатку, негідростатичні моделі розглядалися як узагальнення традиційних моделей циркуляції (модель MIT), але детальне порівняння з аналітичними рішеннями і лабораторними експериментами [157] показало, що вказаний підхід ефективний і для внутрішніх хвиль. Тому останні роки було розроблено цілий ряд негідростатичних моделей, прямо призначених для вирішення завдань динаміки нелінійних внутрішніх хвиль [159].

Негідростатична модель основана на методі розщеплення тривимірних полів швидкостей та тиску на гідростатичну та негідростатичну компоненти. Цей метод є більш швидким ніж розв'язання повних рівнянь Нав'є-Стокса, але значно повільніший ніж гідростатична версія моделі. Особливостями цієї моделі є:

- модель з вільною поверхнею
- використання вертикальної узагальненої системи координат

- модель використовує криволінійні горизонтальні координати та "Arakawa C" горизонтальну сітку
- використовується метод розщеплення задачі на внутрішню та зовнішні моди. При цьому підході середня швидкість та рівень розраховуються за явною схемою з малим кроком зовнішньої моди, що визначається з умови Куранта та швидкості поверхневих хвиль. Повна швидкість та скаляри розраховуються з великим кроком по часу внутрішньої моди, що визначається з умови Куранта та швидкості внутрішніх хвиль
- для опису вертикального перемішування в моделі для усереднених за Рейнольдсом характеристик використовувалась опціонально двопараметрична модель Мелора-Ямади та модель підсіткової в'язкості

3.3.1 Рівняння моделі

Вихідні рівняння задачі, отримані з рівнянь Нав'є-Стокса усередненням по Рейнольдсу мають вигляд:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \tag{3.40}$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_j} - g_i, \qquad (3.41)$$

де $x_i = (x, y, z)$ – декартові координати, вісь z напрямлена вертикально вгору; $u_i = (u, v, w)$ – складові середніх швидкостей; p – тиск; $g_i = (0, 0, g)$ – прискорення сили тяжіння; ρ_0 – постійна густина води в наближенні Бусінеска. Напруження Рейнольдса $\overline{u_i u_j}$ апроксимуються в рамках наближення турбулентної в'язкості:

$$\overline{u_i u_j} = -K_M \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{3} q^2 \delta_{ij}, \qquad (3.42)$$

де δ_{ij} – символ Кронекера. Коефіцієнт турбулентної в'язкості K_M виражається через кінетичну енергію турбулентності $q^2/2$ та масштаб турбулентності

l :

$$K_M = S_M ql, (3.43)$$

де $q^2/2 = \overline{u_i u_i}$

$$S_M = \frac{A_1 \left(B_1 - 6A_1 - B_1 C_1 \right)}{A_2 \left(B_1 - 6A_1 \right)},\tag{3.44}$$

 A_1, A_2, B_1, C_1 - константи моделі.

Для замикання використовується тривимірне узагальнення $q^2 - q^2 l$ моделі [212] для однорідної рідини:

$$\frac{\partial q^2}{\partial t} + u_j \frac{\partial q^2}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[S_q q l \frac{\partial q^2}{\partial x_j} \right] + K_M P - 2 \frac{q^3}{B_1 l}$$
(3.45)

$$\frac{\partial q^2 l}{\partial t} + u_j \frac{\partial q^2 l}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[S_l q l \frac{\partial q^2 l}{\partial x_j} \right] + 2E_1 l k_m P - \frac{q^3}{B_1} \left(1 + E_2 \left[\frac{1}{\kappa L} \right]^2 \right), \quad (3.46)$$

де $S_M, B_1, E_1, E_2, S_q, S_l$ – константи моделі, κ – константа Кармана,

$$P = \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right)^2$$
(3.47)

генерація турбулентності за рахунок зсуву швидкості. На відміну від одновимірної задачі [212], де враховується лише вертикальний зсув швидкості, вираз для генерації (3.47) доповнено горизонтальним зсувом швидкості. Останній член в квадратних дужках рівняння (3.46) є пристінною функцією, що необхідна моделі для того, щоб правильно описати течію біля твердої границі. Згідно [212], відстань від твердої границі *L* визначено наступним чином:

$$L^{-1} = \frac{1}{2\pi} \iint \frac{dA(\vec{r}_0)}{\left|\vec{r} - \vec{r}_0\right|^3},\tag{3.48}$$

де \vec{r} – радіус-вектор для даної точки; \vec{r}_0 –радіус-вектор твердої границі; $dA(\vec{r}_0)$ – елементарна площадка поверхні твердої границі. Коли горизонтальний масштаб розрахункової області багато більше глибини, можна використовувати співвідношення:

$$L^{-1} = z^{-1} + (H - z)^{-1}$$
(3.49)

У моделі турбулентності (3.45-3.47) в якості відстані L використовується мінімальна відстань від точки до найближчої границі розрахункової області. Постійні моделі $A_1, A_2, B_1, C_1, E_1, E_2, S_q, S_l, \kappa$ відповідно до [13], складають відповідно 0.92, 0.74, 16.6, 0.08, 1.8, 1.32, 0.2, 0.2, 0.4

Умови на поверхні води $z = \eta \left(x, y, t
ight)$ мають вигляд

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + u \frac{\partial \eta}{\partial x} + v \frac{\partial \eta}{\partial y} = w, \qquad (3.50)$$

$$K_M \frac{\partial \vec{V}_h}{\partial z} = \frac{\vec{\tau}_0}{\rho_0},\tag{3.51}$$

де $\vec{V}_h = (u, v)$, $\vec{\tau}_0 = (\tau_{0x}, \tau_{0y})$ – дотичні напруження вітру. У дна на найближчому до нього розрахунковому рівні $z = H + z_b$

$$-u\frac{\partial H}{\partial x} - v\frac{\partial H}{\partial y} = w, \qquad (3.52)$$

$$K_M \frac{\partial \vec{V}_h}{\partial z} = \frac{\vec{\tau}_b}{\rho_0},\tag{3.53}$$

де $\vec{\tau}_b = \rho_0 C_D \left| \vec{V}_h \right| \vec{V}_h$, $C_D = \max\left(0.0005; \left(\frac{1}{\kappa} \ln\left(\frac{z_b + z_0}{z_0} \right) \right)^{-2} \right),$ $z_b = висота цершої розрахункової точки в цограничному шарі <math>z_0$ - вел

z_b – висота першої розрахункової точки в пограничному шарі, z₀ - величина шорсткості. Відповідні граничні умови для рівнянь у поверхні води і у дна мають вигляд:

$$(q^{2}(\eta), q^{2}l(\eta)) = (B_{1}^{2/3}u_{*}^{2}(0), 0),$$

$$(q^{2}(-H), q^{2}l(-H)) = (B_{1}^{2/3}u_{*}^{2}(-H), 0),$$

$$(3.54)$$

де $u_*(0)$, $u_*(-H)$ – динамічні швидкості,

$$u_{*}(0) = \frac{|\vec{\tau}_{0}|}{\rho_{0}}$$

$$u_{*}^{2}(-H) = \frac{\left|\vec{\tau}_{0}^{2}\right|}{\rho_{0}}.$$
(3.55)

На твердій стінці задані умови непротікання і співвідношення для пристінного логарифмічного шару, аналогічно (3.52-3.54). На рідких границях, де задається струмінь від гвинтового рушія, нормальна швидкість і потоки турбулентних характеристик дорівнюють нулю, крім області, з якої витікає струмінь. На відкритих границях використовуються два види умов. Одна з них являє собою умову випромінювання (див. напр. огляд [244]). Крім того, використовуються нові граничні умови, в яких застосовується ньютонівська схема засвоєння даних. Ідея методу полягає у введенні уздовж вільної границі відносно вузької релаксационной зони, в якій рівняння для підвищення рівня, що отримане інтегруванням рівняння нерозривності по глибині, доповнюється релаксаційними складовими:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial \overline{u} \left(H + \eta\right)}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v} \left(H + \eta\right)}{\partial y} = -\frac{\eta - \eta_B}{T} \alpha \tag{3.56}$$

Тут α –релаксаційний параметр, $\alpha = 1$ в релаксационной зоні, $\alpha = 0$ поза нею, T – час релаксації, який вибирається так, щоб забезпечити повне поглинання збурень, що йдуть з розрахункової області. Перевага даного методу над умовами випромінювання і методу релаксації FRS [207] полягає в тому, що швидкості природним чином обчислюються з повних рівнянь гідродинаміки, виходячи з засвоєння в зоні релаксації, в загальному випадку змінного в часі і просторі, рівня вільної поверхні.



Рисунок 3.15: Вертикальна сітка. Квазі-*z* (зліва), та *σ*-система (справа)

3.3.2 Узагальнена вертикальна система координат

В негідростатичній моделі використовується нова узагальнена вертикальна система координат [213], яка має своїми частинними випадками як *z* систему координат так і *σ* - систему координат. Перехід від декартової системи до узагальненої має вигляд

$$\begin{cases} x = x^* \\ y = y^* \\ t = t^* z = \eta(x^*, y^*, t^*) + s(x^*, y^*, k, t^*) \end{cases}$$

де k - вертикальна змінна. Верхній чисельний рівень k=1 відповідає водній поверхні (s = 0 при k = 1), а найнижчий чисельний рівень повторює дно (s = $-(H + \eta)$ при k = k_b). Перетворення включає в себе як граничні випадки стандартну σ -систему s = $\sigma(k)(H(x, y) + \eta(x, y, t))$ і квазі-z-систему s = $\sigma(k)(H_{\text{max}} + \eta(x, y, t))$, де H_{max} - максимальна глибина (рис. 3.15). В квазі-z системі s - рівні є функціями часу, і z-рівні змінюються у часі у відповідності зі змінами вільної поверхні. z-рівні представляють собою насправді квазі z-рівні, так як залежить від часу, а самі рівні змінюються за рахунок зміни рівня вільної поверхні. Але такі z-рівні не описують плавно особливості дна, як це можна зробити за рахунок σ - системи координат. Квазі z-система застосовується задля того, щоб уникнути обчислювальних помилок у розрахунках градієнту тиску, що існують у σ -системі координат. Перетворення

$$\frac{\partial Us_k}{\partial x} + \frac{\partial Vs_k}{\partial y} + \frac{\partial UA_1}{\partial k} + \frac{\partial VA_2}{\partial k} + \frac{\partial W}{\partial k} = 0, \qquad (3.57)$$

$$\frac{\partial U s_k}{\partial t} + \frac{\partial U^2 s_k}{\partial x} + \frac{\partial U V s_k}{\partial y} + \frac{\partial U \omega}{\partial k} - fV s_k = -g s_k \frac{\partial \eta}{\partial x}
-g \frac{s_k}{\rho_0} \int_{-1}^{1} \left[s_k \frac{\partial \rho}{\partial x} + A_1 \frac{\partial \rho}{\partial k'} \right] dk' - \left(\frac{\partial s_k Q}{\partial x} + \frac{\partial Q A_1}{\partial k} \right)$$
(3.58)

$$+ \frac{\partial}{\partial k} \left[\frac{(K_M + \nu)}{s_k} \frac{\partial U}{\partial k} \right] + Dif(U),
\frac{\partial V s_k}{\partial t} + \frac{\partial U V s_k}{\partial x} + \frac{\partial V^2 s_k}{\partial y} + \frac{\partial V \omega}{\partial k} + fU s_k = -g s_k \frac{\partial \eta}{\partial y}
-g \frac{s_k}{\rho_0} \int_{-1}^{1} \left[s_k \frac{\partial \rho}{\partial y} + A_2 \frac{\partial \rho}{\partial k'} \right] dk' - \left(\frac{\partial s_k Q}{\partial y} + \frac{\partial Q A_2}{\partial k} \right)$$
(3.59)

$$+ \frac{\partial}{\partial k} \left[\frac{(K_M + \nu)}{s_k} \frac{\partial V}{\partial k} \right] + Dif(V),$$

$$\frac{\partial W s_k}{\partial t} + \frac{\partial W U s_k}{\partial x} + \frac{\partial W V s_k}{\partial y} + \frac{\partial W \omega}{\partial k} = -\frac{\partial Q}{\partial k} + \frac{\partial}{\partial k} \left[\frac{K_M}{s_k} \frac{\partial W}{\partial k} \right] + Dif(W) \quad (3.60)$$

де $s_k = \delta s$ - відстань між s-рівнями

$$A_1 = -\left(\frac{\partial s}{\partial x} + \frac{\partial \eta}{\partial x}\right), \quad A_2 = -\left(\frac{\partial s}{\partial y} + \frac{\partial \eta}{\partial y}\right), \quad A_3 = -\left(\frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial \eta}{\partial t}\right)$$

Відмітимо, що в рівняннях (3.58,3.58) сили Коріоліса враховуються в так званому "традиційному наближенні" та $f = 2\Omega_z$ де Ω_z - вертикальна компонента кутової швидкості обертання Землі. Перетворена вертикальна швидкість ω має вигляд

$$\omega = W + A_1 U + A_2 V + A_3$$

Рівняння для скалярів ϕ з буде мати вигляд:

$$\frac{\partial\phi s_k}{\partial t} + \frac{\partial U\phi s_k}{\partial x} + \frac{\partial V\phi s_k}{\partial y} + \frac{\partial W\phi}{\partial k} = \frac{\partial}{\partial k} \left[\frac{(K_H + \chi_\phi)}{s_k} \frac{\partial\phi}{\partial k} \right] + Dif(\phi). \quad (3.61)$$

Члени, що описують горизонтальну дифузію мають вигляд:

$$\begin{split} Dif(U) &= \frac{\partial \hat{\tau}_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial k} \frac{A_1}{s_k} \hat{\tau}_{xx} + \frac{\partial \hat{\tau}_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial k} \frac{A_2}{s_k} \hat{\tau}_{xy}, \\ Dif(V) &= \frac{\partial \hat{\tau}_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial k} \frac{A_2}{s_k} \hat{\tau}_{yy} + \frac{\partial \hat{\tau}_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial k} \frac{A_1}{s_k} \hat{\tau}_{xy}, \\ Dif(W) &= \frac{\partial \hat{\tau}_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial k} \frac{A_2}{s_k} \hat{\tau}_{zx} + \frac{\partial \hat{\tau}_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial k} \frac{A_1}{s_k} \hat{\tau}_{zy}, \\ Dif(\phi) &= \frac{\partial \hat{q}_x}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial k} \frac{A_1}{s_k} \hat{q}_x + \frac{\partial \hat{q}_y}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial k} \frac{A_2}{s_k} \hat{q}_y, \end{split}$$

де

$$\begin{aligned} \hat{\tau}_{xx} &= 2K_M \left(s_k \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial k} A_1 U \right), \\ \hat{\tau}_{xy} &= \hat{\tau}_{yx} = K_M \left(s_k \frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial k} A_2 U + s_k \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial k} A_1 V \right), \\ \hat{\tau}_{yy} &= 2K_M \left(s_k \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial k} A_2 V \right), \\ \hat{\tau}_{xz} &= 2K_M \left(s_k \frac{\partial W}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial k} A_1 W \right), \\ \hat{\tau}_{yz} &= 2K_M \left(s_k \frac{\partial W}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial k} A_2 W \right), \end{aligned}$$

$$\hat{q}_x = K_H \left(s_k \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial k} A_1 \phi \right), \quad \hat{q}_y = K_H \left(s_k \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial k} A_2 \phi \right)$$

В багатьох моделях (РОМ, ВОМ, ROMS, THREETOX) вертикально проінтегровані рівняння руху та нерозривності (зовнішня мода) відокремлені від рівнянь з вертикальною структурою (внутрішня мода). Двовимірні рівняння зовнішньої моди розв'язуються явно з коротким кроком по часу Δt_E для того, щоб задовольнити умови Куранта для баротропних довгих хвиль. Тривимірні рівняння зовнішньої моди розв'язуються за напів-неявними схемами з великим кроком по часу Δt_I . Усереднені по вертикалі баротропні швидкості та негідростатичний тиск:

$$\bar{U} \equiv \int_{kb}^{1} U dk \qquad \bar{V} \equiv \int_{kb}^{1} V dk, \qquad \bar{Q} \equiv \int_{kb}^{1} Q dk.$$

Враховуючи це, рівняння для рівня буде переписано наступним чином

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial \overline{U}s_k}{\partial x} + \frac{\partial \overline{V}s_k}{\partial y} = 0.$$

Посередині по глибині рівняння для горизонтальних швидкостей мають вигляд

$$\begin{split} \frac{\partial \bar{U}s_k}{\partial t} &+ \frac{\partial \bar{U}^2 s_k}{\partial x} + \frac{\partial \bar{U}\bar{V}s_k}{\partial y} - f\bar{V}s_k + gs_k \frac{\partial \eta}{\partial x} = -\tau_{0x} + \tau_{bx} + Dif(\bar{U}) \\ &- g\frac{s_k}{\rho_0} \int_{kb}^{1} \int_{k}^{1} \left[s_k \frac{\partial \rho}{\partial x} + A_1 \frac{\partial \rho}{\partial k'} \right] dk' dk - \left(s_k \frac{\partial \bar{Q}}{\partial x} + A_1 \frac{\partial \bar{Q}}{\partial k} \right) + G_x, \\ \frac{\partial \bar{V}s_k}{\partial t} &+ \frac{\partial \bar{U}\bar{V}s_k}{\partial x} + \frac{\partial \bar{V}^2 s_k}{\partial y} + f\bar{U}s_k + gs_k \frac{\partial \eta}{\partial y} = -\tau_{0y} + \tau_{by} + Dif(\bar{V}) \\ &- g\frac{s_k}{\rho_0} \int_{kb}^{1} \int_{k}^{1} \left[s_k \frac{\partial \rho}{\partial y} + A_2 \frac{\partial \rho}{\partial k'} \right] dk' dk - \left(s_k \frac{\partial \bar{Q}}{\partial y} + A_2 \frac{\partial \bar{Q}}{\partial k} \right) + G_y, \end{split}$$

де G_x, G_y так звані дисперсійні члени ([73]), τ_{bx}, τ_{by} доні зсувні напруження, які можуть бути визначені з розв'язків внутрішньої моди.

3.3.3 Чисельний алгоритм

Особливістю цієї моделі є розщеплення поля швидкості на баротропну та бароклінну складові. Баротропна складова знаходиться шляхом розв'язання з малим кроком по часу (зовнішній крок) проінтегрованих по глибині рівнянь руху та нерозривності, а бароклінна компонента - шляхом розв'язку з більшим кроком по часу тривимірних вихідних рівнянь Нав'є-Стокса. Алгоритм включає чотири етапи.

1 етап: розрахунок вільної поверхні. Обчислення вільної поверхні проводиться з проінтегрованих по глибині рівнянь руху з малим кроком по часу $\Delta t_E = \Delta t_I / M$ за допомогою явної схеми. Початкове двовимірне поле швидкості на кожному етапі визначається інтегруванням по глибині знайденого на попередньому кроці тривимірного поля швидкості.

$$\begin{split} \frac{\eta^{m+1} - \eta^{m-1}}{2\Delta t_E} + \frac{\partial (\bar{U}s_k)^m}{\partial x} + \frac{\partial (\bar{V}s_k)^m}{\partial y} &= 0, \\ \frac{(\bar{U}s_k)^{m+1} - (\bar{U}s_k)^{m-1}}{2\Delta t_E} + \frac{\partial (\bar{U}^2s_k)^m}{\partial x} + \frac{\partial (\bar{U}\bar{V}s_k)^m}{\partial y} \\ -Dif\left(\bar{U}^{m-1}\right) + gs_k\frac{\partial\eta^m}{\partial x} - f\left(\bar{V}s_k\right)^m &= -\left(s_k\frac{\partial\bar{Q}^n}{\partial x} + A_1\frac{\partial\bar{Q}^n}{\partial k}\right) \\ -\frac{gs_k^n}{\rho_0}\int_{kb}^1\int_k^1 \left(s_k^n\frac{\partial\rho^n}{\partial x} + A_1\frac{\partial\rho^n}{\partial k'}\right)dk'dk + G_x^n - \frac{\tau^{(x)}}{\rho_0} + \tau_{bx}^n, \\ \frac{(\bar{V}s_k)^{m+1} - (\bar{V}s_k)^{m-1}}{2\Delta t_E} + \frac{\partial (\bar{V}\bar{U}s_k)^m}{\partial x} + \frac{\partial (\bar{V}^2s_k)^m}{\partial y} - \\ Dif\left(\bar{V}^{m-1}\right) + gs_k\frac{\partial\eta^m}{\partial y} + f\left(\bar{U}s_k\right)^m &= -\left(s_k\frac{\partial\bar{Q}^n}{\partial y} + A_2\frac{\partial\bar{Q}^n}{\partial k}\right) \\ -\frac{gs_k^n}{\rho_0}\int_{kb}^1\int_k^1 \left(s_k^n\frac{\partial\rho^n}{\partial y} + A_2\frac{\partial\rho^n}{\partial k'}\right)dk'dk + G_y^n - \frac{\tau^{(y)}}{\rho_0} + \tau_{by}^n. \end{split}$$

Індексом m = 1, ..., M позначається зовнішній часовий крок, тоді як індекс п відноситься до внутрішнього кроку. Умови Куранта чисельної стійкості накладають обмеження на зовнішній часовий крок Δt_E . Всі члени в правій частині рівняння розраховуються з внутрішнім кроком по часу та залишаються константами під час розрахунків з зовнішнім кроком по часу.

2 етап: гідростатичні компоненти поля швидкості та тиску. На цьому етапі тривимірні рівняння гідродинаміки розв'язуються за допомогою напівнеявної схеми з внутрішнім кроком по часу. Таким чином знаходиться проміжне поле швидкості.

$$\begin{split} \frac{\left(\tilde{U}s_k\right)^{n+1} - \left(Us_k\right)^{n-1}}{2\Delta t_I} + \frac{\partial\left(U^2s_k\right)^n}{\partial x} + \frac{\partial\left(UVs_k\right)^n}{\partial y} + \frac{\partial\left(U\omega s_k\right)^n}{\partial k} \\ &= -gs_k\frac{\partial\tilde{\eta}}{\partial x} - g\frac{s_k^n}{\rho_0}\int_k^1 \left[s_k^n\frac{\partial\rho^n}{\partial x} + A_1\frac{\partial\rho^n}{\partial k'}\right]dk' \\ &+ \frac{\partial}{\partial k}\left[\frac{\left(K_M + \nu\right)}{s_k^{n+1}}\frac{\partial\tilde{U}^{n+1}}{\partial k}\right] + Dif\left(U^{n-1}\right) + f(Vs_k)^n, \\ \frac{\left(\tilde{V}s_k\right)^{n+1} - \left(Vs_k\right)^{n-1}}{2\Delta t_I} + \frac{\partial\left(UVs_k\right)^n}{\partial x} + \frac{\partial\left(V^2s_k\right)^n}{\partial y} + \frac{\partial\left(V\omega\right)^n}{\partial k} \\ &= -gs_k\frac{\partial\tilde{\eta}}{\partial y} - g\frac{s_k^n}{\rho_0}\int_k^1 \left[s_k^n\frac{\partial\rho^n}{\partial y} + A_2\frac{\partial\rho^n}{\partial k'}\right]dk' \\ &+ \frac{\partial}{\partial k}\left[\frac{\left(K_M + \nu\right)}{s_k^{n+1}}\frac{\partial\tilde{V}^{n+1}}{\partial k}\right] + Dif\left(V^{n-1}\right) - f(Us_k)^n, \end{split}$$

$$\frac{\left(\tilde{W}s_k\right)^{n+1} - \left(Ws_k\right)^{n-1}}{2\Delta t_I} + \frac{\partial\left(UWs_k\right)^n}{\partial x} + \frac{\partial\left(VWs_k\right)^n}{\partial y} + \frac{\partial\left(W\omega s_k\right)^n}{\partial k}$$
$$= \frac{\partial}{\partial k} \left[\frac{\left(K_M + \nu\right)}{s_k^{n+1}} \frac{\partial\tilde{W}^{n+1}}{\partial k}\right] + Dif\left(W^{n-1}\right)$$

На цьому етапі задовольняються всі граничні умови для поля швидкості.
3 етап: *негідростатичне поле швидкості та тиску*. Знайдене на попередньому етапі проміжне поле швидкості доповнюється негідростатичною компонентою поля швидкості за рахунок градієнту негідростатичного тиску

$$\frac{(Us_k)^{n+1} - \left(\tilde{U}s_k\right)^{n+1}}{2\Delta t_I} = -\left(\frac{\partial (s_kQ)^{n+1}}{\partial x} + \frac{\partial (QA_1)^{n+1}}{\partial k}\right), \qquad (3.62)$$

$$\frac{(Vs_k)^{n+1} - \left(\tilde{V}s_k\right)^{n+1}}{2\Delta t_I} = -\left(\frac{\partial (s_kQ)^{n+1}}{\partial y} + \frac{\partial (QA_2)^{n+1}}{\partial k}\right),\tag{3.63}$$

$$\frac{(Ws_k)^{n+1} - \left(\tilde{W}s_k\right)^{n+1}}{2\Delta t_I} = -\frac{\partial Q^{n+1}}{\partial k}.$$
(3.64)

таким чином, щоб задовольнити рівнянню нерозривності.

$$\frac{\partial (Us_k)^{n+1}}{\partial x} + \frac{\partial (Vs_k)^{n+1}}{\partial y} + \frac{\partial (UA_1)^{n+1}}{\partial k} + \frac{\partial (VA_2)^{n+1}}{\partial k} + \frac{\partial W^{n+1}}{\partial k} = 0.$$

В результаті задача зводиться до розв'язання рівняння Пуассона для негідростатичної компоненти тиску:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \left(s_k \frac{\partial Q}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(A_1 \frac{\partial Q}{\partial k} \right) + \frac{\partial}{\partial k} \left(A_1 \frac{\partial Q}{\partial x} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left(s_k \frac{\partial Q}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(A_2 \frac{\partial Q}{\partial k} \right) + \frac{\partial}{\partial k} \left(A_2 \frac{\partial Q}{\partial y} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial k} \left(\frac{1}{s_k} \frac{\partial Q}{\partial k} \right) + \frac{\partial}{\partial k} \left(\frac{A_1^2}{s_k} \frac{\partial Q}{\partial k} \right) + \frac{\partial}{\partial k} \left(\frac{A_2^2}{s_k} \frac{\partial Q}{\partial k} \right) \end{bmatrix}^{n+1} \\ = \frac{1}{2\Delta t_I} \left[\frac{\partial \left(\tilde{U} s_k \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(\tilde{V} s_k \right)}{\partial y} + \frac{\partial \left(\tilde{U} A_1 \right)}{\partial k} + \frac{\partial \left(\tilde{V} A_2 \right)}{\partial k} + \frac{\partial \tilde{W}}{\partial k} \right]^{n+1}.$$

Дискретизоване рівняння представляє собою систему лінійних рівнянь, матриця якої є несиметричною, п'ятнадцяти діагональною.

$$a_{1}Q_{i+1,j,k} + a_{2}Q_{i-1,j,k} + a_{3}Q_{i+1,j,k+1} + a_{4}Q_{i-1,j,k+1} + a_{5}Q_{i,j+1,k}$$
$$+a_{6}Q_{i,j-1,k} + a_{7}Q_{i,j+1,k+1} + a_{8}Q_{i,j-1,k+1} + a_{9}Q_{i+1,j,k-1} + a_{10}Q_{i-1,j,k-1}$$
$$+a_{11}Q_{i,j+1,k-1} + a_{12}Q_{i,j-1,k-1} + a_{13}Q_{i,j,k+1} + a_{14}Q_{i,j,k-1} + a_{15}Q_{i,j,k} = R_{Q}$$

де

$$\begin{aligned} a_{1} &= \frac{dz_{ijk}(s_{k})_{i+1/2,j}}{dx_{ij}ddx_{ij}}, \quad a_{2} &= \frac{dz_{ijk}(s_{k})_{i-1/2,j}}{dx_{ij}ddx_{i-1,j}}, \\ a_{3} &= -\frac{dz_{ijk}}{dx_{ij}} \left(\frac{A_{1}^{i+1,j,k}}{dz_{i+1,j}} + \frac{A_{1}^{i,j,k+1}}{dz_{i,j}} \right), \quad a_{4} &= \frac{dz_{ijk}}{dx_{ij}} \left(\frac{A_{1}^{i-1,j,k}}{dz_{i-1,j}} + \frac{A_{1}^{i,j,k+1}}{dz_{i,j}} \right), \\ a_{5} &= \frac{dz_{ijk}(s_{k})_{i,j-1/2}}{dy_{ij}dyy_{ij}}, \quad a_{6} &= \frac{dz_{ijk}(s_{k})_{i,j-1/2}}{dy_{ij}dyy_{i,j-1}}, \\ a_{7} &= -\frac{dz_{ijk}}{dy_{ij}} \left(\frac{A_{2}^{i,j+1,k}}{dz_{i,j+1}} + \frac{A_{2}^{i,j,k+1}}{dz_{i,j}} \right), \quad a_{8} &= \frac{dz_{ijk}}{dy_{ij}} \left(\frac{A_{2}^{i,j-1,k}}{dz_{i,j-1}} + \frac{A_{2}^{i,j,k+1}}{dz_{i,j}} \right), \\ a_{9} &= \frac{dz_{ijk}}{dx_{ij}} \left(\frac{A_{1}^{i,j+1,k}}{dz_{i+1,j}} + \frac{A_{1}^{i,j,k-1}}{dz_{i,j}} \right), \quad a_{10} &= -\frac{dz_{ijk}}{dx_{ij}} \left(\frac{A_{1}^{i-1,j,k}}{dz_{i-1,j}} + \frac{A_{1}^{i,j,k-1}}{dz_{i,j}} \right), \\ a_{11} &= \frac{dz_{ijk}}{dy_{ij}} \left(\frac{A_{2}^{i,j+1,k}}{dz_{i,j+1}} + \frac{A_{2}^{i,j,k-1}}{dz_{i,j}} \right), \quad a_{12} &= -\frac{dz_{ijk}}{dy_{ij}} \left(\frac{A_{2}^{i,j-1,k}}{dz_{i,j-1}} + \frac{A_{2}^{i,j,k-1}}{dz_{i,j}} \right), \\ a_{13} &= -\frac{1 + \left(A_{1}^{i,j,k+1/2}\right)^{2} + \left(A_{2}^{i,j,k+1/2}\right)^{2}}{(s_{k})_{ij} \cdot dz_{ijk}} - \frac{1}{(s_{k})_{ij}} \left(\frac{1 + \left(A_{1}^{i,j,k-1/2}\right)^{2} + \left(A_{2}^{i,j,k-1/2}\right)^{2}}{dz_{ij,k-1}} \right) \\ a_{15} &= -\frac{dz_{ijk}(s_{k})_{i+1/2,j}}{dx_{ij}dxx_{ij}} - \frac{dz_{ijk}(s_{k})_{i-1/2,j}}{dx_{ij}dxx_{i-1,j}} - \frac{1}{(s_{k})_{ij}} \left(\frac{1 + \left(A_{1}^{i,j,k-1/2}\right)^{2} + \left(A_{2}^{i,j,k-1/2}\right)^{2}}{dz_{ij,k-1}} \right) \\ \end{array}$$

$$+ \frac{1 + \left(A_{1}^{i,j,k+1/2}\right)^{2} + \left(A_{2}^{i,j,k+1/2}\right)^{2}}{dz z_{ijk}} - \frac{dz_{ijk}(s_{k})_{i,j+1/2}}{dy_{ij}dyy_{ij}} - \frac{dz_{ijk}(s_{k})_{i,j-1/2}}{dy_{ij}dyy_{i,j-1}} \\ R_{Q} = \frac{1}{2\Delta t_{I}} \left[\frac{\tilde{U}_{i+1,j,k}(s_{k})_{i+1/2,j} - \tilde{U}_{i,j,k}(s_{k})_{i-1/2,j}}{dx_{i,j}} + \frac{\tilde{V}_{i+1,j,k}(s_{k})_{i+1/2,j} - \tilde{V}_{i,j,k}(s_{k})_{i-1/2,j}}{dy_{i,j}} + \left(\tilde{U}_{i,j,k-1}A_{1}^{i,j,k-1} - \tilde{U}_{i,j,k+1}A_{1}^{i,j,k+1}\right) \\ + \left(\tilde{V}_{i,j,k-1}A_{2}^{i,j,k-1} - \tilde{V}_{i,j,k+1}A_{2}^{i,j,k+1}\right) + \left(\tilde{W}_{i,j,k} - \tilde{W}_{i,j,k+1}\right) \right]^{n+1}$$

де

$$dxx_{i,j} = \frac{dx_{i,j} + dx_{i+1,j}}{2}$$
$$dyy_{i,j} = \frac{dy_{i,j} + dy_{i,j+1}}{2}$$
$$dz_{i,j,k} = z_{i,j,k} - z_{i,j,k+1}$$
$$dzz_{i,j,k} = zz_{i,j,k} - zz_{i,j,k+1}$$

Система розв'язується за допомогою методу спряжених градієнтів. Після того як знайдено розподіл тиску, знаходиться залишкове негідростатичне поле швидкості. На твердих границях ставляться умови нульових потоків. На вільній поверхні та на відкритих границях Q = 0. Після того, як знайдено поле негідростатичного тиску, обчислюється відповідне поле швидкості $(U^{n+1}, V^{n+1}, W^{n+1})$ з рівнянь (3.62-3.64).

4 етап: *розрахунок скалярів*. На цьому етапі розв'язуються рівняння для скалярів (температура, солоність, а також характеристики турбулентності).

$$\frac{(\phi_i s_k)^{n+1} - (\phi_i s_k)^{n-1}}{2\Delta t_i} + \frac{\partial (U\phi_i s_k)^n}{\partial x} + \frac{\partial (V\phi_i s_k)^n}{\partial y} + \frac{\partial (W\phi_i s_k)^n}{\partial k}$$
$$= \frac{\partial}{\partial k} \left[\frac{(K_H + \chi_\phi)}{s_k} \frac{\partial \phi_i^{n+1}}{\partial k} \right] + Dif\left(\bar{\phi}_i^{n-1}\right)$$

Для розрахунків застосовувалась напів-неявна схема з неявним представленням складових вертикальної дифузії. Для обчислення адвективних складових використовувались різницеві схеми другого порядку, що належать до так званих TVD схем. Запропонований алгоритм поєднує у собі найбільш ефективні компоненти гідростатичних моделей, що дозволяє розглядати модель як узагальнення та розширення існуючих гідростатичних моделей.

Застосування представленої гідродинамічної моделі негідростатичних течій представлено в розділах 4.3.2,4.3.4,4.3.5,4.3.6.

3.4 Модель переносу багатофракційних намулів

Одною з характерних особливостей прибережних зон морів є наявність завислих намулів та донних відкладень, які можуть впливати як на гідродинаміку через зміну рівня дна, каламутності води, густини каламутних потоків, так і напряму впливати на розповсюдження різного роду забруднень через процеси адсорбції. Тому моделювання процесів, що пов'язані з переносом намулів становить як окремий інтерес для задач прибережної гідродинаміки, так і є важливим фактором при моделюванні транспорту забруднень. В даному розділі представлена тривимірна математична модель транспорту багатофракційних намулів та морфологічних змін дна. Модель описує транспорт як незв'язних, так і зв'язних намулів, а також суміші фракцій різних розмірів зв'язних/незв'язних намулів. Шар води та дно поділені на набір шарів: шар води, кілька активних донних шарів та донний шар, що не розмивається. Транспорт намулів у водному шарі описується рівнянням переносу:

$$\frac{\partial S_{p,i}^w}{\partial t} + \vec{U}\nabla S_{p,i}^w = W_{p,i}\frac{\partial S_{p,i}^w}{\partial z} + DIFF\left(S_{p,i}^w\right),\tag{3.65}$$

де t час; z-вертикальна координата, напрямлена вгору; $\vec{U} = (U, V, W)$ швид-

кість течії; $\vec{\nabla}$ тривимірний векторний оператор; i – індекс класу розмірів намулів; n –загальна кількість класів розмірів намулів; $S_{p,i}$ концентрація і-го класу завислих намулів (кг м⁻³); $W_{p,i}$ швидкість осідання намулу класу i (м с⁻¹). Член *DIFF* описує вертикальну та горизонтальну турбулентну дифузію

$$DIFF() = \frac{\partial}{\partial z} \nu_T \frac{\partial()}{\partial z} + \vec{\nabla}_H K_H \vec{\nabla}_H(),$$

де ν_T та K_H - вертикальні та горизонтальні коефіцієнти турбулентної дифузії (м² с⁻¹), $\vec{\nabla}_H$ горизонтальний векторний оператор.

Граничні умови на вільній поверхні $z = \eta$ та на дні z = -H:

$$\nu_T \frac{\partial S_{p,i}^w}{\partial z} - (W - W_{p,i}) S_{p,i}^w = 0, \qquad z = \eta$$
(3.66)

$$\nu_T \frac{\partial S_{p,i}^w}{\partial z} - (W - W_{p,i}) S_{p,i}^w = -D_i + E_i, \qquad z = -H \tag{3.67}$$

де D_i швидкість осідання намулів (кг м⁻² с⁻¹), а E_i швидкість ерозії намулів (кг м⁻² с⁻¹).

Для осідання та ерозії суміші зв'язних та незв'язних намулів ми слідуємо припущенню [298] про те, що ці процеси залежать від критичної фракції зв'язних намулів у суміші у дні $\varphi_{0,cr}$. Ерозія суміші зв'язних та незв'язних намулів є незалежною, якщо фракція зв'язних намулів є нижчою за критичну. При концентрації зв'язних намулів вище критичної дно поводиться зв'язно. В незв'язному режимі обмін з дном зв'язних та незв'язних намулів відбувається незалежно, в той час як в зв'язному режимі ерозія обох типів намулів відбувається як ерозія зв'язних намулів. Осідання є завжди незалежним процесом незалежно від концентрації зв'язних намулів.

Якщо об'ємна фракція зв'язних намулів у верхньому донному шарі $\varphi_{0,1}$

є нижчою за критичне значення $\varphi_{0,cr}$ то ерозія та осідання відбувається у незв'язному режимі. Потік за рахунок ерозії для незв'язних намулів розраховується згідно формул [301]:

$$E_{i} = E_{0,i}(d_{i})(1-\varepsilon_{1})\varphi_{i,1} \left(\frac{\tau_{b}}{\tau_{cr,i}(1+\varphi_{0,1})} - 1\right)^{1.5} \quad \text{коли} \quad \tau_{b} > \tau_{cr,i} \qquad (3.68)$$

де $E_{0,i}(d_i) = 0.015 W_{p,i} \rho_s d_i a^{-1} D_*^{-0.3}$ – швидкість ерозії; $D_* = \left[g(\rho_s \rho_w^{-1} - 1)\nu^{-2}\right]^{1/3}$; d_i - діаметр піщинок; ε_1 - пористість верхнього донного шару; $\varphi_{i,1}$ - об'ємна концентрація намулу класу *i* у верхньому шарі дна; τ_b - донне напруження тертя; $\tau_{cr,i}$ - критичне напруження тертя для намулів класу *i*; $a = 3d_i$ відліковий рівень над дном. Потік осідання незв'язних намулів моделюється як потік частинок, які падають на дно із швидкістю осідання $W_{p,i}$:

$$D_i = W_{p,i} S_{p,i}^w (-H) (3.69)$$

де $S_{p,i}^w(-H)$ придонна концентрація завислих намулів класу i > 0.

Потік ерозії для зв'язних намулів формулюється згідно [61]

$$E_0 = E_{0,0}(1 - \varepsilon_1)\varphi_{0,1}\left(\frac{\tau_b}{\tau_{cr,0}} - 1\right), \quad \tau_b > \tau_{cr,0}$$
(3.70)

де τ_{cd} - критичне напруження тертя для осідання зв'язних намулів; $\tau_{cr,0}$ критичне напруження тертя для ерозії зв'язних намулів, $E_{0,0}$ – швидкість ерозії для зв'язних намулів. Для зв'язних намулів осідання відбувається тільки коли напруження тертя менше критичного напруження тертя для осідання:

$$D_0 = -W_{p,0} S_{p,0}^w \left(1 - \frac{\tau_b}{\tau_{cd}} \right), \qquad \tau_b < \tau_{cd}$$
(3.71)

Якщо фракція зв'язних намулів у дні вища критичної ($\phi_0 > \phi_{0,cr}$) тоді ерозія для всіх фракцій ($0 \le i \le n$) відбувається в зв'язному режимі:

$$E_{i} = E_{0,0} \left(1 - \varepsilon_{1}\right) \varphi_{i} \left(\frac{\tau_{b}}{\tau_{cr,0}} - 1\right) \quad \text{для} \quad i = 0, n \tag{3.72}$$



Рисунок 3.16: Схема донних шарів намулів

Неперервний вертикальний розподіл намулів апроксимується як послідовність добре перемішаних шарів ($1 \le j \le m$) слідуючи [260] та [311]. Зміна в часі товщини Z_1 та маси намулів у верхньому шарі (j=1) описується рівняннями

$$\frac{\partial Z_1}{\partial t} = \frac{1}{1 - \varepsilon_0} \sum_{i=0}^n \frac{D_i}{\rho_{s,i}} - \frac{1}{1 - \varepsilon_1} \sum_{i=0}^n \frac{E_i}{\rho_{s,i}}$$
(3.73)

$$\frac{\partial Z_1 \rho_{s,i} \left(1-\varepsilon_1\right) \varphi_{i,1}}{\partial t} = -W_{bt}^{(1,2)} \left(\varphi_{i,1} \rho_{s,i} \left(1-\varepsilon_1\right) - \varphi_{i,2} \rho_{s,i} \left(1-\varepsilon_2\right)\right) + D_i - E_i$$
(3.74)

Тут ε_0 – емпіричний параметр, що визначає пористість новоутвореного шару намулів [220].

Зміна фракційного складу в інших шарах ($1 < j \le m$) описується рівняннями

$$\frac{\partial Z_{j}\rho_{s,i}\left(1-\varepsilon_{j}\right)\varphi_{i,j}}{\partial t} = -W_{bt}^{(j,j+1)}\left(\varphi_{i,j}\rho_{s,i}\left(1-\varepsilon_{j}\right)-\varphi_{i,j+1}\left(1-\varepsilon_{j+1}\right)\right) + W_{bt}^{(j-1,j)}\left(\varphi_{i,j-1}\rho_{s,i}\left(1-\varepsilon_{j-1}\right)-\varphi_{i,j}\rho_{s,i}\left(1-\varepsilon_{j}\right)\right),$$
(3.75)

Шари донних намулів з товщиною Z_j характеризуються пористістю ε_j , фракцією частинок *i*-го класу $\varphi_{i,j}$ в *j*-го шару ($\sum_{i=1}^{n} \varphi_{i,j} = 1$) та густини фракції намулу $\rho_{s,i}$. Швидкість обміну за рахунок біотурбації $W_{bt}^{(j,j+1)}$ між шарами *j* та *j* + 1 може бути параметризована за допомогою коефіцієнту біотурбації $\nu_{B,j}$ в шарах таким чином

$$W_{bt}^{(j,j+1)} = \frac{2\nu_{B,j}\nu_{B,j+1}}{\nu_{B,j}Z_{j+1} + \nu_{B,j+1}Z_j}.$$
(3.76)

По суті, біотурбація діє на мікроскопічному рівні окремих частинок, які переміщуються окремо у вигляді дискретних подій змішування, викликаних різними типами взаємодії між донними організмами та намулами, такі як закопування, споживання/екскреція та пересування. Такими донними організмами можуть бути донні риби, молюски, ракоподібні, черви. Морські тварини риють нори, що сприяють фільтрації та додатковому перемішуванню намулів. Також процес перемішування може носити нелокальний характер завдяки тому, що, наприклад, споживання та екскреція намулів черв'яками рознесене у часі і просторі. Для опису таких процесів існують більш складні математичні моделі [219]. Представлена модель не ставить за мету описати кожну індивідуальну подію змішування, а використовує модель з одним параметром інтенсивності перемішування – коефіцієнт біодифузії [83]. Зменшення коефіцієнту біодифузії з відстанню від поверхні дна $z_b = -H - z$ може бути апроксимоване залежністю $u_{B,j} =
u_B^0 \exp(-z_{bj}^2/z_{eff}^2)$ де z_{eff} характерний масштаб затухання для біотурбації, $z_j = \sum_{k=1}^j Z_k$, ν_B^0 - значення коефіцієнту біотурбації на поверхні.

При перемішуванні завдяки біотурбації відбувається масообмін між шарами намулів. Якщо гранулометричний склад намулів, був неоднорідний по вертикалі, то відбувається зміна фракційного складу намулів. Якщо пористість ε_j також неоднорідна по вертикалі, то пористість також буде змінюватись з часом. При біотурбації незмінними залишаються границі між шарами намулів, тобто товщини шарів (крім верхнього шару, де відбувається осідання та ерозія намулів). Тому для знаходження в загальному випадку невідомої пористості ε_j маємо ще одне співвідношення збереження загального об'єму шару намулів, що включає об'єм, власне, намулів, та порової води. Отримаємо таку умову для j > 1:

$$Z_{j}\frac{\partial\varepsilon_{j}}{\partial t} = -W_{bt}^{j,j+1}(\varepsilon_{j} - \varepsilon_{j+1}) + W_{bt}^{j-1,j}(\varepsilon_{j-1} - \varepsilon_{j}), \qquad (3.77)$$

В першому шарі умова збереження об'эму не виконується, тому що верхня границя шару є рухомою через змучування та випадіння намулів. Зміна товщини першого рівня задається рівнянням (3.73). Для того, щоб врахувати зміну пористості завдяки осіданню та ерозії, обчислимо об'єм води (на одиницю площі за одиницю часу), що додається при відкладанні намулів, та вимивається при ерозії. Об'єм піщинок фракції *i*, що відкладаються завдяки випадінню дорівнює D_i/ρ_i . Тоді загальний об'єм шару, що при цьому утворюється (включаючи порову воду) дорівнює:

$$\Delta V_{d,i} = \frac{D_i}{\rho_i (1 - \varepsilon_0)}$$

Тоді об'єм води, що долучається до порової води шару разом із піщинками, що осідають, обчислюється так

$$\Delta V_{dw,i} = \frac{\varepsilon_0 D_i}{\rho_i (1 - \varepsilon_0)}$$

При розмиванні об'єм води, що змивається разом із піщинками можна обчислити таким же чином, використовуючи ε_1 замість ε_0 , тому що вода, що вимивається має пористість того шару, з якого вона вимивається.

$$\Delta V_{ew,i} = \frac{\varepsilon_1 D_i}{\rho_i (1 - \varepsilon_1)}$$

Тоді рівняння зміни пористості першого шару задається співвідношенням:

$$\frac{\partial Z_1 \varepsilon_1}{\partial t} = -W_{bt}^{1,2}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) + \frac{\varepsilon_0}{1 - \varepsilon_0} \sum_{i=0}^n \frac{D_i}{\rho_i} - \frac{\varepsilon_1}{1 - \varepsilon_1} \sum_{i=0}^n \frac{E_i}{\rho_i}$$
(3.78)

Таким чином, рівняння (3.73,3.74,3.75,3.77,3.78) дозволяють описати зміну товщини першого шару намулів, фракційний склад та пористість всіх шарів для загального випадку неоднорідного розподілу по вертикалі фракційного складу та пористості намулів.

Якщо розглянути ізольований верхній шар намулів, випадок коли відбувається тільки ерозія цього шару і нульове осідання ($D_i = 0$), то при вимиванні порової води пористість шару не повинна змінюватись. В цьому можна пересвідчитись, якщо представити рівняння (3.78) у вигляді:

$$Z_1 \frac{\partial \varepsilon_1}{\partial t} + \varepsilon_1 \frac{\partial Z_1}{\partial t} = -\frac{\varepsilon_1}{1 - \varepsilon_1} \sum_{i=0}^n \frac{E_i}{\rho_i}$$
(3.79)

Тепер, підставивши $\frac{\partial Z_1}{\partial t}$ з рівняння (3.73)

$$\frac{\partial Z_1}{\partial t} = -\frac{1}{1-\varepsilon_1} \sum_{i=0}^n \frac{E_i}{\rho_{s,i}}$$
(3.80)

отримаємо, що

$$Z_1 \frac{\partial \varepsilon_1}{\partial t} = 0, \qquad (3.81)$$

тобто пористість верхнього шару не змінюється при розмиванні.

У загальному випадку, коли наявний обмін з нижнім шаром, осідання та ерозія, використавши рівняння (3.73) можна прийти до більш простої форми рівняння (3.78), яке вже не залежить від ерозії:

$$Z_1 \frac{\partial \varepsilon_1}{\partial t} = -W_{bt}^{1,2}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) + \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_1}{1 - \varepsilon_0} \sum_{i=0}^n \frac{D_i}{\rho_i}$$
(3.82)

Результати застосування моделі переносу намулів представлені в розділі (4.3)

3.5 Висновки до розділу

Модифікована тривимірна гідростатична гідродинамічна модель для врахування взаємодії поверхневих хвиль та течій. Модель здатна відтворювати складну тривимірну структуру течій викликаних хвильовими рухами. Розрахунки моделі порівнювалася з аналітичним розв'язком та з вимірами в лабораторному експерименті, в якому формувався вздовжбереговий струмінь під дією поверхневих хвиль, що падають під кутом до берега. Порівняння з експериментальними даними показало необхідність використання тривимірного представлення радіаційних напружень, а також необхідність врахування додаткового хвильового придонного тертя і потоку імпульсу в течії за рахунок перекидання хвиль.

Представлено нову модель переносу намулів, що оперує з сумішшю багатофракційних намулів та здатна описувати морфологічні зміни дна та зміну фракційного складу в донних шарах намулів. Вперше побудоване рівняння для зміни пористості викликаних механічним перемішуванням донними організмами (біотурбацією).

Вдосконалено чисельний алгоритм тривимірної негідростатичної моделі з вільною поверхнею для застосування узагальненої вертикальної системи координат, що дозволяє розв'язувати задачі моделювання негідростатичних струменевих та гравітаційних течій в прибережних областях різкими змінами рельєфу дна.

Розділ 4

ЛАГРАНЖЕВА МОДЕЛЬ ПЕРЕНОСУ БАГАТОФРАКЦІЙНИХ НАМУЛІВ

В даному розділі запропонована нова тривимірна лагранжева модель переносу зв'язних та незв'язних багатофракційних намулів у випадку коли тип донного матеріалу та його гранулометричний склад змінні в області моделювання. Модель спряжена з тривимірними моделями гідродинаміки, в яких використовується сігма-система координат, що дозволяє природнім чином описувати перенос в пограничному шарі та переформування дна. Результати розрахунків співставлені з аналітичним та чисельним розв'язками ейлерових задач та лабораторним експериментом. Модель застосована до задачі зимової конвекції на арктичному шельфі, що викликає рушання намулів на схилах та підсилення густинних гравітаційних течій за рахунок намулів.

4.1 Вступ

Моделювання переносу намулів у повітряному і водному середовищі є складною задачею, особливо у випадку гравітаційних потоків, що несуть намули [148], коли важлива взаємодія завислих намулів та течій. Прикладом таких течій на шельфі океанів і морів є, наприклад, каламутні потоки в підводних каньйонах на схилах. Додаткові складності виникають, коли каламутні потоки є полідисперсними і коли плавучість в гравітаційних течіях підтримується різницею температур та солоності разом із намулами. Каламутні потоки із гирл річок в море [93] та шельфова конвекція в полярних морях [127] відносяться до такого типу течій.

Останніми роками був розроблений ряд тривимірних ейлерових та лагранжевих моделей переносу намулів (див. напр.[131,182,171,177]). Лагранжеві моделі [171,177] мають ряд переваг у порівнянні з ейлеровими, які зумовлені природнім описом транспорту часток та можливістю опису переносу на масштабах менших за крок ейлерової сітки. Однак, на відміну від ейлерових моделей [131,182], у відомих лагранжевих моделях не розглядаються процеси переносу багатофракційних намулів. Зворотній вплив сил плавучості, що викликані присутністю завислих намулів також бралося до уваги лише в деяких ейлерових моделях (напр. [148],[93],[127]).

В цьому розділі описана тривимірна лагранжева модель переносу зв'язних та незв'язних намулів, що є узагальненням двовимірної моделі [6]. Модель поєднана з тривимірними моделями гідродинаміки, в яких використовується сигма-система координат, що дозволяє природнім шляхом описувати перенос у пограничному шарі і переформування дна. Результати розрахунків співставлені з аналітичними і чисельними розв'язками ейлерових задач. Наведені результати моделювання переносу намулів в лабораторному каналі [302]. Модель застосована до задачі зимової конвекції на арктичному шельфі, коли конвективні потоки викликають рушання намулів на схилах і посилення гравітаційних течій за рахунок намулів.

4.2 Алгоритм лагранжевої моделі

4.2.1 Загальний опис моделі

Так же як і в [6] тривимірна лагранжева модель описує розмив, перенос та осідання багатофракційних зв'язних та незв'язних намулів, а також їх сумішей. В подальшому для скорочення будемо називати "піском" фракції незв'язних намулів починаючи з гальки і закінчуючи розміром часток D > 0.063мм, а "мулом" – намули, що включають в себе мул (0.063 мм > D > 0.004 мм) та глину (D < 0.004 мм). Водний шар та дно поділене на ряд шарів: водний шар, активний шар, декілька донних шарів та нижній донний шар (Рис. 4.1). Завислі намули переносяться течіями та хвилями у водному шарі. В активному шарі (АШ) частки піску можуть рухатись у вигляді донних рухомих наносів, підійматися в шар води або випадати в самий верхній активний донний шар(АДШ). Якщо в результаті ерозії або дивергенції донних рухомих наносів товщина АДШ h_{AB} стає рівною нулеві, тоді нижній шар починає взаємодіяти з водним шаром та стає АДШ. Якщо товщина АДШ перебільшує деяке значення $h_{AB}^{(c)}$, тоді виникає новий донний шар. Нижній донний шар, що не розмивається знаходиться нижче донних слоїв. Модель дозволяє розраховувати перенос будь-якої кількості фракцій піску. Припускається,що всі часточки піску даного класу розмірів в АШ та АДШ піддаються впливу потоку води та залучення до водного шару та АШ, відповідно. Розподіл фракцій піску в АШ відрізняється від АДШ внаслідок різної швидкості залучення часток різного розміру у водний шар. Таке сортування приводить природнім шляхом до ефекту самовідмостки донного матеріалу. Вплив мігруючих гряд на перенос і сортування донного матеріалу в моделі не враховується.

Мул рухається у вигляді завислих намулів лише у водному шарі, в який



Рисунок 4.1: Схематичне представлення процесів переносу намулів в лагранжевій моделі [6]

він потрапляє з *АДШ* та осідає в *АДШ*. Моделюється лише один клас мулів. Консолідація донних шарів в моделі не враховується. Процесу змучування піску та мулу в суміші можуть бути взаємопов'язані. Умова збереження маси суміші в *АДШ*, що включає одну фракцію мулу та *n* фракцій піску має вигляд:

$$p_m + \sum_{i=1}^n p_{si} = 1 \tag{4.1}$$

де p_{si} та p_m вміст *i*-ї фракції песку та фракції мулу, відповідно, який визначається як відношення маси часток одного класу в *АДШ* на елементі поверхні дна до маси всіх часток намулів, що знаходяться в цьому об'ємі. Слідуючи [297-298] покладаємо, що змучування суміші мулу та піску відбувається згідно закономірностям незв'язних намулів якщо вміст зв'язних намулів в *АДШ* p_m нижче за критичне значення $p_{m,cr}$, та по закономірностям для зв'язних намулів, якщо концентрація зв'язних намулів вище за критичну $p_m > p_{m,cr}$. В той же час осідання обох класів намулів відбувається незалежно. Значення $p_{m,cr}$ для Північного моря, наприклад, дорівнює приблизно 0.3 [297].

4.2.2 Перенос завислих намулів

Для моделювання змучування, випадіння та переносу намулів використовується лагранжева техніка. Концентрація завислих намулів характеризується ансамблем часток, а задача переносу зводиться до стеження за траєкторією часток. Маса суспензії у водному шарі і в *АШ* розподілена між великою кількістю часток однакової маси. Кожна частка має три властивості протягом моделювання:

- 1. Стан (або "зависла" або "На дні")
- 2. Клас розмірів (від 1 до *п*-того, "0" клас відповідає мулу)
- 3. Клас джерела (от 1 до *n_s*-того)

Частинки "На дні" знаходяться в AIII, де частинки піску та мулу можуть залишатися на дні. Частинки піску в AIII можуть також рухатись у вигляді рухомих донних наносів. AIIII є джерелом часток для AIII- коли цей шар втрачає масу за рахунок переходу часток в завислі намули та/або дивергенції потоку рухомих донних намулів. Він також забирає частки із AIII, коли товщина останнього h_A перевищує деяке задане значення. Завислі частки мулу характеризуються діаметром "флоків" D_{floc} , що виникають внаслідок злипання (флокуляції) часток в турбулентному водному шарі. Частки марковані класом джерела для того, щоб мати можливість відстежити траекторию часток від заданого джерела.

Для моделювання переносу завислих намулів у водному шарі використовується лагранжева модель випадкових блукань (Random Dispersion Model или RDM), в якій зсуви часток моделюються як випадковий марківський процес [315]. Рівняння для зміщення частинки $d\vec{x} = (dx, dy, dz)$ на кожному кроці по часу dt мають вигляд

$$dx = udt + \left(\frac{\partial K_x}{\partial x}\right)dt + \sqrt{2K}d\xi_x,\tag{4.2}$$

$$dy = vdt + \left(\frac{\partial K_y}{\partial y}\right)dt + \sqrt{2K}d\xi_y, \qquad (4.3)$$

$$dz = wdt + w_s dt + \left(\frac{\partial K_z}{\partial z}\right) dt + \sqrt{2K_x} d\xi_z.$$
(4.4)

Тут $\vec{U} = (u, v, w)$ – адвективна складова швидкості частинки: $\vec{x}(t) = (x, y, z)$ – координати частинки; вісь z напрямлена вгору, а початок координат z = 0 розміщено на незбуреній поверхні води; w_s – швидкість гравітаційного осідання частинок у воді, K_x, K_y, K_z – ненульові діагональні елементи тензора коефіцієнтів турбулентной дифузії, в моделі покладається $K_x = K_y = K$; $d\xi_x, d\xi_y, d\xi_z$ – нормально розподілені випадкові величини з відхиленням, рівним dt.

Зміщення кожної частинки розраховувалося за допомогою схеми Ейлера з дискретним часовим кроком $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ наступним чином

$$\Delta x_i = udt + \left(\frac{\partial K}{\partial x}\right) \Delta t + P_x \sqrt{6K\Delta t},\tag{4.5}$$

$$\Delta y_i = v\Delta t + \left(\frac{\partial K}{\partial y}\right)\Delta t + P_y\sqrt{6K\Delta t},\tag{4.6}$$

$$\Delta z_i = w\Delta t - w_s\Delta t + \left(\frac{\partial K_z}{\partial z}\right)\Delta t + P_z\sqrt{6K_z\Delta t},\tag{4.7}$$

де P_x, P_y, P_z – випадкові величини, що рівномірно розподілені на інтервалі [-1;1]. Тривимірні поля швидкостей та коефіцієнтів турбулентної дифузії розраховуються за допомогою гідродинамічної моделі. Ці значення інтерполюються у просторі та часі для кожної частинки.

4.2.3 Параметризація потоку намулів між водним шаром та активним донним шаром в режимі незв'язних намулів

Гідродинаміка взаємодії частики намулів на дні з потоком достатньо складна, тому потоки намулів між водним шаром та AIII в моделі параметризуються базуючись на відомих напівемпіричних співвідношень. Турбулентний потік завислих незв'язних намулів *i* –го класу E_s на рівні z = -H + aописується формулами 3.67, 3.68 наступним чином

$$K_z \frac{\partial C_{s,i}}{\partial z} = -E_s = -w_{s,i} C_{a,i}, \qquad (4.8)$$

де $C_{s,i}$ –концентрація для *i* –того класу піску, $C_{a,i}$ – рівноважна концентрація для цього класу піску на деякому відліковому рівні *a* над дном, який візьмемо рівним товщині *АШ* h_A . Для рівноважної концентрації був побудований ряд напівемпіричних співвідношень. Одними з найбільш поширених є співвідношення [301]:

$$C_{a,i}^s = \rho_s \frac{0.015 D_i T_i^{1.5}}{a D_{*,i}^{0.3}},\tag{4.9}$$

$$D_{*,i} = D_i \left[\frac{(s-1)g}{\nu^2} \right]^{1/3}, \tag{4.10}$$

$$T_i = \frac{u_*^2}{u_{*cr,i}^2(1+p_m^\beta)} - 1, \qquad (4.11)$$

де ρ_s – густина частинок піску; ν – кінематична в'язкість води; $s = \rho_s / \rho_w$, де ρ_w – густина води; D_i –розмір частинок піску i -того класу; u_* – динамічна швидкість; $u_{*i,cr}$ – критична динамічна швидкість для початку змучування, що розраховується за критерієм Шілдса

$$u_{*cr,i} = \sqrt{(s-1)gD_i\Theta_{cr,i}},\tag{4.12}$$

де $\Theta_{cr,i}$ – параметр мобільності, який апроксимується в [301] у вигляді

$$\Theta_{cr,i} = \begin{cases} 0.24D_{*,i}^{-1}, & D_{*,i} \leq 4\\ 0.14D_{*,i}^{-0.64}, & 4 < D_{*,i} \leq 10\\ 0.04D_{*,i}^{-0.1}, & 10 < D_{*,} \leq 20\\ 0.013D_{*,i}^{0.29}, & 20 < D_{*,i} \leq 150\\ 0.055, & D_{*,i} > 150 \end{cases}$$
(4.13)

Слідуючи [298], у виразі (4.11) для параметру T_i врахований вплив вмісту мулу, что призводить до того, що із збільшенням долі мулу в $A \square \square$ значення динамічної швидкості, при якій відлікова концентрація дорівнює нулю зростає. Параметр $\beta = 0.75 - 1.25$ [298].

Швидкість осідання піщинок у воді $w_{s,i}$ розраховується згідно [301]:

$$\frac{w_{s,i}}{gD_i^2/\nu} = \begin{cases} \frac{D_{*,i}^{3/2}}{18}, & \text{при } D_i \le 0.1\\ \frac{10}{D_{*,i}^{3/2}} \left(\sqrt{1+0.01D_{*,i}^3} - 1\right), & \\ & \text{при } 0.1 < D_i \le 1\\ 1.1, & \text{при } D_i > 1, \end{cases}$$
(4.14)

де розміри частинок піску дані в міліметрах.

4.2.4 Алгоритм змучування та осідання частинок

Розглянемо граничні умови для i –того класу піску в лагранжевому методі на рівні h_A над поверхнею дна z = -H. В подальшому для простоти індекс i будемо опускати. Потік піску кожного класу за рахунок змучування моделюється шляхом створення нових частинок даного класу на рівні h_A . Кількість нових частинок, що виникають за один часовий крок дорівнює:

$$N = \frac{w_s C_a \Delta t}{m_p} \tag{4.15}$$

де m_p – маса одної частинки. Потік часток в дно за рахунок осідання D_s має бути рівним:

$$D_s = w_s C_s^A \tag{4.16}$$

де C_s^A – концентрація піску даного класу на рівні h_A . Кожна частинка, що знаходиться на рівні $z > h_A$ може пересікти границю $A \amalg z = h_A - H$ за один часовий крок при русі згідно алгоритму (4.5)-(4.7) з деякою ймовірністю p(z). Причому в кожний момент часу модна виділити придонний шар, що має товщину Δz_{bot} для якого

$$\left\{\begin{array}{ll}
p(z') = 0, \quad z' < \Delta z_{bot} \\
p(z') > 0, \quad z' > \Delta z_{bot}
\end{array}\right\},$$
(4.17)

де $z' = z - h_A + H$. При цьому товщина шару Δz_{bot} залежить від часового кроку, коефіцієнту турбулентної дифузії та швидкості осідання. Кількість намулів даного класу, яке за один часовий крок перетнуло границю AIII можна виразити формулою:

$$F = \int_{0}^{\Delta z_{bot}} p(z')C_s(z')dz'$$
(4.18)

Припустимо, що частка, яка перетнула границю з ймовірністю *q* залишається в *АШ*, а з ймовірністю 1 – *q* повертається у вихідне положення. Тоді згідно (4.16) необхідно, щоб виконувалась рівність:

$$q \int_{0}^{\Delta z_{bot}} p(z')C(z')dz' = w_s C_s^A \Delta t$$
(4.19)

Отже, ймовірність, з якою частка має залишитись в АШ дорівнює:

$$q = \frac{w_s C_0 \Delta t}{\int\limits_0^{\Delta z_{bot}} p(z') C(z') dz'}$$
(4.20)

Знайдемо ймовірність p(z'). Згідно алгоритму (4), частинка, що знаходиться ні рівні z' в наступний момент часу може опинитися рівноймовірно в інтервалі

$$z' \in [l_w + l_k - l_r; \ l_w + l_k + l_r], \tag{4.21}$$

де

$$l_w = -w_s \Delta t,$$

$$l_k = \frac{\partial K_z(z')}{\partial z} \Delta t,$$

$$l_r = \sqrt{6K_z \Delta t}.$$
(4.22)

Тоді, згідно визначення геометричної ймовірності

$$p(z') = \frac{l_w + l_k - l_r - z'}{2l_r} \tag{4.23}$$

Біля дна коефіцієнт дифузій лінійно зростає у відповідності із співвідношення пограничного шару:

$$K(z') \approx \kappa u_* h_A + \kappa u_* z' \tag{4.24}$$

Розкладемо концентрацію $C_s(z')$ в ряд біля дна:

$$C_{s}(z') = C_{s}^{A} + \frac{\partial C_{s}^{A}(0)}{\partial z'}z' + O(z'^{2})$$
(4.25)

Тоді, використовуючи умову (4.8), і відкидаючи в (4.25) члени другого порядку малості отримаємо, що

$$C_s(z') = C_s^A - \frac{w_s C_a}{\kappa u_* h_A} z'$$

$$\tag{4.26}$$

Товщина шару Δz_{bot} визначається із співвідношення:

$$\Delta z_{bot} = \left(l_r - l_w - l_k\right)|_{z = \Delta z_{bot}} \tag{4.27}$$

Підставляючи (4.17,4.24) в (4.27) отримаємо співвідношення

$$\Delta z_{bot} = 2l_k + l_w + \sqrt{l_d^2 + 6l_w l_k + 3l_k^2} \tag{4.28}$$

З урахуванням (4.23), (4.26) отримаємо остаточний вираз для ймовірності осідання частинки:

$$q = \frac{w_s C_0 \Delta t}{\frac{1}{2} I_1 - \frac{l_w + l_k}{2} I_2 - \frac{1}{2} I_3}$$
(4.29)
$$I_1 = \int_0^{\Delta z_{bot}} (C_0 + kz) \, dz = \Delta z_{bot} (C_0 + k\Delta z_{bot}/2)$$
$$I_2 = \int_0^{\Delta z_{bot}} \frac{(C_0 + kz)}{\sqrt{l_d^2 + 6l_k z}} dz \approx \frac{\Delta z_{bot} (C_0 + k\Delta z_{bot}/2)}{\sqrt{l_d^2 + 3l_k \Delta z_{bot}}}$$
$$I_3 = \int_0^{\Delta z_{bot}} \frac{z (C_0 + k_d z)}{\sqrt{l_d^2 + 6l_k z}} dz \approx \frac{\Delta z_{bot}^2 (C_0/2 + k\Delta z_{bot}/3)}{\sqrt{l_d^2 + 3l_k \Delta z_{bot}}}$$

4.2.5 Перенос рухомих донних намулів

Перенос рухомих донних намулів *i* –того класу в активному шарі моделюється формулою [300] з поправкою [298] на ефект присутності мулу в *АДШ*. Потік рухомих донних намулів є вектором

$$\vec{Q}_{i} = |Q_{i}| \frac{\vec{u}_{b}}{|u_{b}|}, \qquad (4.30)$$

$$|Q_{i}| / p_{si} = \begin{cases} 0 & T_{i} < 0 \\ 0.053\sqrt{(s-1)g} D_{i}^{1.5} D_{*,i}^{-0.3} T_{i}^{2.1}, & 0 < T_{i} < 3 \\ 0.1\sqrt{(s-1)g} D_{i}^{1.5} D_{*,i}^{-0.3} T_{i}^{1.5}, & T_{i} > 3 \end{cases}$$

$$(4.31)$$

Перенос рухомих донних намулів розраховувався лагранжевим методом для кожного скінченого елементу дна. Частинка пересувається із швидкістю

$$U_{bi} = u_* \left(10 - 7\sqrt{\frac{\Theta_{cr}}{\Theta}} \right), \qquad (4.32)$$

$$\Theta = \frac{u_*}{(s-1)gD_i} \tag{4.33}$$

Повна кількість частинок, що рухаються в елементі дна розраховується за формулою:

$$N_{bi} = S_E \frac{|Q_i|}{V_p U_{bi}} \tag{4.34}$$

де S_E – площа элементу поверхні, V_p – об'єм частинки. Ця кількість випадково обраних частинок пересувається у заданому елементі, і на кожному кроці по часу перераховується розподіл частинок між елементами. Товщина активного шару для кожної градації розмірів залишається постійним в часі. Надлишок частинок поглинається в актиний донний шар або ж нові частинки надходять в активний шар з $A \square \square$ при дивергенції потоку рухомих донних намулів.

4.2.6 Обмін між дном та водним шаром

При $p_m < p_{m,cr}$ обмін піском та мулом між дном та водою відбувається незалежно. Обмін мулом описується напрямленим догори ерозійним потоком $E^{(m)}$ і напрямленим донизу потоком випадіння мулу $D^{(m)}$:

$$w_s^{(m)}C^{(m)} + K_z \frac{\partial C^{(m)}}{\partial z} = -E^{(m)} + D^{(m)}, \qquad (4.35)$$

де $w_s^{(m)}$ – швидкість осідання мулу, $C^{(m)}$ – концентрація мулу. Частинки зв'язних зважених намулів у воді можуть злипнутися внаслідок зіткнень одна з одної та утворювати флоки - конструкції з декількох прилипших частинок [317]. Розмір та стійкість флоків залежить властивостей речовини, концентрації намулів та характеристик турбулентності потоку. Швидкість осідання мулу залежить від розмірів флоків D_{floc} , що виникли в результаті флокуляції і описується формулою [317]

$$w_s^{(m)} = \frac{\rho_s - \rho_w}{18\mu} D_0^{3-n_f} \frac{D_{floc}^{n_f - 1}}{1 + 0.15 \text{Re}_{floc}^{0.657}},$$
(4.36)

 n_f -фрактальна розмірність, μ - динамічна в'язкість, Re – число Рейнольдса флоку.

$$\operatorname{Re}_{floc} = \frac{w_s D_{floc}}{\nu}$$

Еволюція розмірів флоку розраховується за допомогою лагранжевої моделі [317]:

$$\frac{dD_{floc}}{dt} = k_A C_m^{(m)} G D_{floc}^{n_f - 1} - k_B G^{q+1} (D_{floc} - D_0)^p D_{floc}^{2q+1},$$
(4.37)

де k_A -параметр агрегації, а k_B –параметр роздрібнення флоків, $C_m^{(m)}$ – масова концентрація мулу, $G = \sqrt{\varepsilon/\nu}$, ε – швидкість дисипації енергії турбулентності, параметри q = 1/2 и $p = 3 - n_f$. В рівноважному випадку $dD_{floc}/dt = 0$ та для стоксового режиму осідання виходить спрощена формула при $n_f = 2$ [317]

$$w_s^{(m)} = \frac{(\rho_s - \rho_w)gD_0^2}{18\mu} + \frac{k_A}{k_B}D_0\frac{\rho_s - \rho_w}{18\nu}\frac{C_m^{(m)}}{\sqrt{G}},$$
(4.38)

На основі лабораторних дослідів [317] значення $k_A = 14.6 \text{ м}^2 \text{кг}^{-1}$, $k_B = 14000 \text{ c}^{1/2} \text{ м}^2$ для часток мулу з діаметром $D_0 = 4 \cdot 10^{-6} \text{ м}$.

При $u_* > u_{*ce}^{(m)}$ відбувається залучення мулу, що описується формулою [245]

$$E^{(m)} = p_m E_0 \left(\frac{u_*^2 - u_{ce}^{(m)2}}{u_{ce}^{(m)2}} \right),$$

$$D^{(m)} = 0,$$
(4.39)

в якій зміна вмісту мулу враховується множником p_m . Тут $u_{ce}^{(m)2} = \tau_{ce}^{(m)}/\rho_w$, $\tau_{ce}^{(m)}$ – критичні динамічна швидкість та напруження тертя для початку ерозії, відповідно, а $E_0 = \rho_m M$ – параметр ерозії, ρ_m -густина мулу. Типове значення емпіричної сталої M дорівнює 10⁻⁷. В режимі незв'язних намулів частинки мулу легко змиваються з поверхні грунту [291] та $u_{*ce}^{(m)}$ має бути менше, ніж $u_{*ce}^{(m)}$ в режимі зв'язних намулів.

При $u_* < u_{*cd}^{(m)}$ потік мулу, що випадає на дно описується формулою Кроне [172]:

$$E^{(m)} = 0,$$

$$D^{(m)} = \frac{w_s^{(m)} C^{(m)}}{H} \left(1 - \frac{u_*^2}{u_{cd}^{(m)2}}\right),$$
(4.40)

коли концентрація мулу у водному шарі $C^{(m)} < C_0^{(m)}$. Тут $u_{cd}^{(m)2} = \tau_{cd}^{(m)}/\rho_w$, $\tau_{cd}^{(m)}$ – критична динамічна швидкість та критичне дотичне напруження для випадіння мулу, відповідно, $C_0 = 0.3$ кг м⁻³ – критична об'ємна концентрація мулу.

Критичне напруження тертя для ерозії та випадіння мулу є функціями густини вологого грунту ρ_b [149]. Значення τ_e та τ_d змінюються в діапазоні 0.1-1.0 и 0.05-0.25 Н/м², відповідно.

4.2.7 Параметризація потоку намулів між водним шаром та активним донним шаром в режимі зв'язних намулів

В режимі зв'язних намулів ($p_m \ge p_{m,cr}$), змучування як мулу, так і піску, при $u_* > u_{*ce}^{(m)}$ описується формулою (4.39) з поправкою на вміст піску та мулу:

$$E^{(m)} = p_m E_0 \left(\frac{u_*^2 - u_{ce}^{(m)2}}{u_{ce}^{(m)2}} \right),$$

$$E_i^{(s)} = p_{s,i} E_0 \left(\frac{u_*^2 - u_{ce}^{(m)2}}{u_{ce}^{(m)2}} \right).$$
(4.41)

Вважається, що процеси осідання піску та мулу відбуваються незалежно і описуються співвідношеннями (4.29)-(4.40). Для режиму зв'язних намулів

транспорт рухомих донних намулів не відбувається:

$$\vec{Q}_i^{(s)} = 0.$$
 (4.42)

Рівень дна змінюється в залежності від процесів змучування/осідання а також транспорту рухомих донних намулів

$$(1-\varepsilon)\frac{\partial\varsigma}{\partial t} = \frac{1}{\rho_s} \sum_{i=1}^n \left(\nabla \vec{Q}_i^{(s)} - E_i^{(s)} + D_i^{(s)}\right) - \frac{1}{\rho_m} (E^{(m)} + D^{(m)}), \qquad (4.43)$$

Зміна вмісту і-ї фракції піску визначається рівнянням

$$\rho_s(1-\varepsilon)\frac{\partial p_{si}\varsigma}{\partial t} = \nabla \vec{Q}_i^{(s)} - E_i^{(s)} + D_i^{(s)}.$$
(4.44)

4.2.8 Взаємодія полів течій та каламутних потоків

Взаємодія течій та каламутних потоків спрощено описується на рівні середніх полів. По-перше, зміна рівню дна, що описується (4.43), впливає но поля течій. По-друге, у водному шарі змінюється густина суміші вода-намули, що змінює таким чином сили плавучості, що впливають на поля течій та на турбулентні потоки.

Раніше описана модель переносу намулів була спряжена з тривимірною гідростатичною моделлю [214] та її негідростатичним розширенням [157,77]. Особливістю цих моделей є використання σ -координати, що пов'язана з вертикальною координатою z співвідношенням

$$\sigma = \frac{z - H}{\eta - H};\tag{4.45}$$

де η – відхилення рівня вільної поверхні від незбуреного значення z = 0, $H(x, y, t) = H_0(x, y) - \zeta$, де $H_0(x, y)$ – початкова глибина. Застосування σ координати дозволяє проводити розрахунки при змінному в часі за рахунок



Рисунок 4.2: Порівняння профілей концентрацій завислих намулів розрахованих лагранжевою та ейлеровою моделями в різні моменти часу

ерозії/осідання рельєфі дна

$$\rho_m = \sum_{i=0}^N C_{si} + \rho_w \left(1 - \sum_{i=0}^N C_{si} / \rho_{si} \right), \qquad (4.46)$$

 $ho_w(T,S,P)$ –густина морської води як функція температури T, солоності S та тиску P; ho_{si} –густина фракцій намулів.

4.3 Приклади розрахунків

4.3.1 Розвиток шару завислих намулів в горизонтально однорідному потоці

Розглянемо задачу про змучування одного класу незв'язних намулів в горизонтально однорідному каналі. Відповідна постановка ейлерової задачі буде мати вигляд

$$\frac{\partial C}{\partial t} + w_s \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial C}{\partial z}, \qquad (4.47)$$

$$z = a - H : K_z \frac{\partial C}{\partial z} = w_s C_a; \qquad (4.48)$$

$$z = 0: K_z \frac{\partial C}{\partial z} = w_s C; \qquad (4.49)$$

$$t = 0: C = 0. (4.50)$$



Рисунок 4.3: Схема эксперименту [301]. Цифри в кружках відповідають положенню розрізів, в яких проводилися виміри швидкості течії та концентрації намулів

Профіль коефіцієнту вертикальної дифузії заданий у вигляді:

$$K(z) = \kappa u_* z \left(1 - \frac{z}{H} \right).$$

Рівняння (4.47) має аналітичний стаціонарний розв'язок (профіль Рауза).

$$C(z) = C_a \left(\frac{h-z}{z} \frac{a}{h-a}\right)^{\frac{w_s}{\kappa_{u_*}}}.$$
(4.51)

Нестаціонарний аналітичний розв'язок рівняння (4.47) з дещо іншими граничними умовами ($C = C_a$ при z = a - H) був отриманий в [143]. В роботі був отриманий розв'язок ейлерової задачі (4.47)-(4.50) чисельно з використанням скінченно-різницевого методу, неявної схеми та методу прогонки. Параметри розрахунків: H = 0.4 m, $u_* = 0.05$ m/s, $C_a = 1$ kg/m, $w_s = 0.01$ m/s, $\kappa = 0.4$, $m_p = 3 \cdot 10^{-8}$ kg. В лагранжевих розрахунках використовувалось до 1000 000 частинок. Як випливає з Рис.4.2, лагранжева модель добре узгоджується с чисельною ейлеровою моделлю і достатньо точно відтворює аналітичний розв'язок (4.51).

4.3.2 Моделювання лабораторного експерименту про перенос намулів у каналі із заглибленням

Були проведені розрахунки для умов лабораторного експерименту [301], в якому моделювалася заносимість судоходного каналу. Експеримент проводився в лотку довжиною 30 м, шириною 0.5 м, та глибиною 0.7 м. Профіль



Рисунок 4.4: Порівняння розрахованих та виміряних [301] профілей концентрації намулів

робочої ділянки дна та положення профілей вимірів показаний на рис. 4.3. Шар намулів на дні складався з фракції мілкого піску зі швидкістю осідання 0.013 м/c. Швидкість потоку на вході в лоток була 0.5 м/c, а глибина шару води – 0.4 м. Завислий пісок тої ж фракції поступав на вході і формував рівноважний профіль. В експерименті ефективна шорсткість $k_s = 0.025 \text{ м}$. Течії моделювались за допомогою тривимірної гідростатичної моделі РОМ [214]. В розрахунках горизонтальна роздільна здатність складала 5 см. По вертикалі використовувався 21 сигма-рівень із згущенням біля дна. Повна кількість лагранжевих частинок у завислих та рухомих донних намулах складала біля 30тис. Часовий крок гідродинамічної моделі складав 0.0025 с, в той же час крок лагранжевої моделі був в п'ять разів меншим. На рис. 4.4 наведені виміряні та розраховані профілі концентрації завислих намулів в середньому



Рисунок 4.5: Порівнянні всіх експериментальних даних вимірів [301] концентрації завислих намулів з розрахунками

розрізі лотку, в точках, що показані на рис. 4.3. Миттєва концентрація на профілі була усереднена в часі по інтервалу 100 с. Як слідує з рис. 4.4, результати досліду та розрахунків добре узгоджуються. На рис. 4.5 показане порівняння всіх експериментальних даних вимірів [302] концентрації завислих намулів з розрахунками чисельною моделлю. Середнє геометричне відношення розрахованих значень до експериментальних становить 1.011. Середнє геометричне квадратичне відхилення складає 1.35.

4.3.3 Дослідження стійкості дна та берегів під дією струменевих течій

В цьому підрозділі описується застосування тривимірної негідростатичної гідродинамічної моделі, опис якої викладений в розділі 3.3 до моделювання струменевих течій. Розроблена модель застосована розроблена для моделювання стійкості дна і берегів під дією струменів суднових гвинтових рушіїв. На відміну від відомих моделей, вона описує тривимірні поля швидкості, що генеруються судновими рушіями, інтенсивність і інтегральний масштаб турбулентності в заданій розрахункової області з довільним рельєфом дна. Модель описує як ближню, так і дальню область струменя за гвинтом. Розраховуються мінливі в часі і просторі придонні напруження тертя і градієнти тиску, викликають ерозію дна і ушкоджують природне середовище існування організмів на дні. Результати розрахунків зіставлені з даними лабораторних експериментів.

Струмені від гвинтів суднових рушіїв при русі в вузьких проходах і на малих глибинах можуть викликати розмив донних відкладень, впливати на стійкість берегів і завдавати шкоди природному середовищі існування донних організмів. Особливо істотний вплив такі струменя надають в морських і річкових терміналах при маневруванні і підході / відході судів. В останні роки ця проблема досліджувалася експериментально і теоретично (див. напр. [71],[129],[137],[208],[209],304), однак отримані в цих роботах напівемпіричні залежності не описують вплив складного рельєфу дна.

Струмінь від гвинтового рушія

Для розрахунку поля швидкостей, викликаних гвинтовим рушієм, використовувалися співвідношення, засновані на напівемпіричній моделі [71], в якій реальний гребний гвинт замінювався ефективним двигуном. У даній роботі розглядається початок руху судна, тоді згідно [71] швидкість витікання струменя розраховується за співвідношенням:

$$U_0 = \sqrt{\frac{8n^2 D^2}{\pi} K_T}$$
(4.52)

где *D* – діаметр гвинта, *n* – частота обертів гвинта емпіричний коефіцієнт упору гребного гвинта. Якщо коефіцієнт упору гвинта неможливо визначити,



Рисунок 4.6: Схема лабораторного експерименту

то може бути використано емпіричне співвідношення [71]

$$U_0 = C_2 \left(\frac{P}{\rho_0 D_p^2}\right)^{1/3},$$
(4.53)

де *P* – потужність на гребному валу [Вт], *C*₂ - емпірична постійна, рівна за даними експериментів [71] та по даним [209].

Моделювання лабораторного експерименту [271]

Проведено зіставлення результатів моделювання з лабораторним експериментом [271], в якому досліджувався вплив струменя від гвинтового рушія на похилий берег. Схема експерименту представлена на рис. 4.6. Експеримент проводився в лотку розміром $2 \times 1.9 \times 0.48$ м. Гвинт діаметром $D_0 = 0.1$ м був встановлений на глибині 0.28м в перегородці, що відокремлює робочий об'єм від допоміжного, в який надходила вода з насоса, щоб зрівноважити рівень в обох відсіках. Надлишок води при роботі гвинта витікав через бічні стінки. Початкова швидкість струменя становила $U_0 = 1.36$ м/с. В розрахунках струмінь витікав з прямокутного отвору розміром 10.8×6.6 см з початковою швидкістю 1.38м/с, що відповідало імпульсу струменя в експерименті.

При моделюванні вода витікала назовні через бічні границі, на яких використовувалася ньютонівська схема засвоєння даних. Розрахункова сітка мо-



Рисунок 4.7: Розподіл швидкостей у вертикальному перерізі по осі струменя



Рисунок 4.8: Розподіл швидкостей біля дна

делі становила 100 × 80 × 50 вузлів. Результати розрахунків усталеного руху представлені на рис. 4.7-4.9. На рис. 4.7 і 4.8 представлено розподіл швидкостей у вертикальному перетині і в придонному шарі в момент часу, коли рух струменя встановився. На рис. 4.9 наведено порівняння розрахованих та експериментальних [271] профілів горизонтальної швидкості в ближній і дальній зонах розвитку струменя. Як видно з малюнка, розподіл швидкостей непогано узгоджується з експериментальним.



Рисунок 4.9: Порівняння розрахованих та виміряних профілей горизонтальної швидкості



Рисунок 4.10: Розташування зони максимального розмиву дна

Рис. 4.11 показує стале поле дотичних напружень у дна. Як видно з малюнка, зона максимальних дотичних придонних напружень знаходиться поблизу точки перетину осі струменя з дном. Аналіз експериментальних даних, проведений в [271] показав, що зона максимального розмиву дна знаходиться на перших 10 сантиметрах початку схилу дна (рис. 4.10). Згідно з експериментальними даними зона максимального впливу знаходиться значно нижче зони максимальних придонних швидкостей і дотичних напружень. Причому рух частинок донних відкладень в нижній частині ухилу відбувалося проти напрямку руху течії.

В рамках представленої тут моделі задача розмиву дна не розглядається. Однак, огляд існуючих моделей переносу наносів [див. напр. [113],[154],[210],[280]]



Рисунок 4.11: Поле придонних дотичних напружень



Рисунок 4.12: Модуль градієнту придонного динамічного тиску

показав, що більшість з них при розрахунку руху донних відкладень враховують тільки придонні дотичні напруження. Отже, більшість з відомих моделей не підходять для задачі розмиву дна в даному експерименті. Розподіл модулю градієнту динамічного тиску, представлений на рис. 4.12 дозволяє пояснити експериментальне розташування зони максимально розмиву дна. Сила, викликана перепадом тиску, також є рушійною для частинок наносів,


Рисунок 4.13: Схема чисельного експерименту по розмиву дна придонним струменем



Рисунок 4.14: Розмив дна через 3хв моделювання.

що лежать на дні. З рис. 4.12 видно, що градієнт тиску максимальний на початку схилу дна і спрямований проти течії, що дозволяє пояснити напрямок і механізм руху частинок, що спостерігається експериментально.

4.3.4 Моделювання розмиву дна струменем від судового рушія

Чисельна модель була застосована для моделювання розмиву дна під дією затопленного придонного струменя. Чисельне моделювання проводилося у прямокутному лотку довжиною 3м, шириною 1.14м та глибиною 0.456м. Схема експерименту показана на рис. 4.13. При моделюванні струмінь втікав з прямокутного отвору зі стороною $b_0 = 7.6$ см. Початкова швидкість струменя задавалась рівною 1.31м/с. Перед початком моделювання дно було вкрите однорідними піщинками діаметром 2.6мм. Процеси біотурбації при моделюванні не розглядалися. Моделювався рух зважених намулів та рухомих донних намулів. Моделювання проводилося за допомогою негідростатичної моделі гідродинаміки (розділ 3.3), що динамічно поєднана з лагранжевою моделлю переносу намулів, що представлена в даному розділі. Обмін даними між моделями відбувався на кожному часовому кроці. Гідродинамічна модель розраховувала тривимірні поля течій, коефіцієнти турбулентного перемішування та придонні напруження. Лагранжева модель, використовуючи отримані дані, розраховувала потоки ерозії та осідання, зміну рівня дна за поточний часовий крок, концентрацію завислих намулів. Гідродинамічна модель перебудовувала вертикальну чисельну сітку згідно зміні рівня дна, що розрахувала лагранжева модель, та враховувала концентрацію завислих намулів для розрахунку сил плавучості.

Роздільна здатність гідродинамічної моделі була 2.5см у горизонтальному напрямку та 1.5см у вертикальному. Час розгону для встановлення струменевої течії складав 2хв. Через 2хв. починала працювати лагранжева модель переносу намулів. На рис. 4.14 показаний розмив на намив, шо спричинений придонним струменем через 3 хвилини моделювання.

4.3.5 Моделювання гравітаційних каламутних течій, що викликані конвекцією на шельфі

Модель була застосована до дослідження виникнення гравітаційних каламутних потоків на схилах в результаті шельфової конвекції в океані [152]. Шельфова конвекція являє собою розповсюджене явище в полярних областях океану, коли в результаті зимової конвекції, що проникає до дна відносно мілкого шельфу густина води над шельфом стає більшою, ніж у відкритому океані, де конвекція охоплює більш глибокі шари. Градієнт густини, що при цьому виникає, викликає гравітаційну течію більш щільної води в глибинні шари океану. Цей потік моде мобілізувати намули на схилі, що в свою чергу може підсилити густинні гравітаційні течії за рахунок намулів. Ця проблема розглядалась в ряді робіт, починаючи з [127]. Тут розглядається відносно проста двовимірна задача про збудження каламутних потоків густинною гравітаційною течією на схилі між вузьким шельфом з глибиною 50 м та морем з глибиною 200 м. Параметри задачі відповідають ідеалізованому опису конвекції на шельфі Нової Землі в Баренцевому морі [152]. Використовувалась спряжена система рівнянь лагранжевої моделі та гідростатичної моделі РОМ [214]. Ефекти обертання Землі не враховувались. Початкова температура і солоність води у відкритому морі $T = 0^{o}C$ та S = 34.3, відповідно. Припускається, що шельф та схил вкриті мулом з діаметром частинок $6 \cdot 10^{-6}$ м та швидкістю осідання $1.9 \cdot 10^{-6}$ м/с. Критичні напруження змучування та осідання дорівнюють 0.095 H/м².

Результати розрахунків представлені на рис.4.15-4.17. На рис.4.15 наведені вертикальні розрізи солоності в гравітаційній течії на схилі через 2.5 доби після початку, який виник в результаті тільки термохалінної шельфової конвекції та термохалінної конвекції із змучуванням донних намулів на схилі. Відповідний вертикальний розріз концентрації намулів представлений на рис. 4.15. Як видно з рис. 4.15 змучування призводить до збільшення сил плавучості прискорення руху голови течії (див. також рис.4.17). В той же час збільшення швидкості гравітаційної течії супроводжується додатковим залученням оточуючих вод в гравітаційну течію. Тому, при досягненні підошви схилу густина води в потоці буде меншою, ніж у випадку тільки термохалінної густинної течії.



Рисунок 4.15: Вертикальний розріз солоності в гравітаційній течії на схилі при t = 2.5 діб, що виникло в результаті термохалінної шельфової конвекції (а) та термохалінної конвекції із змучуванням донних намулів на схилі



Рисунок 4.16: Вертикальний розріз концентрації намулів в гравітаційній течії на схилі при t = 2.5 діб, що виникла в результаті термохалінної конвекції із змучуванням донних намулів на схилі

4.3.6 Моделювання розмиву шельфової зони накатом поодинокої внутрішньої хвилі

Природна ерозія донних відкладень на шельфі може бути викликана не тільки течіями, але й внутрішніми хвилями та, на окремих ділянках, спричиняти значне осадонакопичення [84]. Ерозія намулів може впливати на фітопланктон та бактеріальну біомасу, збільшувати потік газів. Руйнування хвиль на підводних схилах може провокувати епізодичні спалахи турбулентності із



Рисунок 4.17: Положення фронту гравітаційної течії із часом. Термохалінна конвекція (1) и термохалінна конвекція із змучуванням донних намулів на схилі (2)

подальшою ерозією та переносом намулів.

Для моделювання ерозії шельфу під впливом внутрішніх хвиль розглянемо ідеалізований шельф, який за своїми параметрами подібний до шельфу в естуарії Св. Лоренца біля острова Ливрес [84]. На рис. 4.18 показана розрахункова область та розповсюдження поодинокої внутрішньої хвилі при набіганні на уклін дна. Кут нахилу шельфу приблизно 0.05, термоклин розташовується на глибині 8.5 метрів і розділяє шари з густиною 1015 кг/м³ та 1023 кг/м³. Внутрішня хвиля мала початкову амплітуду а=6.5 м, що відповідає параметрам спостережуваних в естуарії Св. Лоренца внутрішніх хвиль. Максимальна глибина розрахункової області складала 40 м. При підході до берега хвиля починає деформуватись, укручуватись, а потім розповсюджуватись по шельфу у вигляді болуса (рис. 4.19).

Розрахунки розповсюдження внутрішньої хвилі проводилися за допомогою чисельної моделі, що описана в розділі 3.3. Довжина розрахункової області складала 3 км, роздільна здатність моделі по горизонталі - 1 м, по вертикалі роздільна здатність складала 200 рівномірно розподілених *σ*-рівнів. Для розрахунку коефіцієнту вертикальної в'язкості та дифузії використовувалась модель підсіткової турбулентності Смагоринського [197]. Поля швидкостей,



Рисунок 4.18: Накат поодинокої внутрішньої хвилі на шельф. Стрілкою позначено напрямок руху хвилі

рівня вільної поверхні та коефіцієнту вертикальної дифузії було збережено з часовим кроком 5 секунд.

Для моделювання розмиву та переносу намулів використовувалася лагранжева модель переносу намулів, кількість лагранжевих частинок складала близько 100 000. Параметри розрахунків моделі: тип донних намулів - однорідний мілкий пісок діаметром 0.1 мм, швидкість осідання - 4.6мм/с. Потоки ерозії розраховувались згідно формул [301]. Результати розрахунків представлені на рис. 4.19. Показано розташування частинок піску та ізолінії солоності, що показують розповсюдження та трансформацію внутрішньої хвилі. Поля солоності та розташування частинок піску показано через кожні 3 хвилини. Видно, як при підході хвилі до мілкої частини шельфу прискорення придонного потоку спричиняє розмив дна. Турбулентність, що спричинена руйнуванням хвилі на мілкій частині шельфу сприяє інтенсивному перемішуванню піщинок в шарі води. З розрахунків видно, що для даних реалістичних параметрів дна та внутрішньої хвилі, накочування хвилі на берег може спричиняти ерозію дна та перенос намулів у прибережній зоні.



Рисунок 4.19: Перенос намулів під дією поодинокої внутрішньої хвилі, що накочується на шельф

4.4 Висновки до розділу

У роботі побудована нова тривимірна лагранжева модель, що використовує метод випадкових блукань для моделювання переносу та дифузії та описує перенос суміші зв'язних та незв'язних багатофракційних намулів з перемінним гранулометричним складом. Модель відтворює основні процеси переносу завислих та рухомих донних намулів та переформування дна, включаючи ефекти самовідмостки. Отримано вираз для ймовірності осідання незв'язних намулів залежно від характеристик турбулентності та швидкості осідання частинок намулів, що використовується для задання граничних умов для при розв'язанні рівняння переносу та дифузії методом частинок. Результати розрахунків добре узгоджуються з аналітичним і чисельним розв'язками для ейлерової моделі та з даними лабораторного експерименту. Порівняння розрахунків моделі з даними концентрації завислих намулів в каналі з заглибленням з лабораторного експерименту [302] показало, що середнє геометричне відношення розрахованих значень до експериментальних становить 1.011, середнє геометричне квадратичне відхилення складає 1.35. Модель була застосована для дослідження виникнення гравітаційних каламутних течій на схилах в результаті шельфової конвекції та для моделювання набігання внутрішніх хвиль на уклін дна. Показано, що гравітаційні течії та внутрішні хвилі є одними з механізмів переносу донних намулів в шельфових зонах.

Представлені розрахунки оцінки стійкості дна та берегів під дією струменевих течій від судових рушіїв за допомогою негідростатичної гідродинамічної моделі. На відміну від відомих моделей, вона описує тривимірні поля швидкості, що генеруються судовими рушіями, інтенсивність і інтегральний масштаб турбулентності в заданій розрахункової області з довільним рельєфом дна і формою берегів. Модель дозволяє розраховувати розподіл придонного напруження тертя, градієнту придонного тиску і оцінювати умови зрушення донних наносів під дією струменя гребного гвинта. Результати розрахунків узгоджуються з лабораторним експериментом [271]. Зроблено висновок про те, що в розглянутих задачах при моделюванні розмиву дна необхідно використання моделей переносу намулів, що використовують параметризацію сили, що діє на донні відкладення за рахунок градієнту тиску спільно з придонними напруженнями тертя. Представлена модель може використовуватись для розрахунків локального переформування дна навколо перешкод, моделювання днопоглиблювальних робіт або розмиву дна під впливом струменів від судових рушіїв або хвиль при проходженні судів.

Розділ 5

ЛАГРАНЖЕВА МОДЕЛЬ РОЗПОВСЮДЖЕННЯ НАФТОПРОДУКТІВ

5.1 Вступ

Перенос і зміна фізико-хімічних властивостей нафти в морі регулюється безліччю взаємопов'язаних процесів: адвекції течіями; розтікання поверхневої плями за рахунок гравітаційних сил і поверхневого натягу; масообміну і зміни фізико-хімічних властивостей за рахунок процесів вивітрювання; взаємодії нафти з зваженими і донними відкладеннями та береговою лінією ([62],[264]). Вздовж напрямку в якому розтягується поверхнева пляма за рахунок зсувних течій і вихорів, розтікання є важливим процесом у зміні фізико-хімічних властивостей розливу нафти, тому що це призводить до суттєвого росту площі поверхневої плями. У свою чергу, це призводить до інтенсифікації процесів вивітрювання. Згідно [122] за допомогою аналізу розмірностей процес поширення плями можна розділити на три етапи: інерційний етап (1), коли при русі сила плавучості врівноважується силою інерції; гравітаційно-в'язка стадія (2), коли сили плавучості врівноважуються силами в'язкості; етап поверхневого натягу (3), коли при русі сили поверхневого натягу врівноважуються силами в'язкості. Розтікання нафти - це складний процес, який був детально вивчений для деяких ідеалізованих задач. Більшість досліджень були обмежені випадками автомодельного поширення симетричної плями після миттєвого розливу в спокійному морі [122,144,121,79,126,284,285,89,259,95,96]. Формули Фея [122] доповнюються емпіричними параметрами, що використовуються в багатьох моделях розливів нафти. Тим не менше, ці співвідношення не можуть описати реалістичну зміну товщини плями, несиметричність поширення нафтової плями під дією вітру і течій, що спостерігається при реальних розливах, та динаміку розливів, викликаних безперервним витоком зі змінною у часі швидкістю [264]. На даний момент відома тільки невелика кількість моделей, що описують розтікання плям реалістичних форм: двовимірна ейлерова модель поверхневої плями [235], що була отримана з рівнянь мілкої води для в'язкого режиму та режиму поверхневого натягу і тривимірна лагранжева модель ([3,74,75]) та ейлерова модель [290], які були нещодавно розроблені, для того, щоб врахувати ефекти вивітрювання. Тим не менш, можливий вплив сили Коріоліса на розтікання ще не був досліджений, або навіть обговорений, незважаючи на те, що час розтікання у випадку великих розливів може тривати багато годин і навіть днів. Витік можне продовжуватися декілька днів і місяців, як у випадках розливів "Ixtoc I" та "Deep Horizon". Таким чином, важливо розуміти можливий вплив, що спричинений силою Коріоліса на динаміку розповсюдження поверхневої плями, що утворилась внаслідок безперервного або миттєвого витоку.

У розділі розглядається модифікована модель ([3,74,75,196]), яка здатна описувати динаміку розтікання поверхневої плями під впливом сили Коріоліса і поверхневих течій для випадків миттєвого або неперервного витоку, а також моделювати тривимірну дисперсію нафтових крапель в стовпі води.

5.2 Модель поверхневої плівки нафти

5.2.1 Рівняння моделі динаміки плівки нафтопродуктів з урахуванням впливу обертання Землі

Основні рівняння, що описують розтікання нафтової плями виводяться в наближенні мілкої води, беручи до уваги рівняння нерозривності і рівняння Нав'є-Стокса, що усереднюються по товщині слою нафти. Рівняння мілкої води та метод його розв'язку методом частинок в загальному випадку було розглянуто в розділі 1.7.4. Усереднені по товщині нафтового шару рівняння мають вигляд:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \vec{\nabla}(\vec{u}_o h) = Q, \qquad (5.1)$$

де t - час, h - товщина плівки; $\vec{u}_o = (u_o, v_o)$ - усереднена по товщині нафтової плівки швидкість у Декартовій системі координат $\vec{x} = (x, y)$, ∇ - горизонтальний диференціальний оператор. Припускається, що відома швидкість на поверхні $\vec{u}_w = (u_w, v_w)$. Q – джерела та стоки завдяки випаровуванню, дисперсії нафтових крапель вглиб води, діючим джерелам розливів та заходам щодо збору нафти. Для простоти, процеси вивітрювання поки не розглядаються в цьому розділі.

Інерційний режим є відносно коротким. Нехтуючи інерційними членами у рівняннях руху, що усереднені по товщині шару нафтової плями ми припускаємо, що баланс між гравітацією, силами тертя, силами поверхневого натягу і силами Коріоліса, що дає:

$$f\vec{z} \times \delta\vec{u} = -g'\vec{\nabla}h + \frac{\vec{\tau}_a - \vec{\tau}_b}{\rho_o h},\tag{5.2}$$

де \vec{z} - одиничний вектор, що напрямлений вгору; $\delta \vec{u} = \vec{u}_o - \vec{u}_w$; f - параметр Коріоліса; $g' = g(\rho_o - \rho_w)/\rho_o$; g - гравітація; ρ_o та ρ_w - густина води та нафти, відповідно; $\vec{\tau}_b$ та $\vec{\tau}_a$ є напруження тертя на межі нафта-вода, та нафта-повітря, відповідно.

Оскільки в'язкість нафти µ_o набагато більше, ніж в'язкість води µ_w (µ_o/µ_w ≈ 20) ми можемо припустити, що швидкості в нафтовій плямі розподілені рівномірно по товщини. Тому, імпульс від дії вітру передається безпосередньо до води, що під плямою. Це означає, що

$$\vec{\tau}_b = \vec{\tau}_a + \vec{\tau}_w,\tag{5.3}$$

де $\vec{\tau}_w = (\tau_w^x, \tau_w^y)$ є напруження тертя, викликане відносним рухом плями та поверхневих потоків. На відміну від багатьох моделей розливів нафти ([62],[264]) ми не припускаємо, що вітрові напруження викликають додаткову "вітрову" швидкість [235], що відрізняється від поверхневої швидкості.

Через велику в'язкість нафти пограничний шар, що викликається відносним рухом плями і води існує тільки у воді. Припускаючи ламінарний характер цього пограничного шару, напруження тертя на поверхні води та нафти без врахування обертання Землі можна визначити так:

$$\frac{\vec{\tau}_w}{\rho_w} = \nu_w \frac{\partial \vec{u}}{\partial z} \approx \nu_w \frac{\delta \vec{u}}{\delta_w},\tag{5.4}$$

де $\nu_w = \mu_w / \rho_w$ - кінематична в'язкість, δ_w - це товщина пограничного шару, яка може бути оцінена за формулою Релея

$$\delta_w = \sqrt{\nu_w t'},\tag{5.5}$$

де $t' = \ell/|\vec{\delta u}|$ - характерний масштаб часу для рухів в пограничному шарі, ℓ - це масштаб довжини. Вважаючи, що ℓ - відстань від переднього краю плями, рівняння (5.4) може бути переписано у формі, що використовується у теорії пограничного шару [270] як:

$$\frac{\vec{\tau_w}}{\rho_w} = C'_w \operatorname{Re}_{\ell}^{-1/2} |\vec{\delta u}| \vec{\delta u}, \qquad (5.6)$$

де $\operatorname{Re}_{\ell} = |\vec{\delta u}|\ell/\nu_w$ - число Рейнольдса, C'_w - це константа, яка оцінюється як 0.332 при розв'язанні рівняння Блазіуса [270]. Якщо Re_{ℓ} зростає із збільшенням відстані від передньої кромки плями, то пограничний шар стає турбулентним при $\operatorname{Re}_{\ell} > 5 \cdot 10^5$ після певної перехідної зони. За теорією пограничного шару [270] турбулентний зсув може бути наближено

$$\frac{\vec{\tau_w}}{\rho_w} = C''_w \operatorname{Re}_{\ell}^{-1/5} |\vec{\delta u}| \vec{\delta u}, \qquad (5.7)$$

де константа $C''_w = 0.0296$ [270]. Для характерного часу $t' \sim f^{-1}$ обертання Землі обмежує товщину пограничного шару глибиною Екманівського шару $\delta_E = \sqrt{\nu_w/f}$. У шарі Екмана член Коріоліса знаходиться у балансі із в'язкістю. Із відстанню $\tilde{z} = -z$ від поверхні різниця між швидкостями у шарі Екмана (u, v) та поверхневими потоками зменшується. Розв'язок цієї задачі добре відомий [108]:

$$u - u_w = \exp(-\xi \tilde{z}) [\delta u \cos(\xi \tilde{z}) + \delta v \sin(\xi \tilde{z})],$$

$$v - v_w = \exp(-\xi \tilde{z}) [\delta v \cos(\xi \tilde{z}) - \delta u \sin(\xi \tilde{z})],$$
(5.8)

де $\xi = \sqrt{f/(2\nu_w)}$, $\delta u = u_o - u_w$, $\delta v = v_o - v_w$. Напруження тертя між нафтовою плямою та водою отримується з (5.8) як

$$\tau_w^{(x)} / \rho_w = -\lambda (\delta u - \delta v)$$

$$\tau_w^{(y)} / \rho_w = -\lambda (\delta u + \delta v),$$
(5.9)

де λ = $\sqrt{\nu f/2}$. Відмітимо, що вектор уповільнення в'язких сил відхиляється на кут 45° від вектору уповільнення в'язких сил без обертання Землі (5.6). Форма ламінарного пограничного шару залежить від числа Росбі

$$\operatorname{Ro} = \frac{\delta_E}{\delta_w} = \frac{U}{f\ell}.$$
(5.10)

Якщо Ro ≫ 1 тоді напруження тертя між водою та плямою описується (5.6) в той час Ro ≪ 1 напруження тертя в шарі Екмана (5.9) домінують.

Підставляючи параметризацію Екмана (5.9) в рівняння руху (5.2) отримаємо:

$$u_{o} = u_{w} - \frac{g'h}{\lambda \left[(1 + fh/\lambda)^{2} + 1 \right]} \left[(1 + fh/\lambda) \frac{\partial h}{\partial y} + \frac{\partial h}{\partial x} \right],$$

$$v_{o} = v_{w} + \frac{g'h}{\lambda \left[(1 + fh/\lambda)^{2} + 1 \right]} \left[(1 + fh/\lambda) \frac{\partial h}{\partial y} - \frac{\partial h}{\partial x} \right],$$
(5.11)

де член $fh/\lambda = \sqrt{2}h/\delta_E$ - відношення товщини шару плями до товщини шару Екмана. Для $f = 10^{-4}c^{-1} \ \nu_w = 10^{-6} M^2 c^{-1}$ товщина шару Екмана є $10^{-1} M^{-1}$. Таким чином, член Коріоліса в рівнянні (5.1) є незначною $h \ll 10^{-1} M^{-1}$. Однак, тертя Екмана не може бути проігнороване на великих проміжках часу та на великих відстанях від передньої кромки плями. Параметризація зсувних напружень (5.9) призводить до відхилення розтікання нафти від напрямку градієнту товщини нафтової плями

5.2.2 Чисельний алгоритм розв'язку рівняння руху нафтової плівки методом частинок

Загальний алгоритм розв'язання рівнянь мілкої води був представление в розділі 1.7.4. В цьому розділі це метод розглядається більш детально для застосування до задачі про рух нафтової плівки по поверхні води. У лагранжевому підході поверхнева нафтова пляма моделюється як набір "частинок", які мають просторово розподілену масу. Розподіл товщини плями апроксимується за допомогою поліноміальної функції [188] як

$$h_i(r,R) = \frac{5V_i}{\pi R^2} \begin{cases} (1+3r_i/R)(1-r_i/R)^2, r_i \le R, \\ 0, r_i < R. \end{cases}$$
(5.12)

Тут $r_i = \sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2}$, де (x_i, y_i) - декартові координати центру

мас частинок, R - горизонтальний розмір частинок , V_i - об'єм частинок.

$$h(x,y) = \sum_{i=1}^{N_p} h_i(x,y), \qquad (5.13)$$

де N_p - кількість частинок. Просторова похідна від h_i в частинці може бути легко розрахована, а сума забезпечує наближення $\vec{\nabla}_H h$, що є необхідним для розрахунку гравітаційних сил у рівняннях руху (5.2). Цей підхід ([3,74,75,196]) дозволяє брати до уваги взаємодію часточок в ансамблі і описати розтікання плями довільної форми. Подібні методи були розроблені у фізиці плазми для опису системи часток, що не стикаються методом "частинкачастинка" (див. [48]) та у гідромеханіці згладжених частинок ("Smoothed Particle Hydrodynamics" метод [188],[133],[184]). Траєкторія частки розраховується за формулою

$$\frac{d\vec{x}_i}{dt} = \vec{u}_{oi} \tag{5.14}$$

де \vec{u}_{oi} - швидкість частинки. У чисельному алгоритмі положення частинок в момент часу $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ задається у вигляді

$$\vec{x}_{i}^{n+1} = \vec{x}_{i}^{n} + \Delta t(\vec{u}_{w}(\vec{x}_{i}^{n}) + \delta \vec{u}(\vec{x}_{i}^{n}))$$
(5.15)

Для випадку без обертання, та за умови, що ми нехтуємо інерційним етапом розтікання плями $\delta \vec{U}$ обчислюється для ламінарного (s = 1/2) і турбулентного (s = 1/5) розтікання як

$$\delta \vec{u} = -\left(\frac{h\rho_o \ell^s}{C_w \rho_w \nu_w^s}\right)^{1/(2-s)} \vec{\nabla} h / \left|\vec{\nabla} h\right|^{(1-s)/(2-s)}, \qquad (5.16)$$

де $C_w \equiv C'_w$ для ламінарного режиму та $C_w \equiv C''_w$ для турбулентного режиму. Для того, щоб порахувати $\delta \vec{u}$ нам необхідно знати спочатку значення $h, \vec{\nabla}h, \ell$ у кожній точці де розміщуються частинки. Для використання формули (5.13) ми провели попереднє ланцюжкове сортування [48], для того, щоб враховувати тільки відстані менші аніж R. Відстань до границі плями ℓ ми

визначаємо як мінімальну відстань від точки до границі плями, що розраховується у 8 напрямках: 4 вздовж осей декартових координат в обох напрямках і 4 напрямку на 45° між осями.

Розрахункове значення швидкості розтікання (5.16) потім використовується для перевірки критерію Росбі (5.10) для параметризації в'язкого тертя. У випадку *Ro* < 1 рівняння (5.11) використовуються для обчислення нових значень швидкості розтікання.

5.2.3 Автомодельні розв'язки для гравітаційно-в'язкого і гравітаційно-турбулентного режиму

Розглянемо автомодельне розтікання симетричної плями в спокійному морі ($\vec{u}_w = 0$) без дії сили Коріоліса. Напруження тертя між водою і плямою параметризуються за допомогою теорії пограничного шару (5.6) для ламінарного гравітаційно-в'язкого режиму та (5.8) для гравітаційно-турбулентного режиму. Замість координат (x, y) ми будемо використовувати відстань у напрямку розтікання плями r. Рівняння нерозривності та імпульсу в обох режимах можна записати в безрозмірних змінних $\hat{r}, \hat{t}, \hat{h}, \hat{u}_o$ використовуючи таке масштабування: $[r] \sim L_0$, $[h] \sim h_0 = W_0/L_0^{n+1}$, $[u_o] \sim U_0 = (g'h_0^2L_0^{s-1}C_w^{-1}\nu^{-s})^{1/(2-s)}$, $[t] \sim L_0/U_0$. Де L_0 характерна ширина смуги нафти у разі односпрямованого розтікання або радіальний масштаб плями в осесиметричному випадку і W_0 - характеристичний об'єм у разі осесимметричного розтікання та об'єм на одиницю довжини нафтової смуги у випадку односпрямованого розтікання. Значення показника n із n = 0 у випадку односпрямованого розповсюдження n = 1, а у випадку осесимметричного розтікання. Використовуючи таке масштабування, ми отримуємо

$$\frac{\partial \hat{h}}{\partial \hat{t}} + \frac{1}{\hat{r}^n} \frac{\partial (\hat{h}\hat{u}_o \hat{r}^n)}{\partial \hat{r}} = 0, \qquad (5.17)$$

$$\hat{h}\frac{\partial\hat{h}}{\partial\hat{r}} = -\frac{\hat{u}_o^{2-s}}{\hat{\ell}^s}.$$
(5.18)

Характерний масштаб нафтової плями $\hat{\ell} = \hat{r}_{max} - \hat{r}$ це відстань від передньої кромки плями \hat{r}_{max} . Як і в [147] рівняння (5.17)-(5.18) були доповнені до повного рівняння нерозривності:

$$\hat{W} = \int_0^{\hat{r}_{max}} (2\pi\hat{r})^n \hat{h} d\hat{r} = \hat{q}\hat{t}^m.$$
(5.19)

де ми припустили, що об'єм плями $\hat{W}(\hat{t})$ змінюється як \hat{t}^m за рахунок джерела, поміщеного в $\hat{r} = 0$. Тут \hat{q} ($\hat{q} > 0$) та m ($m \ge 0$) - константи. Для випадку m = 0 режим відповідає миттєвому розливу.

Ми шукаємо автомодельний розв'язок (5.17)-(5.19) у вигляді:

$$\hat{h} = \hat{t}^{\alpha} H(\eta), \quad \hat{u}_o = \hat{t}^{\beta} U(\eta), \quad \eta = \hat{r}/\hat{t}^{\gamma}, \quad \hat{\ell} = (\eta_{\max} - \eta)\hat{t}^{\gamma}, \quad (5.20)$$

де η_{max} -відповідає передній кромці плями. Підставляємо (5.20) в (5.17)-(5.19) та після спрощення отримаємо:

$$\hat{t}^{\gamma-\beta-1}\left(\alpha H - \gamma\eta \frac{dH}{d\eta}\right) + \frac{1}{\eta^n} \frac{d}{d\eta} \left(\eta^n UH\right) = 0, \qquad (5.21)$$

$$\hat{t}^{2\alpha - (1-s)\gamma - (2-s)\beta} H \frac{dH}{d\eta} = -(\eta_{max} - \eta)^{-s} U^{2-s}, \qquad (5.22)$$

$$\hat{t}^{\alpha+(n+1)\gamma-m}(2\pi)^n \int_0^{\eta_{max}} H\eta^n d\eta = \hat{q}.$$
(5.23)

Автомодельність вимагає, щоб ступені \hat{t} у (5.21)-(5.23) були нулями. Відповідні константи α, β, γ визначаються як

$$\alpha = \frac{3m - 2(n+1) + (n - 2m + 1)s}{2(n+1) + 3 - 2s}, \quad \beta = -\frac{2(n-m) + 3 - s}{2(n+1) + 3 - 2s},$$
$$\gamma = \frac{2m + 2 - s}{2(n+1) + 3 - 2s}.$$
(5.24)

Режим	n	m	α	β	θ	γ	ϕ
Гравітаційно-в'язкий	0	0	-3/8	-5/8	_	3/8	-1/4
Гравітаційно-в'язкий	1	0	-1/2	-3/4	—	1/4	-1/2
Гравітаційно-в'язкий	0	1	1/8	-1/8	—	7/8	3/4
Гравітаційно-в'язкий	1	1	-1/6	-5/12	—	7/12	1/6
Гравітаційно-турбулентний	0	1	4/23	-4/23	—	19/23	15/23
Гравітаційно-турбулентний	1	1	-5/33	-14/33	—	19/33	5/33
Гравітаційно-в'язко-обертальний	0	0	-1/4	-3/4	-3/4	1/4	-1/2
Гравітаційно-в'язко-обертальний	1	0	-1/3	-5/6	-5/6	1/6	-2/3
Гравітаційно-в'язко-обертальний	0	1	1/4	-1/4	-1/4	3/4	1/2
Гравітаційно-в'язко-обертальний	1	1	0	-1/2	-1/2	1/2	0

Табл. 5.1: Чисельні значення ступенів в степеневих законах подібності для односпрямованого і осесиметричного розтікання нафтової плями

Число Рейнольдса Re_{ℓ} залежить від часу по закону \hat{t}^{ϕ} , де $\phi = \beta + \gamma$. Чисельні значення показників ступенів в автомодельних законах для односпрямованого і осесимметричного поширення нафтової плями в гравітаційнов'язкому режимі наведені в таблиці 5.1. Відповідно до таблиці 5.1 Re_{ℓ} затухає із часом ($\phi < 0$) для миттєвого витоку (m = 0). Тому пограничний шар при розтіканні плями залишається ламінарним при відсутності сильної зовнішньої турбулентності, викликаної повітряними течіями та хвилями, що перекидаються. Однак, Re_{ℓ} зростає із часом для неперервних витоків нафти, що дає можливість переходу до гравітаційно-турбулентного режиму при достатньо великих Re_{ℓ} і відповідні значення ступенів приведені в таблиці 5.1. Введемо такі позначення $\eta_* = \eta/\eta_{max}$ $H_* = H/\eta_{max}$ та $U_* = U/\eta_{max}$. Розв'язок системи рівнянь (5.21)-(5.22) повинен задовольняти дві граничних умови. Перша з них $H_* = 0$ - на границі плями $\eta_* = 1$. Умова збереження (5.23) відіграє роль другої граничної умови. Нові аналітичні розв'язки системи рівнянь (5.21)-(5.22) для гравітаційно-в'язкої стадії (s = 1/2) були отримані для випадку миттєвого витоку m = 0 як

$$H_*^2 = \frac{3\pi\gamma^{3/2}}{4} \left[1 + \sqrt{1 - \eta_*} \left(\frac{2}{\pi} \sqrt{\eta_*} + \frac{4}{3\pi} \eta_* \sqrt{\eta_*} \right) - \frac{2}{\pi} \arctan \sqrt{\frac{\eta_*}{1 - \eta_*}} \right], (5.25)$$
$$U_* = \gamma \eta_*, (5.26)$$

Значення для η_{max} були отримані за допомогою чисельного розв'язання рівняння (5.25), що було підставлено в (5.23). Ці значення дорівнюють 1.06 для n = 0 та 0.89 для n = 1. Закон розтікання у безрозмірних величинах задається як

$$r_{max} = F_i \left(g' W^2 / \nu^{1/2} \right)^{2\gamma/3} t^{\gamma}$$
(5.27)

Коефіцієнт $F_i = \eta_{max}/C'^{2\gamma/3}$ дорівнює 1.62 для односпрямованого розтікання (n = 0) та 1.06 для осесимметричного розтікання (n = 1). Як видно з Таблиці 5.2 перше значення добре узгоджується з експериментальним значенням 1.5 [?]. У теоретичних дослідженнях, які відрізнялися головним чином параметризацією пограничного шару під плямою, значення F_i де 1.39 [?], 1.76 [?], 1.77 [?] для односпрямованого розтікання та 1.12 [?], 0.98 [?], 1.15 [?] для осесимметричного розтікання.

Слідуючи [147] розв'язок задачі для неперервного розливу (m > 0) може бути отримано шляхом інтегрування (5.21)-(5.22) $\eta_* = 1$. Рівняння (5.22) мають особливість у $\eta_* = 1$. Тому початкові умови для рівнянь (5.21)-(5.22) були отримані від степеневих асимптотик при $\eta_* = 1$ як

$$H_* = \sqrt{\frac{2}{1-s}} \gamma^{\frac{2-s}{2}} (1-\eta_*)^{\frac{1-s}{2}} \left[1 + O(1-\eta_*)\right], \ U_* = \gamma + O(1-\eta_*) \quad (5.28)$$

Розв'язок (5.28) у $\eta_* = 0.999$ були використані в якості початкових умов для розв'язку системи (5.21)-(5.22) методом Руннге-Кутта. Відмітимо для m = 0 наближений розв'язок вищого порядку апроксимації для гравітаційно-в'якого режиму може бути отримано близько $\eta_* = 1$ як

$$H_* = 2\gamma^{3/4} (1 - \eta_*)^{1/4} \left[1 - \frac{1}{4} \xi + O((1 - \eta_*)^2) \right], \ U_* = \gamma \eta_*$$
(5.29)

Автор	Дослідження	n = 0	n = 0	n = 1	n = 1
		m = 0	m = 1	m = 0	m = 1
[144]	Експ.	1.5			
[144]	Теорія			1.12	
[121]	Теорія	1.39		0.98	
[79]	Теорія	1.76			
[96]	Теорія	1.77		1.12	
[97]	Експ.		0.572		
[98]	Експ.				0.363
Ця робота	Теорія	1.62	1.09	1.06	0.816

Табл. 5.2: Числові параметри закону розтікання для гравітаційно-в'язкого режиму.



Рисунок 5.1: Автомодельні профілі товщини нафтової плями H_* в гравітаційно-в'язкому та гравітаційно-турбулентному режимі у випадку осесимметричного розтікання для m = 0and m = 1. Повні розв'язки показані суцільною лінією, а асимптотичні розв'язки (5.29) зображені пунктиром. Аналітичні розв'язки (5.25) показані чорними кружками.

Автомодельні профілі H_* у випадку осесимметричного розтікання показані на Рис.5.1. Як видно із рисунків, при гравітаційно-в'язкому режимі при m = 0 чисельний розв'язок з початковими умовами (5.28) співпадає з аналітичним розв'язком (5.25). Зауважимо, що наближений розв'язок (5.29) узгоджується із аналітичним, навіть при $\eta_* \approx 0$. Профілі H_* у [96] більш круті біля кромки за рахунок відмінностей в описі ламінарного пограничного шару в плямі. Профіль H_* для гравітаційно-в'язкого режиму із постійним притоком нафти (m = 1) на Рис.5.1 відрізняється від випадку миттєвого розливу (m = 0). Товщина і швидкість необмежено зростають при r = 0. Така сингулярна поведінка розв'язку пояснюється ідеалізованими умовами для притоку $r \to 0$ у випадку осесимметричного розтікання. В реальних умовах потік від підводного викиду розтікається по деякій області на поверхні. У разі точкового джерела в рівняннях руху інерційні члени мають бути враховані.

Значення η_{max} у випадку гравітаційно-в'язкого режима були отримані чисельно. Вони дорівнюють 0.834 для n = 0 і 0.679 для n = 1. Відповідний закон розтікання в розмірних змінних має вигляд:

$$r_{max} = F_{CV} \left(g' q^2 / \nu^{1/2} \right)^{2\gamma/7} t^{\gamma}$$
(5.30)

Коефіцієнт $F_{CV} = \eta_{max}/C_w'^{2\gamma/7}$ дорівнює 1.09 та 0.816 для односпрямованого і осесиметричного розтікання, відповідно. Це відрізняється від значень 0.572 та 0.363, що отримані із лабораторних експериментів [97]. Можливі причини цих розбіжностей будуть обговорені в наступному розділі.

Відмітимо, що показники у степеневих законах у випадку гравітаційнов'язкого та гравітаційно-турбулентного режиму близькі, тобто для n = 1 та m = 1 значення γ дорівнюють $7/12 \approx 0.583$ та $19/33 \approx 0.576$. Однак, як видно із рис. 5.1 автомодельні профілі H_* відрізняються. Профіль в гравітаційнотурбулентному режимі не настільки крутий на краю нафтової плями, як у гравітаційно-в'язкому режимі. Закон розтікання для гравітаційно-турбулентного режима є

$$r_{max} = F_{CT} \left(g' q^2 / \nu^s \right)^{\gamma/(4-s)} t^{\gamma}, \qquad (5.31)$$

де множник $F_{CT} = \eta_{max} / C_w''^{\gamma/(4-s)}$. Значення η_{max} та множник F_{CT} дорівнює

0.598 та 1.30 для односпрямованого розтікання 0.81 та 1.40 для осесимметричного розтікання, відповідно.

5.2.4 Автомодельні розв'язки для гравітаційно-в'язко-обертального режиму

Симетричне розтікання в спокійному морі ($\vec{u}_w = 0$) у гравітаційно-в'язкій стадії під дією сили Коріоліса (гравітаційно-в'язкий режим із обертанням) можуть бути вивчені в подібній спосіб. Для цього режиму використовується параметризація тертя (5.9). Замість координат (x, y) ми будемо використовувати відстань вздовж нафтової смуги r у випадку для односпрямованого розтікання та радіальну відстань у випадку осесимметричного розтікання. Рівняння нерозривності та рівняння руху можуть бути записані у безрозмірних змінних $\hat{r}, \hat{t}, \hat{h}, \hat{u}_o, \hat{v}_o$, із використанням масштабування: $[r] \sim L_0$, $[h] \sim h_0 = W_0/L_0^{n+1}$, $[u_o] \sim U_0 = (\sqrt{2}g'h_0^2/(L_0\sqrt{\nu_w f}), [v_o] \sim U_0, [t] \sim L_0/U_0,$ де u_o та v_o компоненти швидкості поперек і вздовж смуги нафти, відповідно, або радіальна і трансверсальна швидкість у разі осесимметричного розтікання.

Використовуючи це масштабування та після спрощення рівнянь руху, отримаємо

$$\hat{h}\frac{\partial h}{\partial \hat{r}} = -[1 + (1 + \epsilon \hat{h})^2]\hat{u}_o, \qquad (5.32)$$

$$\hat{v}_o = -(1+\epsilon\hat{h})\hat{u}_o, \qquad (5.33)$$

де $\epsilon = \sqrt{2fh_o^2/\nu}$ - корінь квадратний із оберненого числа Екмана для нафтової плями. Рівняння нерозривності (5.17) та рівняння руху (5.32)-(5.33) доповнюються інтегральним законом збереження (5.19).

Будемо шукати автомодельні розв'язки (5.17), (5.32)-(5.33) та (5.19) у ви-

гляді

$$\hat{h} = \hat{t}^{\alpha} H(\eta), \quad \hat{u}_o = \hat{t}^{\beta} U(\eta,), \quad \hat{v}_o = \hat{t}^{\theta} V(\eta,), \quad \eta = \hat{r}/\hat{t}^{\gamma},$$
 (5.34)

Підставляємо (5.34) в (5.17), (5.32)-(5.33), що призводить до системи звичайних диференціальних рівнянь

$$\eta^n \left(\alpha H - \gamma \eta \frac{dH}{d\eta} \right) + \frac{d}{d\eta} \left(\eta^n U H \right) = 0, \qquad (5.35)$$

$$H\frac{dH}{d\eta} = -2U,\tag{5.36}$$

$$V = -U, \tag{5.37}$$

якщо $\,\alpha,\beta,\theta,\gamma\,$ зв'язані як

$$\alpha = -\frac{1+n-2m}{2(2+n)}, \quad \beta = \theta = -\frac{3+2n-2m}{2(2+n)}, \quad \gamma = \frac{2m+1}{2(2+n)}.$$
 (5.38)

Чисельні значення показників в автомодельних степеневих законах для односпрямованого і осесимметричного розтікання нафтової плями в гравітаційнов'язкому режимі із обертанням наведені в таблиці 5.1. Як видно з таблиці, розтікання в гравітаційно-в'язкому режимі із обертанням відбувається повільніше, аніж в гравітаційно-в'язкому режимі. Це можна пояснити спостережуваним уповільненням розтікання в деяких випадках [264].

Переглянемо змінні $\eta_* = \eta/\eta_{max}$, $H_* = H/\eta_{max}$ $U_* = U/\eta_{max}$ та $V_* = V/\eta_{max}$ де η_{max} відповідає передній кромці плями \hat{r}_{max} . Аналітичні розв'язки (5.35)-(5.37) при m = 0 мають вигляд

$$H_* = \sqrt{2\gamma} \left(1 - \eta_*^2\right)^{1/2}$$
(5.39)

$$U = -V = \gamma \eta_*, \tag{5.40}$$

де $\eta_{max} = (3/2)^{1/6} \pi^{-1/3}$ отримано із використанням (5.23).

При m>0 ми знаходимо аналітичний розв'язок (5.35)-(5.37) при $\eta_*=1$



Рисунок 5.2: Автомодельні профілі товщини нафтової плями H_* в гравітаційно-в'язкому режимі із обертанням для m = 0 and m = 1. Повні розв'язки показані суцільною лінією, а асимптотичні розв'язки (5.41) зображені пунктиром. Аналітичні розв'язки (5.39) показані чорними кружками

ЯΚ

$$H_* = \sqrt{4\gamma} (1 - \eta_*)^{1/2} \left[1 - a_1 (1 - \eta_*) + O(1 - \eta_*)^2 \right], \qquad (5.41)$$

$$U_* = -V_* = \gamma + 2\sqrt{4\gamma}a_1(1-\eta_*) + a_1^2(1-\eta_*)^2 + O(1-\eta_*)^3, \qquad (5.42)$$

де $a_1 = -\sqrt{4\gamma} [1 - (2n+1)\gamma]/(12\gamma)$. Ці розв'язки були використані у якості початкових умов при $\eta_* = 0.995$ для чисельного розв'язку рівнянь (5.35)-(5.36) методом Рунге-Кутта.

Автомодельні профілі H_* та компоненти швидкості U_* and V_* для випадку осесимметричного розтікання нафтової плями приведені на рис.5.2 та 5.3. Як видно з рис.5.2 чисельний повний розв'язок для миттєвого витоку збігається з аналітичним розв'язком (5.39) та асимптотичним розв'язком (5.41) добре узгоджуються з повним розв'язком виключаючи внутрішню область плями. Профіль H_* не настільки крутий на кромці плями як у випадку із плямою без обертання завдяки лінійному закону тертя (5.9). Наближений



Рисунок 5.3: Автомодельні профілі компонент швидкості U_* та V_* для випадку осесимметричного розтікання нафтової плями в гравітаційно-в'язкому режимі із обертанням для m = 0 та m = 1.

розв'язок (5.41) для постійного витоку відрізняється від повного розв'язку біля $\eta_* = 0$ тому що товщина H_* та компоненти швидкості U_* та V_* для повного розв'язку нескінченно зростають до витоку джерела нафти при $\eta_* = 0$. Новою найбільш важливою особливістю гравітаційного-в'язкого режиму із обертанням є поява трансверсальної швидкості за рахунок сили Коріоліса. Частинки нафти рухаються від центру осесимметричного плями по спіралях. Компоненти швидкості зростають з відстанню від центру плями у разі миттєвого розливу в той час як для постійної швидкості витоку обидві компоненти швидкості збільшуються к центру плями. В обох випадках трансверсальна швидкість не зникає на краях плями. Тим не менш, на краю плями товщина пограничного шару менше товщини шару Екмана і вектори швидкості розтікання будуть спрямовані по нормалі до кромки.

Цей ефект відсутній в ідеалізованій задачі (5.17), (5.32)-(5.33). Це буде розглянуто у наступному розділі, де буде приведено чисельний розв'язок повної задачі. Закон розтікання у розмірних змінних для миттєвого розливу в

$$r_{max} = F_{IR} \left(g' W_0^2 / \sqrt{\nu_w f} \right)^{\gamma} t^{\gamma}$$
(5.43)

де множник $F_{IR} = 2^{\gamma/2} \eta_{max}$ є 0.994 для осесиметричного розливу. Відповідний закон розтікання для безперервного розливу має вигляд:

$$r_{max} = F_{CR} \left(g' q^2 / \sqrt{\nu_w f} \right)^{\gamma/3} t^{\gamma}$$
(5.44)

де множник $F_{IR} = 2^{\gamma/6} \eta_{max}$ is 0.777 для осесиметричного розливу.

5.2.5 Чисельні розрахунки по розтіканню осесиметричної нафтової плями по поверхні спокійної води

В цьому параграфі наводяться та аналізуються результати розрахунків, що проведені чисельною моделлю поверхневої плівки нафти, опис якої наведений в розділі 5.2.1. Порівнюються 6 розрахунків. У всіх розрахунках наступні параметри були спільні: $\rho_o = 870$ кг м⁻³, $\rho_w = 1024$ кг м⁻³, $\nu_w = 1.1 \cdot 10^{-6}$ м²с⁻¹, $f = 10^{-4}$ с⁻¹. Загальна кількість частинок, що брали участь у кожному розрахунку, була близько 10^5 , об'єм кожної частинки 0.6 м³, часовий крок моделі $\Delta t = 5$ с, горизонтальний масштаб частинки R = 100 м.

В перших двох розрахунках (сценарій 1 та 2) моделювався миттєвий розлив 30000 м³ нафти з урахуванням сили Коріоліса та без урахування, відповідно. Нафту було розлито у колі діаметром 200м за часовий інтервал 2000с. В наступних двох розрахунках (сценарій 3 та 4) моделювався неперервний розлив з урахуванням та без урахування сили Коріоліса, відповідно. Швидкість витоку була $q = 0.3 \text{ м}^3 \text{c}^{-1}$. Нові частинки, що виникали на кожному часовому кроці були випадковим образом розподілені в колі діаметром 150м. Зміна з часом радіусу нафтової плівки r_{max} в сценаріях 1-4 показана на рис. 5.4. В цих сценаріях на початку моделювання домінував гравітаційно-в'язкий режим в





Рисунок 5.4: Зміна з часом радіусу поверхневої нафтової плями в гравітаційно-в'язкому режимі та в гравітаційно-в'язкому режимі з обертанням. (а) при миттєвому та (б) при неперервному розливі. Автомодельні залежності позначені згідно залежностей (5.24) та (5.38)

процесі розтікання. Але, після 3-4 годин тертя Екмана почало сповільнювати розтікання. Через 2 доби площа плівки в сценаріях 2 та 4 стала меншою, ніж в сценаріях 1 та 3 в 1.96 та 1.82 рази, відповідно. Це демонструє важливість сили Коріоліса в процесі розтікання. Чисельні розрахунки добре узгоджуються з автомодельними залежностями (5.24) та (5.38). Зауважимо, що режим розтікання в сценаріях 2 та 4 не є чисто гравітаційно-в'язко-обертальним як в автомодельних розв'язках, тому що в чисельних розрахунках зовнішній край плівки розповсюджується в гравітаційно-в'язкому режимі. Була отримана оцінка для константи розтікання для сценаріїв 1 та 3, що склала 1.1 в (5.27) та 0.84 в (5.30), відповідно. Ці значення добре узгоджуються з теоретичним значеннями, що наведені в Таблиці (5.2).

Так само як і теоретичне значення, обчислена з чисельних розрахунків константа розтікання дещо більша за експериментальне значення [98]. Згідно (5.30) залежність множника F_{CV} від константи C'_w є слабкою. Стандар-



Рисунок 5.5: Траєкторії частинок в інтервалі від t = 2 hr до t = 48 годин (розрахунок 4). Товщину плівки позначено в мм на момент часу 48 годин

тне значення $C'_w = 0.332$ [270] має бути збільшене в 64 рази для того, щоб зменшити константу розтікання вдвічі, що не є реалістичним. Особливо при умові гарного узгодження з експериментальними та теоретичними роботами для миттєвого розливу. Тому ми можемо припустити існування додаткової уповільнюючої сили в мілкомасштабних експериментах [97]-[98]. Можливим механізмом уповільнення є сила поверхневого натягу, що діє в околі джерела в експериментах (тонка стіна [97] або трубка [98]). Детальний аналіз цих процесів виходить за межі цієї роботи де розглядаються великомасштабні процеси розтікання.

Структура течії в плівці з урахуванням ефекту Коріоліса показана на рис. 5.5 де траєкторії частинок в сценарії 4 наведені для часового проміжку від t = 2 до t = 48 годин. Траєкторії частинок відхиляються від напрямку градієнту товщини плівки за рахунок Екманівського тертя як це було показано в розділі 5.2. Нормальна та тангенціальна компоненти швидкості розтікання в



Рисунок 5.6: Переріз компонент швидкості вздовж вісі х в гравітаційно-в'язкообертальному режимі при неперервному розливі в сценарії 4 в момент часу t = 48 годин. Джерело позначено товстими вертикальними лініями

перерізі вздовж діаметру показані на рис. 5.6. Згідно з автомодельним аналізом в розділі 5.2.4, профілі цих компонент є подібними. В розрахунках немає особливості в центрі плями, тому що розмір джерела є скінченим, як видно з рис. 5.6 через неважливість Екманівського тертя на кромці плями, тангенціальна компонента прямує до нуля на границі плівки, що відрізняється від автомодельного розв'язку на рис. 5.3.

В останніх двох розрахунках (сценарії 5 та 6) моделювався неперервний розлив в полі течій з урахуванням та без урахування сили Коріоліса. Умови витоку були такі ж як і в сценаріях 3,4. Течія була напрямлена під кутом 45° до вісі x, а швидкість дорівнювала 0.2 m c^{-1} . На рис. 5.7 показаний розподіл товщини плівки через 3 години після початку витоку. Як видно з рисунку, вплив сили Коріоліса призводить до більш вузької та товстої плями при розті-канні від джерела. Через дві доби після початку витоку площа плями стала в 2.38 рази меншою за пляму в сценарії без обертання. Цей ефект є сильнішим, ніж в сценарії без течій, тому що у видовжених плямах домінує одновимірний закон розтікання.



Рисунок 5.7: Товщина нафтової плівки при неперервному розливі в полі течій після 3х годин моделювання. (a) без обертання (сценарій 5) та (b) з обертанням (сценарій 6)

5.3 Модель диспергованих нафтових крапель

В даному розділі наводиться короткий опис моделі диспергованих крапель нафти, що більш детально розглянутий в серії робіт [74,75,4,5,191]. В наступних розділах наведено модифікації моделі для урахування процесів вивітрювання та врахуванню впливу нафтових бумів.

Введемо до розгляду шар перекидання хвиль, якому концентрація нафти передбачається однорідною за глибиною. Існування такого шару підтверджується експериментами [112] по перекиданню поодинокої хвилі. Товщина цього шару пов'язана зі значущою висотою хвилі ($Z_s \approx 1.5H_s$). Джерело нафти за рахунок надходжень з поверхневої плями вважаємо рівномірно розподіленим по глибині шару обвалення хвиль і нульовим поза цим шаром. Тоді, вважаючи краплі нафти пасивної домішкою, що не впливає на середні течії і з огляду на плавучість крапель, запишемо рівняння адвекції-дифузії для концентрації нафти заданого розміру d:

$$\frac{\partial C_d}{\partial t} + \vec{\nabla} (C_d \vec{u}) - \vec{\nabla}_h (K_h \vec{\nabla}_h C_d) - \frac{\partial}{\partial z} K_v \frac{\partial C_d}{\partial z} = Q_1 \tag{5.45}$$

Тут введені наступні позначення: C_d – питома концентрація нафтових ча-

стинок $\left[\frac{\mathrm{K}\Gamma}{\mathrm{M}^{3}\mathrm{M}}\right]$ диаметра d, $\vec{\nabla}_{h} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}\right)$,

$$Q_{1} = \begin{cases} \frac{Q(d)\rho_{o}}{Z_{s}}, & z \in [0; -Z_{s}] \\ 0, & z \in [-Z_{s}; -\infty] \end{cases},$$
(5.46)

 $\vec{u} = (u_x, u_y, u'_z); u'_z = u_z + v_d$, де u_x, u_y, u_z – компоненти швидкості течії, а u_d – швидкість підняття частики діаметру d; Q(d) – потік нафтових крапель діаметру d з поверхні; K_h, K_v – коефіцієнти горизонтальної та вертикальної турбулентної дифузії, відповідно. Швидкість спливання частки під дією сили плавучості обчислюється за формулами [117]:

$$u_{d} = \begin{cases} \frac{gd^{2}(1-\rho_{0}/\rho)}{18\nu}, & d < d_{c} \\ \sqrt{\frac{8}{3}gd(1-\rho_{0}/\rho)}, & d \ge d_{c} \end{cases}$$
(5.47)

де

$$d_c = \frac{9.5\nu^{2/3}}{\sqrt[3]{g(1-\rho_0/\rho)}}.$$
(5.48)

Формула для швидкості спливання краплі малого розміру є формулою Стокса, отриманої для обтікання сфери в'язкою рідиною при малих числах Рейнольдса [28]. Швидкість спливання для великих крапель отримана для турбулентного обтікання сфери при нехтуванні силами в'язкості [117].

Модель розповсюдження поверхневої плівки нафти пов'язана з тривимірною моделлю дисперсії нафти через граничні умови на поверхні, які моделюються джерельної членами в рівняннях (5.1), (5.45). Розглянемо випадок, коли випаровування немає, і зміна маси поверхневої плівки відбувається тільки за рахунок дисперсії нафти і спливання крапель на поверхню $(Q_{wa} = Q_{disp} - Q_{res})$. Визначимо Q_{disp} наступним чином:

$$Q_{disp} = \int_{d_{\min}}^{d_{\max}} Q(d)\delta d, \qquad (5.49)$$

де Q(d) – потік нафтових крапель розміру d, d_{\min} , d_{\max} – мінімальний та максимальний розміри крапель, що виникають при перекиданні хвиль. Згідно [112] Q(d) може бути визначено за формулою:

$$Q(d) = \frac{C(o)}{\rho_o} F_{wc} D_{ba}^{0.57} d^{0.7}, \qquad (5.50)$$

де C(o) – розмірна емпірична константа, що залежить від властивостей нафти; D_{ba} – енергія, що дисипується при перекиданні хвиль на одиницю площі; F_{wc} – доля поверхні, що вкрита "бурунцями" за одиницю часу.

$$F_{wc} = c_b (U_w - U_{wi}) / T_w, (5.51)$$

де T_w – період хвилі; U_w – швидкість вітру; U_{wi} – критична швидкість вітру (≈ 5 м/с); c_b – емпірична константа (≈ 0.032).

$$D_{ba} \approx 0.034 \rho_w g H_{rms}^2, \tag{5.52}$$

де H_{rms} – середньоквадратична висота хвилі. Середньоквадратичну висоту хвилі зазвичай пов'язують зі висотою значущої хвилі H_s таким чином:

$$H_{rms} = 0.7H_s \tag{5.53}$$

Відмітимо, що Q_{disp} має розмірність $[\mathbf{M} \cdot \mathbf{c}^{-1}]$, а Q(d), відповідно $[\mathbf{c}^{-1}]$.

Співвідношення (5.50) засноване на експериментальному розподілі крапель нафти за розмірами, а саме $n(d) \sim d^{-2.3}$. Як показано в [163] ця залежність не цілком точно описує більш точні експерименти. Тому в моделі використовується співвідношення, яке ґрунтується на припущенні, що розподіл часток є логарифмічно-нормальним. Згідно з результатами [4,5], таке припущення виглядає більш виправданим. Таким чином

$$Q(d) = \frac{C_1(o)}{\rho_o} F_{wc} D_{ba}^{0.57} d^3 f(d/d_{\text{max}}).$$
(5.54)

$$f^*(k) = \frac{M}{\sqrt{2\pi\sigma k}} \exp\left(\frac{(\ln k - a)^2}{2\sigma^2}\right)$$
(5.55)

де $k \in [0; 1]$, а константа M знаходиться з умови збереження об'єму:

$$\int_{0}^{1} k^{3} f^{*}(k) dk = 1$$
(5.56)

а нова константа $C_1(o)$ знаходиться з умови збереження інтегрального потоку Q_{disp} , тобто:

$$\int_{d_{\min}}^{d_{\max}} C_1(o) d^3 f(d/d_{\max}) \delta d = \int_{d_{\min}}^{d_{\max}} C(o) d^{0.7} \delta d$$
(5.57)

Втрати маси з поверхневої плями визначаються за формулою (5.49), де Q(d) обчислюється з (5.54).

Постановку задачі завершує задання граничних умов на поверхні та на нескінченій глибині:

$$C_d|_{z \to -\infty} = 0; \quad \left. \frac{\partial C_d}{\partial z} \right|_{z=0} = 0$$
 (5.58)

Пояснимо докладніше вибір граничних умов на поверхні. Задання додатнього градієнта на поверхні означало б додатковий приплив нафти з поверхні, хоча за умовами задачі весь приплив нафти моделюється джерельним членом в рівнянні (5.45). Завдання ж негативного градієнта на поверхні призвело б до утворення локального максимуму в профілі концентрації. Завдання подібних граничних умов означає відсутність дифузійного потоку на поверхні. Тоді потік крапель нафти діаметру *d* на поверхню за рахунок спливання може бути визначений за формулою:

$$Q_{res}(d) = C_d v_d \tag{5.59}$$

де C_d визначається з розв'язку рівняння (5.45), а швидкість спливання v_d згідно формулам (5.47). Після розв'язку задачі (5.45) для знаходження сумарної концентрації нафти необхідно проінтегрувати отримані питомі концентрації крапель нафти конкретних розмірів, тобто

$$C(x, y, z, t) = \int_{d_{\min}}^{d_{\max}} C_d(x, y, z, t, d) \delta d,$$
 (5.60)

Таким чином, тривимірна модель нафтового розливу складається з моделі поверхневої плівки нафти (5.1), рівняння для тривимірного переносу нафтових крапель у воді (5.45), які пов'язані між собою джерельними членами за рахунок потоку нафтових крапель з поверхні (5.54) та наступним їх підняттям на поверхню під дією сили плавучості (5.59).

5.4 Моделювання процесів вивітрювання

Випаровування

Для моделювання процесу випаровування нафти використовувався підхід, описаний в [123]. Основними факторами, що впливають на процес випаровування є температура і індивідуальні характеристики сорту нафти. У цих роботах було обґрунтовано, що з хорошою точністю закон випаровування практично всіх відомих сортів нафти (вірніше тих, з якими проводилися експерименти) можна описати за допомогою функцій $\ln(t)$ и \sqrt{t} :

$$F_E = (C_1 + C_2 T) \ln(t), \quad \text{abo} \quad F_E = (C_1 + C_2 T) \sqrt{t}, \quad (5.61)$$

Рівняння (5.61) явно залежать від часу і мають особливість в нульовий момент часу для логарифмічної залежності. Для застосування цього підходу в моделі співвідношення (5.61) були переписані в диференціальній формі:

ln:
$$F'_E = (C_1 + C_2 T) \exp(-F_E/(C_1 + C_2 T))$$

 $\sqrt{}: F'_E = \frac{(C_1 + C_2 T)^2}{2F_E}$
(5.62)

У чисельній моделі рівняння (5.62) розв'язувалися явно чисельної схемою першого порядку точності:

$$F_E^{n+1} = F_E^n + \Delta t F_E^{\prime n+1}$$
(5.63)

На кожному часовому кроці розраховується маса нафти, яка повинна випаруватися на цьому часовому кроці $m_{ev}^n = \Delta t F_E^{\prime n+1} M_{oil}^n$, де M_{oil}^n – загальна маса нафтової плями на *n*-му часовому шарі. Процес випаровування моделюється "усуненням" відповідної кількості часток. Видалення частинок відбувається за схожим алгоритмом із "змиванням" нафти з берега. Кількість частинок округлюється до меншого цілого, і до цієї кількості додається ще одна частинка з ймовірністю, рівній залишку від округлення. Потім необхідне число частинок видаляється із загальної кількості частинок, що беруть участь в моделюванні поверхневої плівки, випадковим чином.

Емульгація

Емульгація нафти і нафтопродуктів - це процес залучення крапельок води в нафту, тобто утворення емульсії води в нафти. Здатність нафти утворювати емульсії пов'язана з часткою асфальтенів в складі нафти, а стійкість такої емульсії визначається кількістю воскових сполук. В результаті емульгації істотно збільшується об'єм плями (можливо в 3-4 рази в порівнянні з обсягом не емульгованої нафти), а так само значно збільшується густина і в'язкість емульсії (так званого "шоколадного мусу").

Залучення води в нафту може бути обчислене використовуючи рівняння

[190]:

$$Y_E = C_3 \left[1 - \exp\left(\frac{-2 \times 10^{-6}}{C_3} (1+W)^2 t\right) \right]$$
(5.64)

Для моделювання емульгації рівняння (5.64) також було переписано в диференціальній формі:

$$\frac{dY_E}{dt} = 2 \times 10^{-6} \left(1 + W\right)^2 \left(1 - \frac{Y_E}{C_3}\right)$$
(5.65)

Рівняння (5.65) також розв'язувалося найпростішою чисельною схемою:

$$Y_E^{n+1} = Y_E^n + \Delta t Y_E^{\prime n+1}$$
 (5.66)

При моделюванні процес емульгації враховувався шляхом відповідного збільшення маси всієї частинки, при цьому відповідно змінювались в'язкість та густина всієї нафтової плями згідно співвідношенням (5.70)–(5.69).

Розчинення

Для моделювання потоку нафти в воду в результаті розчинення $Q^{(diss)}$ використовуємо метод [103] згідно якого

$$Q^{(diss)} = K_{diss} f_s S_{oil}, (5.67)$$

де $K_{diss} = 0.01$ м/год. емпіричний коефіцієнт розчинення, f_s фракція поверхні, що вкрита нафтою, що дорівнює вмісту нафти в емульсії нафти і води, S_{oil} розчинність у воді. Нафтова розчинність з часов зменшується за рахунок вивітрювання, це процес можна описати згідно [145]:

$$S_{oil} = S_0 \exp(-\alpha t), \tag{5.68}$$

де S_0 – розчинність для свіжої нафти ($S_0 = 30 \, \Gamma / M^3$), $\alpha = 0.1$ константа затухання, t- час в годинах.
Зміна густини

Густина нафти, що змінюється в результаті процесів вивітрювання розраховується із співвідношення [272]:

$$\rho_o = Y_{emu}\rho_w + \rho_o^{ini}(1 - Y_{emu})(1 + c_{DE}Y_{eva})\left[1 - c_{DT}(T - T_{ref})\right]$$
(5.69)

де ρ_o^{ini} – густина свіжої нафти при заданій температурі T_{ref} , Y_{eva} фракція нафти, що випарувалася, $c_{DE} = 0.18$ та $c_{DT} = 8 \cdot 10^{-4}$ – емпіричні константи.

Зміна в'язкості

В'язкість нафти, що змінюється в результаті процесів вивітрювання розраховується із співвідношення [272]:

$$\mu_o = \mu_o^{ini} \exp\left[c_{\mu e} Y_{eva} + \frac{c_v Y_{emu}}{1 - c_m Y_{emu}} + c_T \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right]$$
(5.70)

де μ_o^{ini} динамічна в'язкість свіжої нафти при температурі T_{ref} , а $c_{\mu e}$, c_v , c_m – емпіричні константи. Тут $c_{\mu e}$ змінюється з сортом нафти між 1 та 10. В цій моделі, коли свіжа нафта при початковій температурі має кінематичну в'язкість ν_o більше за 38 cSt, $c_{\mu e}$ дорівнює 10. Для менш в'язких сортів нафти, $c_{\mu e}$ оцінюється з поліноміальної регресії другого порядку:

$$c_{\mu e} = -0.0059\nu_o^2 + 0.4661\nu_o + 1.413.$$

Значення інших констант такі: $c_v = 2.5, c_m = 0.65, c_T = 5000 K$.

Зміна поверхневого натягу

Зміна поверхневого натягу з часом може бути розрахована зі співвідношення

$$\sigma_0 = \sigma_0^{(ini)} (1 - Y_{emu}) \tag{5.71}$$

де $\sigma_0^{(ini)}$ – коефіцієнт поверхневого натягу для свіжої нафти.

5.5 Модель нафтового бона

У цьому розділі описується імітаційна модель локалізації розливу нафти бонами. Бум є плаваючим механічний бар'єром, що призначений для зупинки або перенаправлення руху нафти на воді [124]. Бони можуть бути схематично представлені як вертикальні завіси з частин, що проходять вище і нижче рівня вільної поверхні моря. Бони споруджуються із з'єднаних секцій, як правило, 15 або 30 м завдовжки.

Коли бони використовуються для локалізації нафтових розливів, вони часто розташовані в U-, V-, або J-конфігурації [124]. Ефективність бона бум і його здатність утримувати нафту залежить від його конструкції і геометрії. Робочі характеристики бона залежать від умов морського середовища, які регулюються течіями, хвилями і вітрами. Нафта, що утримується боном знаходиться в рівновазі між силами тертя, викликаного течіями та поверхневими напруженнями вітру та градієнтом тиску. Течії, хвилі і вітер можуть призвести до збою в роботі бона та втрати масла. Кілька випадків, в яких бони бути неефективні описуються в [124]. Як правило, з практики розливів нафти відомо, що бум не затримує нафту при течії, швидкість якої більше 0.5 м/с, якщо бон розташований перпендикулярно течії і 1.9 м/с при куті відхилення 15°.

У чисельній моделі нафтовий бон імітується простим способом. Він моделюється як додатковий тип "берегової лінії", але з додатковими властивостями: підводна юбка (частина стріли нижче ватерлінії) і надводний борт (частина бона над ватерлінією). Схематичне зображення бона приведена на рис. 5.8. Бон може складатися з декількох секцій з заданими координатами кінців кожної секції. Ці ділянки, як правило більше, ніж секції справжнього бону. Частинки нафти в моделі не можуть прилипнути до бона і завжди відбиваються від нього. Розподіл нафти, що утримується боном розраховується моделлю. Коли товщина нафтової плями перевищує глибину юбки бона, то надлишок нафти пропливає під боном. Це відповідає механізму, що описаний у [124] як "провал дренажу". Інший механізм пропускання нафти пов'язаний з переносом дисперсних крапель нафти течіями під боном. Хоча наявність бону впливає на поле швидкостей навколо бону, але гідростатична модель гідродинаміки не може описати цей ефект. Для імітації викривлення потоку боном поля швидкостей при перетині бону параметризуються з використанням функції току у вигляді гаусіана.

Для моделювання вертикального зміщення диспергованих крапель нафти течіями, що спотворені нафтовим боном ми додамо до полю потоку додаткову вертикальну складову швидкості:

$$w = w - \frac{\partial \psi(x, z)}{\partial x},$$

де x – нормальний до сегменту бону напрямок, ψ - функція току.

Функція току у формі гаусіана задається співвідношенням.

$$z - ae^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} = C,$$

 $a = H,$ при $C = 0$
 $a = 0,$ при $C = D$

обираючи лінійну залежність для а одержимо:

$$a = H - \frac{H}{D}C, \quad C \in [0, D].$$

Остаточно, вираз для функції току такий:

$$\psi(x,z) = \frac{z - He^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}}{1 - \frac{H}{D}e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}} = C.$$



Рисунок 5.8: Схема нафтового бону.(а) вигляд зверху; (b) вигляд у вертикальному перерізі.



Рисунок 5.9: Схема потоку навколо нафтового бону у вертикальному перерізі

Ця залежність має 2 параметри D, σ які мають залежати від юбки бона та параметрів потоку та може бути калібрована на доступних експериментальних даних. Для того, щоб обчислити вертикальну компоненту швидкості течії навколо бону ми використовуємо аналітичний вираз для похідної від функції току:

$$w_{boom} = \frac{\partial \psi(x, z)}{\partial x} = \frac{\frac{Hx}{\sigma^2} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \left(1 - \frac{z}{D}\right)}{\left(1 - \frac{H}{D} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}\right)^2}$$

Припускаємо, що $w_{boom} = 0$ при z > D або $z < He^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$.

5.6 Урахування використання дисперсантів

Основний ефект від використання дисперсантів є зміна спектру розмірів крапель нафти в сторону зменшення розміру крапель. Малий розмір крапель призводить до невеликої швидкості спливання і, отже, більше нафти залишається під водою. Потік нафтових крапель в шар води з поверхні, завдяки хвилям, що перекидаються, описується в моделі формулами (5.49-5.53).

Загальний потік нафтових крапель визначається зі співвідношення

$$Q^{(dis)} = \int_{d_{\min}}^{d_{\max}} Q_d^{(dis)} \delta d$$
(5.72)

де d_{\min} , d_{\max} – мінімальний та максимальний діаметри крапель, відповідно. Згідно лабораторних досліджень [112] $d_{\min} \approx 5 \mu m$. Для d_{\max} ми використовуємо вираз

$$d_{\rm max} = 0.363 (\sigma/\rho_w)^{3/5} \varepsilon^{-2/5}$$
(5.73)

де *ε*– швидкість дисипації турбулентної енергії. Так як швидкість дисипації турбулентної енергії є невідомим параметром, то в моделі *d*_{max} є вхідним параметром.

Використання дисперсантів призводить до зменшення поверхневого натягу і в'язкості. Якщо ми знаємо новий коефіцієнт поверхневого натягу, то ми можемо розрахувати зміну розміру крапель нафти:

$$d_{\max_d} = d_{\max} (\sigma_d / \sigma)^{3/5}$$

Припускаючи, що загальний об'єм нафтових крапель має лишитися незмінним після застосування дисперсантів, одержимо:

$$\int_{d_{\min}}^{d_{\max}} Q_d^{(dis)} \delta d = \int_{d_{\min}}^{d_{\max}_d} Q_d^{(dis)} \delta d$$

Консервативне припущення може бути не зовсім вірним, тому що залежність від в'язкості може збільшити загальний поті нафтових крапель. Ми можемо задовольнити консервативну умову змінюючи емпіричну константу C(o):

$$\int_{d_{\min}}^{d_{\max}} C(o) d^{0.7} \delta d = \int_{d_{\min}}^{d_{\max}_d} C_d(o) d^{0.7} \delta d$$

$$C_d(o) = C(o) \frac{d_{\max}^{1.7} - d_{\min}^{1.7}}{d_{\max_d}^{1.7} - d_{\min}^{1.7}} \approx C(o) \left(\frac{d_{\max}}{d_{\max_d}}\right)^{1.7} = C(o) \left(\frac{\sigma}{\sigma_d}\right)^{1.02} \approx C(o) \left(\frac{\sigma}{\sigma_d}\right)^{1.02}$$

В нашій моделі C(o) залежить від в'язкості нафти

$$C(o) = C_1 Ln(\nu) + C_2$$

Остаточно, для того, щоб включити ефект дисперсантів ми маємо відповідно змінити у вхідних параметрах значення d_{\max} та констант C_1, C_2 :

$$C_{1d}(o) = C_1(o) \left(\frac{\sigma}{\sigma_d}\right)$$
$$C_{2d}(o) = C_2(o) \left(\frac{\sigma}{\sigma_d}\right)$$

$$d_{\max_d} = d_{\max} \left(\sigma_d / \sigma\right)^{3/5}$$

Розрахунки поширення нафтової плями з використанням дисперсантів

Для ілюстрації ефекту використання дисперсантів було проведено 2 тести:

•Розповсюдження нафти в околі бону в полі хвиль та течій;

•Розповсюдження нафти в околі бону в полі хвиль та течій з використанням дисперсантів;

Всі розрахунки були виконані в прямокутному басейні довжиною 10км, шириною 2км і глибиною 50 м. Гідродинамічні поля були змодельовані з використанням 3D-моделі Selfe неструктурованою трикутною сіткою з роздільною здатністю 50 м і 20ма вертикальних шарами із згущенням поблизу поверхні і дна. Вертикальна роздільна здатність поблизу вільної поверхні і дна була 2см. Течії генерувались постійним притоком зі східної границі для підтримки постійного поля швидкостей 0.3м/с. На рис. 5.10 показана схема чисельного експерименту, положення розливу нафти і бону.



Рисунок 5.10: Схема чисельного експерименту

Бон складався з 6-ти лінійних сегментів із загальною довжиною 1500м. У всіх розрахунках горизонтальна турбулентна дифузія не враховувалася. Не враховувались також процеси вивітрювання. Для нафтового розливу використовувались тільки поверхневі поля швидкостей.

Основні параметри розливу:

- •Густина нафти 845кг/м³
- •Загальний об'єм нафти 21600м³
- •Швидкість витоку $2 M^3/s$
- •Час розливу Згод

Розрахунки проводились з використанням 216000 частинок, об'єм кожної частинки дорівнював 0.1м³.

Для моделювання залучення крапель нафти з поверхні в шар води було використане штучне поле вітрових хвиль. Хвильові параметри були обчислені при припущенні, що встановився рівноважний спектр Пірсона-Московіц:

$$H_s = 0.22 rac{U_{10}^2}{g} = 1.1$$
м



Рисунок 5.11: Загальна кількість частинок на поверхні води. Чорна лінія – без дисперсантів, червона – з використанням дисперсантів



Рисунок 5.12: Загальна кількість нафтових крапель. Чорна лінія – без дисперсантів, червона – з використанням дисперсантів

$$T = 7.3 \frac{U_{10}}{g} = 5.2 c$$

З обраними параметрами хвиль був обчислений потік нафтових крапель в шар води 2.16 · 10⁻³кг/м²с для випадку без дисперсантів. Загалом використовувалось 5 фракцій розмірів нафтових крапель: 0.17мм, 0.5мм, 0.89мм, 1.3мм, 1.7мм, зі швидкостями підйому: 1.17мм/с, 10мм/с, 33мм/с, 53мм/с, 62мм/с. Стоксів дрейф враховувався, поверхнева швидкість Стоксова дрейфу становила 2.7 · 10⁻²м/с. Коефіцієнт вертикальної турбулентної дифузії обчислювався гідродинамічної моделлю.



Рисунок 5.13: Загальна кількість нафтових частинок, що пройшли крізь бон. Чорна лінія – без дисперсантів, червона – з використанням дисперсантів

Для моделювання ефекту дисперсантів, ми припустили, що

$$\frac{\sigma}{\sigma_d} = 10$$

та відповідно перерахували вхідні параметри моделі.

Ефективність дисперсантів також залежить від в'язкості нафти. Сорти нафти з високою в'язкістю мають меншу ефективність дисперсантів. В чисельній моделі вплив в'язкості був включений у формулу для потоку нафтових крапель $C(o) = C_1 Ln(\nu) + C_2$. C_1 має від'ємне значення і це призводить до зменшення потоку нафти із збільшенням в'язкості.

На рис. 5.11-5.11 показаний ефект від використання дисперсантів на порівняння балансу маси. Чорна лінія відповідає розрахунку без дисперсантів, а червона – з використанням дисперсантів.

5.7 Застосування лагранжевої моделі переносу нафтопродуктів до моделювання аварійного розливу з танкера "Hebei Spirit"

Для розрахунків розповсюдження нафти внаслідок аварії на танкері "Hebei Spirit", модель була налаштована для Жовтого моря вздовж узбережжя Пів-



Рисунок 5.14: Карта глибин західної частини Жовтого моря вздовж корейського півострова та розташування місця аварії

денної Кореї (рис. 5.14).

Для цієї області доступна детальна інформація по розташуванню берегової лінії з характеристиками різних типів берегової лінії. Дані карти глибин використовувалися з роздільною здатністю 3 км, які був використаний в моделі циркуляції. Проте, така роздільна здатність не дозволяє опис полів течій навколо численних островів і скель. Для того, щоб врахувати вплив маленьких островів, що не описуються моделлю гідродинаміки було застосовано ймовірність потрапляння частинки нафти на острів, що дорівнює відношенню довжини берегової лінії острова до периметру розрахункової комірки, в якій він знаходиться.

Дані по циркуляції використовувались з результатів розрахунків гідродинамічної моделі ROMS, що проводились в інституті KIOST. Тривимірні поля швидкості течії, температури, солоності, турбулентної кінетичної енергії та масштабу турбулентності на 20-ти σ -рівнях використовувались з часовим кроком в три години. Також використовувались дані хвильових параметрів,



Рисунок 5.15: Порівняння положення нафтової плями через один день після початку розливу згідно спостережень [164] (зліва) та згідно розрахунків (справа).

що розраховані на 8-ми кілометровій сітці моделлю WaveWatch III. Хвильові параметри використовувались для розрахунків потоків нафтових крапель під дією хвиль, що перекидаються та для розрахунку стоксова дрейфу.

7 грудня 2007 року о сьомій годині ранку за місцевим часом танкер "Hebei Spirit", що перевозив 209 000 тон сирої нафти, був протаранений крановою баржею в той час як стояв на якорі в п'яти милях від берегів півострова Теан Республіки Корея. Близько 10 800 тон сирої нафти вилилося з танкера через три отвори. Нафта забруднила три з чотирьох провінцій західного берега корейського півострова. Близько 70ти кілометрів берегової лінії було сильно уражено, 101 острів зазнав забруднення.

Моделювання нафтового розливу проводилось протягом 40 днів починаючи з 7-го грудня 2007 року. Основні вхідні параметри надано в таблиці 5.3.

Результати розрахунків представлено на рис. 5.15-5.18. На рис. 5.15 показано порівняння розрахованого положення нафтової плями зі спостереженнями [164] за 8-ме грудня 11:04 місцевого часу. Порівняння показує що чисельна модель вірно прогнозує перенос нафти припливними течіями і уражену зону берегової лінії. Ефект впливу поверхневих хвиль показаний на рис. 5.16, на

ii			
Тривалість моделювання, дні	40		
Часовий крок моделі, с	20		
Кількість частинок в моделі	100 000		
Розташування розливу	126.06E, 36.84N		
Початок розливу	7.12.2007 7:00		
Тривалість витоку, год	37		
Загальний об'єм нафти, м ³	12500		
Питома густина нафти	0.87		
Тип нафти	Iranian heavy crude		
В'язкість води, м ² /с	$1.1 \cdot 10^{-6}$		
В'язкість нафти, cSt	42.8		
Відповідна температура в'язкості нафти, С	10		
Температура води, С	15		
Максимальна фракція води в нафті	0.65		
Константи випаровування, С ₁ , С ₂	2.27, 0.045		
Кількість класів розмірів крапель нафти	20		
Мінімальний діаметр нафтової краплі, м	$5.0 \cdot 10^{-6}$		
Максимальний діаметр нафтової краплі, м	$1.0 \cdot 10^{-3}$		

Табл. 5.3: Параметри моделі переносу нафтопродуктів

якому показано розраховану товщину нафтової плівки з урахуванням впливу хвиль та без. В розрахунках, в яких враховуються хвилі нафтова пляма ближче притискається до берега через додатковий перенос за рахунок стоксова дрейфу. На рис. 5.17 показано порівняння забруднення берегової лінії згідно спостережень і розрахунків через 1 місяць після розливу. Порівняння показало, що модель вірно описує зони максимального ураження берегової лінії та островів. Згідно розрахованого масового балансу на рис. 5.18 можна зробити висновок що переважна більшість нафти (близько 70 %) налипає на берег чи острови протягом перших 7-10 днів після початку розливу. Дисперсією нафтових крапель внаслідок перекидання хвиль в даному випадку можна



Рисунок 5.16: Порівняння положення нафтової плями через один день після початку розливу урахуванням впливу хвиль (справа) та без урахування (зліва).



Рисунок 5.17: Порівняння спостережуваного [164] забруднення берегової лінії (зліва) з розрахунками (справа)

нехтувати, кількість маси, що розповсюджується у вигляді нафтових крапель у шарі води складає менше 1% від загальної кількості розлитої нафти.

5.8 Висновки до розділу

В даному розділі описана нова чисельна тривимірна лагранжева модель переносу нафтопродуктів, що складається з моделі поверхневої плівки нафти та моделі дисперсії нафтових крапель в шарі води. Було розглянуто ефект



Рисунок 5.18: Баланс маси нафтового розливу з часом

сили Коріоліса на поширення нафтової плями у гравітаційно-в'язкому режимі. Тертя на межі нафта-вода було параметризоване в рамках теорії пограничного шару, враховуючи пограничний шар Екмана. Модель також враховує силу Коріоліса в рівнянні динаміки. Було отримано нові автомодельні розв'язки рівнянь моделі для одновимірного та осесимметричного розтікання в гравітаційно-в'язкому, гравітаційно-турбулентному і гравітаційно-в'язкообертальному режимах для миттєвого і неперервного розливу. Слідуючи [122] показники ступеня в законах подібності можуть бути отримані з використанням масштабування. Проте, щоб визначити значення констант в законі розтікання необхідний повний розв'язок задачі. Отримані значення коефіцієнта добре узгоджуються як з експериментами так і з теоретичними дослідженнями гравітаційно-в'язкого режиму для миттєвого розливу.

Було показано, що член з силою Коріоліса в рівнянні динаміки може не враховуватись, якщо товщина плівки значно менша за товщину ламінарного шару Екмана. Однак важливо, що екманівське тертя має бути враховане при будь-якій товщині плями при великих масштабах часу. Екманівське тертя призводить до істотного уповільнення розтікання порівняно з необертальним рухом і призводить до відхилення швидкості розтікання нафти на 45° від напрямку швидкості в разі відсутності обертання. Чисельне моделювання розширює ці результати для випадку неперервного розливу в полі течій. У всіх розрахунках через два дні площа плями в разі врахування ефекту Коріоліса була приблизно в два рази менше за площу плями без обертання. Таким чином, обертання Землі може бути важливим також у процесах вивітрювання. Аналогічним чином, обертання впливає на пляму, що розтікається в режимі поверхневого натягу.

Представлений чисельний лагранжевий метод часток, що взаємодіють, що дозволяє в рамках моделі суцільного середовища розраховувати поле тиску в плямі. Наведений алгоритм взаємодії плям нафти з нафтовими бонами, та алгоритм, що дозволяє врахувати вплив дисперсантів через зміну коефіцієнта поверхневого натягу. Результати модельних розрахунків добре узгоджуються з аналітичними автомодельними розв'язками задачі для ідеалізованих випадків. За допомогою методу випадкових блукань модель описує рух поверхневої плями нафти та рух диспергованих нафтових крапель у воді під впливом течій та вітру. Модель описує дисперсію нафтових крапель з поверхневої плівки нафти під дією хвиль, що перекидаються. Проведене чисельне моделювання розповсюдження нафтового розливу внаслідок аварії на танкері "Hebei Spirit" у грудні 2007-го року. Порівняння зі спостереженнями показало, що модель адекватно прогнозує положення нафтової плями та зони максимального ураження берегової лінії. Зроблено висновок, що для даного випадку процес дисперсії нафти під дією хвиль що перекидаються несуттєвий, хоча ефект поверхневих хвиль необхідно враховувати при розрахунках стоксового дрейфу поверхневої плівки.

Розділ 6

ЛАГРАНЖЕВА МОДЕЛЬ РОЗПОВСЮДЖЕННЯ РАДІОАКТИВНИХ ЗАБРУДНЕНЬ

6.1 Вступ

В останні десятиліття було розроблено ряд чисельних моделей, що моделюють циркуляцію, дисперсію наносів і радіонуклідів дисперсії в три етапи: розчинені у воді, завислі намули і донні відкладення. У таблиці 6.1 представлені важливі характеристики моделей переносу радіонуклідів. В таблиці представлений список із 9-ти моделей та їх основні властивості: дво- чи тривимірність, одношарове чи багатошарове представлення дна, однофракційні чи багатофракційні намули, одно- чи двоступенева кінетична реакція адсорбціїдесорбції, чи включений розгляд порової води в моді, чи включена залежність коефіцієнту розподілу від розміру частинки намулів.

Посилання	Розмірність	Шар дон- них наму- лів	Фракції намулів	Модель обміну	Порова вода	Залежність сорбції від розміру частинки
Onishi, Trent	3D	Single	Single	1 step	-	-
(1989) Periáñez et. al. (1986)	2D	Single	Single	1 step	-	+
Margelashvily	3D	Single	Single	1 step	-	-
et al. (1997) Margelashvily et al. (2000)	3D	Single	Single	2 step	+	+
Aldridge et	2D	Single	Multiple	1step	-	-
al. (2003) Periáñez et al. (2004)	2D	Single	Multiple	2 step	-	+
Periáñez et al.	3D	Single	Multiple	1 step	-	+
(2004)						
Kobayashi	3D	Single	Single	1 step	-	-
et/ al. (2007) Представлена модель	3D	Multiple	Multiple	2 step	+	+

Табл. 6.1: Моделі переносу радіонуклідів з намулами

6.2 Рівняння моделі переносу радіонуклідів у воді та міграції у донних багатофракційних намулах

Модель переносу радіонуклідів описує основні обмінні процеси в системі вода-багатофракційні намули (рис. 6.2). У товщі води радіонукліди в розчиненій формі та адсорбовані на твердих частинках переносяться течіями (адвекційні процеси) з одночасним впливом турбулентних процесів дифузії.

	k_1	перша	a _{fs}	друга
вода	k_2	ступінь		ступінь

Рисунок 6.1: Схема двоступеневої реакції

Радіонукліди в розчиненої фазі взаємодіють з фазою радіонуклідів на завислих намулах та донних відкладеннях. Передача активності між розчиненими і адсорбованими радіонуклідами описується процесами адсорбції-десорбції. Осідання забруднених завислих наносів і розмив дна є важливими шляхами обміну радіонуклідів між дном і завислими намулами. Передача активності між водою та поровою водою у верхньому шарі донних відкладень регулюється дифузійними процесами.

Розглядається двоступенева послідовна кінетична реакція адсорбції радіонуклідів намулами. Первинна адсорбція радіонукліду частинкою намулу відбувається через поверхню частинки, цей процес описується кінетичним коефіцієнтом $k_1(c^{-1})$, який є пропорційним площі поверхні частинки. Швидкість десорбції є постійної і описується коефіцієнтом $k_2(c^{-1})$. Схему двоступеневої реакції показано на рис. 6.1. Після поверхневої адсорбції починається друга "повільна" фаза реакції, повільна дифузія іонів всередину частинки ([250]). Швидкість адсорбції та десорбції для другої ступені кінетичної реакції контролюється емпіричними параметрами a_{fs}, a_{sf} (рис. 6.1).

Рівняння для просторово-часової зміни концентрації розчинної фази радіонуклідів у воді $C_d^w(\mathbf{Бк} \ \mathbf{M}^{-3})$ та для концентрації "швидкої" реверсивної та "повільної" фази $C_{p,i}^w$ та $\tilde{C}_{p,i}^w$, відповідно, (Бк \mathbf{M}^{-3}) в адсорбованій фазі для кожного класу розмірів намулів *i* у воді запишемо в декартових координатах



Рисунок 6.2: Схема розповсюдження радіонуклідів у водному середовищі

$$(x, y, z):$$

$$\frac{\partial C_d^w}{\partial t} + \vec{U}\nabla C_d^w = -a_{ds} \left(C_d^w \sum_{i=1}^n S_{p,i} K_{d,i} - C_p^w \right) - \lambda C_d^w + DIFF(C_d^w), \quad (6.1)$$

$$\frac{\partial C_{p,i}^w}{\partial t} + +\vec{U}\nabla C_{p,i}^w = W_{p,i} \frac{\partial C_{p,i}^w}{\partial z} + a_{ds} \left(C_d^w S_{p,i} K_{d,i} - C_{p,i}^w \right) - a_{fs} C_{p,i}^w + a_{sf} \tilde{C}_{p,i}^w - \lambda C_{p,i}^w + DIFF(C_{p,i}^w)$$

$$(6.2)$$

$$\frac{\partial \tilde{C}_{p,i}^{w}}{\partial t} + \vec{U}\nabla \tilde{C}_{p,i}^{w} = W_{p,i}\frac{\partial \tilde{C}_{p,i}^{w}}{\partial z} + a_{fs}C_{p,i}^{w} - a_{sf}\tilde{C}_{p,i}^{w} - \lambda\tilde{C}_{p,i}^{w} + DIFF\left(\tilde{C}_{p,i}^{w}\right), \quad (6.3)$$

де \vec{U} – швидкість течії, λ – параметр розпаду радіонукліду, $S_{p,i}$ – концентрація завислих намулів кг/м³, DIFF() описує молекулярну та турбулентну дифузію. a_{fs} та a_{sf} (с⁻¹) це пряма та обернена швидкості обміну між швидкою та повільною реверсивними фракціями. Зауважимо, що для отримання одноступеневої кінетичної реакції в моделі достатньо покласти a_{fs} та a_{sf} рівними нулеві. Перехід радіонуклідів з розчиненого стану в адсорбований на намулах записаний у вигляді швидкості десорбції a_{ds} (c^{-1}) та коефіцієн-

ту розподілу для одно-ступеневої реакції $K_{d,i}$ (м³кг⁻¹), де

$$K_{d,i} = \frac{k_{1i}}{k_2 S_{p,i}}, \qquad a_{ds} = k_2.$$
 (6.4)

Зауважимо, що коефіцієнт розподілу зазвичай визначається як відношення концентрацій адсорбованого радіонукліду до концентрації розчиненого в стані рівноваги, тобто:

$$K_{d,i} = \lim_{t \to \infty} \frac{C_{p,i}}{S_{p,i}C_w},\tag{6.5}$$

де $C_{p,i}$ – загальна концентрація адсорбованого радіонукліду. В нашій моделі ми розуміємо коефіцієнт розподілу $K_{d,i}$ як відношення тільки концентрації швидкої реверсивної фази в рівнянні (6.5). При розгляді лише одно-ступеневої реакції $K_{d,i}$ має звичайний класичний зміст 6.5. Загальна концентрація швидкої реверсивної фракції радіонуклідів в адсорбованому вигляді C_p^w у товщі води має вигляд:

$$C_p^w = \sum_{i=1}^n C_{p,i}^w, (6.6)$$

Неперервний вертикальний розподіл намулів та радіоактивності в донних відкладеннях апроксимується в моделі як послідовність добре перемішаних mшарів, починаючи з верхнього шару (j=1) у відповідності з моделлю переносу намулів. Міграція радіоактивності через ці шари відбувається за рахунок дифузії порової води та біотурбації. Рівняння для усередненої за верхнім шаром концентрації в поровій воді $C_{d,1}^b$ (Бк м⁻³) та для концентрації в швидкій та повільній реверсивній фракції радіонуклідів $C_{s,i,1}^b$ та $\tilde{C}_{s,i,1}^b$, відповідно, (Бк кг⁻¹) в адсорбованому стані фазі для кожного класу намулів *і* записані у вигляді:

$$\frac{\partial Z_{1}\varepsilon_{1}C_{d,1}^{b}}{\partial t} = \varepsilon_{1}W_{pw}^{(0,1)}\left(C_{d}^{w}(-H) - C_{d,1}^{b}\right) - W_{pw}^{(1,2)}\left(\varepsilon_{1}C_{d,1}^{b} - \varepsilon_{2}C_{d,2}^{b}\right) -a_{ds}\theta Z_{1}(1-\varepsilon_{1})\left(C_{d,1}^{b}\sum_{i=0}^{n}\rho_{s,i}\phi_{i,1}K_{d,i} - C_{s,1}^{b}\right) - \lambda\varepsilon_{1}Z_{1}C_{d,1}^{b},$$

$$(6.7)$$

$$\frac{\partial Z_{1}\phi_{i,1}C_{s,i,1}^{b}}{\partial t} = -W_{bt}^{(1,2)}\left(\phi_{i,1}C_{s,i,1}^{b} - \phi_{i,2}C_{s,i,2}^{b}\right) + a_{ds}\theta\phi_{i,1}Z_{1}\left(K_{d,i}C_{d,1}^{b} - C_{s,i,1}^{b}\right) \\
+ \frac{\phi_{i,1}}{\rho_{s,i}}F_{wb} - a_{fs}\phi_{i,1}Z_{1}C_{s,i,1}^{b} + a_{sf}\phi_{i,1}Z_{1}\tilde{C}_{s,i,1}^{b} \\
+ \frac{\phi_{i,1}D_{i}C_{s,i}^{w}}{S_{i}\rho_{s,i}(1 - \varepsilon_{1})} - \frac{E_{i}C_{s,i,1}^{b}}{\rho_{s,i}(1 - \varepsilon_{1})} - \lambda\phi_{i,1}Z_{1}C_{s,i,1}^{b},$$
(6.8)

$$\frac{\partial Z_1 \phi_{i,1} C_{s,i,1}^b}{\partial t} = -W_{bt}^{(1,2)} \left(\phi_{i,1} \tilde{C}_{s,i,1}^b - \phi_{i,2} \tilde{C}_{s,i,2}^b \right) + a_{fs} \phi_{i,1} Z_1 C_{s,i,1}^b - a_{sf} \phi_{i,1} Z_1 \tilde{C}_{s,i,1}^b
+ \frac{\phi_{i,1} D_i \tilde{C}_{s,i}^w}{S_i \rho_{s,i} (1 - \varepsilon_1)} - \frac{E_i \tilde{C}_{s,i,1}^b}{\rho_s (1 - \varepsilon_1)} - \lambda \phi_{i,1} Z_1 \tilde{C}_{s,i,1}^b,$$
(6.9)

Тут F_{wb} , $[{\rm B}\kappa/{\rm m}^2/c]$ – потік адсорбції через прямий контакт води у придонному шарі та піщинок намулів.

Рівняння для усереднених по шару концентрацій в поровій воді та концентрацій швидкої та повільної фракції радіонуклідів $C^b_{d,j}, C^b_{s,i,j}, \tilde{C}^b_{s,i,j}$, відповідно, для решти донних шарів $(1 < j \le m)$:

$$\frac{\partial Z_{j}\varepsilon_{j}C_{d,j}^{b}}{\partial t} = W_{pw}^{(j-1,j)} \left(\varepsilon_{j-1}C_{d,j-1}^{b} - \varepsilon_{j}C_{d,j}^{b}\right) - W_{pw}^{(j,j+1)} \left(\varepsilon_{j}C_{d,j}^{b} - \varepsilon_{j+1}C_{d,j+1}^{b}\right) - a_{ds}\theta Z_{j}(1-\varepsilon_{j}) \left(C_{d,j}^{b}\sum_{i=0}^{n}\rho_{s,i}\phi_{i,j}K_{d,i} - C_{s,j}^{b}\right) - \lambda\varepsilon_{j}Z_{j}C_{d,j}^{b},$$

$$(6.10)$$

$$\frac{\partial Z_{j}\phi_{i}C_{s,i,j}^{b}}{\partial t} = W_{bt}^{(j-1,j)} \left(\phi_{i,j-1}C_{s,i,j-1}^{b} - \phi_{i,j}C_{s,i,j}^{b}\right) - W_{bt}^{(j,j+1)} \left(\phi_{i,j}C_{s,i,j}^{b} - \phi_{i,j+1}C_{s,i,j+1}^{b}\right) + a_{ds}\theta\phi_{i,j}Z_{j} \left(K_{d,i,j}^{b}C_{d,j}^{b} - C_{s,i,j}^{b}\right) - a_{fs}\phi_{i,j}Z_{j}C_{s,i,j}^{b} + a_{sf}\phi_{i,j}Z_{j}\tilde{C}_{s,i,j}^{b} - \lambda\phi_{i,j}Z_{j}C_{s,i,j}^{b},$$
(6.11)

$$\frac{\partial Z_{j}\phi_{j}C_{s,i,1}^{b}}{\partial t} = W_{bt}^{(j-1,j)} \left(\phi_{j-1}\tilde{C}_{s,i,j-1}^{b} - \phi_{j}\tilde{C}_{s,i,j}^{b}\right) - W_{bt}^{(j,j+1)} \left(\phi_{j}\tilde{C}_{s,i,j}^{b} - \phi_{j+1}\tilde{C}_{s,i,j+1}^{b}\right) \\
+ a_{fs}\phi_{i,j}Z_{j}C_{s,i,1}^{b} - a_{sf}\phi_{i,j}Z_{j}\tilde{C}_{s,i,1}^{b} - \lambda\phi_{i,j}Z_{j}\tilde{C}_{s,i,1}^{b}, \tag{6.12}$$

де *θ*- корекційний множник для десорбції, що враховує те, що в донних шарах частина піщинок може бути недоступна для інших частинок намулів завдяки щільному розташуванню частинок ([250]). Відмітимо, що обмін між шарами для порової води включає біотурбацію, тому що біотурбація підсилює дифузію у поровій воді за рахунок переміщення частинок намулів. Загальна концентрація швидкої реверсивної фракції C_s^b в донних намулах:

$$C_{s,j}^{b} = \sum_{i=1}^{n} \rho_{s,i} \phi_{i,j} C_{s,i,j}^{b}.$$
(6.13)

Залежність $K_{d,i}$ від діаметру частинки намулу d_i записана за [248] як

$$K_{d,i} = \frac{\chi}{a_{ds}\rho_{s,i}} \frac{6}{d_i},\tag{6.14}$$

де χ – швидкість обміну (м с⁻¹). Значення швидкості десорбції згідно [250] приблизно стале для різних типів радіонуклідів: $a_{ds} = 1.16 \cdot 10^{-5}$ s⁻¹, в той час як χ залежить від типу радіонукліду ([250]) та солоності *S*:

$$\chi = \chi_0 \frac{S_0}{S_0 + S} \tag{6.15}$$

де χ_0 це швидкість обміну в прісній воді, $S_0 = 45$ ([175]).

На вільній поверхні $z = \eta$ граничні умови:

$$\nu_T \frac{\partial C_d^w}{\partial z} - W C_d^w = -q_d, \qquad (6.16)$$

$$\nu_T \frac{\partial C_{p,i}^w}{\partial z} - (W - W_{p,i}) C_{p,i}^w = -q_{p,i}, \qquad (6.17)$$

де η – рівень вільної поверхні, q_d та $q_{p,i}$ – потоки випадіння з атмосфери (Бк м⁻¹ с⁻¹) розчинених та адсорбованих радіонуклідів, відповідно. Потоки в дно на рівні $z = -H + z_0$:

$$\nu_T \frac{\partial C_d^w}{\partial z} - W C_d^w = \varepsilon_1 W_{pw}^{(0,1)} \left(C_d^w - C_{d,1}^b \right), \qquad (6.18)$$

$$\nu_T \frac{\partial C_{p,i}^w}{\partial z} - (W - W_{p,i})C_{p,i}^w = -\frac{C_{p,i}^w D_i}{S_i} + C_{s,i}^b E_i, \tag{6.19}$$

де z_0 висота шорсткості. Швидкість обміну $W_{pw}^{(0,1)}$ може бути оцінена за виразом [274], що скориговане для шорсткого дна ([82])

$$W_{pw}^{(0,1)} = 0.01778 u_* \text{Re}^{-0.2} \text{Sc}^{-0.604},$$
 (6.20)

де u_* швидкість тертя, $Re = u_* \delta_* \nu_M^{-1}$ – число Рейнольдса, δ_* – середня висота шорсткості елементів, $Sc = \nu_M / \nu_D$ – число Шмідта, ν_M – кінематична в'язкість, ν_D – коефіцієнт вільної дифузії в розчині.

Швидкість обміну $W_{pw}^{(j,j+1)}$ між шарами донних намулів при j>0 записується як

$$W_{pw}^{(j,j+1)} = \frac{2\nu'_{D,j}\nu'_{D,j+1}}{\nu'_{D,j}Z_{j+1} + \nu'_{D,j+1}Z_j},$$
(6.21)

де $\nu'_{D,j}$ – ефективний коефіцієнт дифузії. Цей коефіцієнт включає коефіцієнт єнт дифузії ν_D , що скоригований на звивистість ψ^2 в намулах та коефіцієнт біотурбації ν_B , бо біотурбація підсилює дифузію в поровій воді через перемішування частинок

$$\nu'_{D,j} = \frac{\nu_{D,j}}{\psi_j^2} + \nu_B, \tag{6.22}$$

Параметр звивистості пов'язаний з пористістю згідно [82] як $\psi_j^2 = 1 - 2 \ln \varepsilon_j$. Швидкість обміну W_{bt} для адсорбованих радіонуклідів дорівнює швидкості обміну донних намулів і обчислюється за формулою 3.76.

Для того, щоб визначити сорбційний потік F_{wb} розглянемо окремо процеси сорбції та десорбції на межі між водою та донними намулами. Сорбційний потік із води до твердих частинок відбувається пропорційно площі поверхні піщинок [175], тобто $f = \chi S_p C_d$, [Бк/с], де S_p – площа поверхні частинки, м². Якщо нам потрібен потік на одиниці площі дна, то S_p – це площа контакту піщинок, що знаходяться у верхньому шарі намулів. Розділивши, на площу дна, що вкрите піщинками, отримаємо потік на одиницю площі: $F_s \approx (1 - \varepsilon)\chi C_d$, [Вq/m⁻²⁻¹], тут ми знехтували кривизною піщинок намулів. Щоб оцінити потік десорбції, розглянемо тонкий шар донних намулів товщиною $h_* \approx d_{50}$. Припускаючи, що всі частинки в цьому шарі беруть участь в обміні з водою за рахунок десорбції, отримаємо потік десорбції: $F_d = a_{ds}\rho h_*(1 - \varepsilon)C_{s,1}^b$. Остаточно, комбінуючи обидва потоки отримаємо обмінний потік між придонним шаром води та верхнім шаром донних намулів:

$$F_{wb} = (1 - \varepsilon)\chi C_d - a_{ds}\rho h_*(1 - \varepsilon)C_{s,1}^b$$

6.3 Моделювання лабораторного експерименту по міграції ¹³⁴Cs в донних намулах

Для перевірки роботи моделі був вибраний лабораторний експеримент [278], в якому проводився дослід по розповсюдженню радіонуклідів в донних намулах тільки за рахунок молекулярної дифузії. Такий лабораторний експеримент дозволяє дослідити окремо процеси обміну з дном, розповсюдження радіоактивності в шарі намулів та очищення забрудненої води. Такі досліди є корисними для розуміння та оцінки процесів, що відбуваються у водоймах зі стоячою водою (озерах, ставках) після радіоактивного випадіння з атмосфери.

Для проведення лабораторного експерименту [278] було зібрано 14 однакових зразків намулів з озера Іствейт, Великобританія, та поміщені в пластикові трубки, діаметром 6.9см. На рис. 6.3 показана схема лабораторного досліду. Кожна трубка була сконструйована з набору відокремлюваних концентричних кілець, кільця були ущільнені водонепроникною стрічкою та додатково вкриті воском. Глибина води понад намулами була 2см, в цей об'єм води було впорскнуто 1000Bq ¹³⁴ Cs. Дослідні трубки були закорковані та залишені в холодній кімнаті при температурі 4°С.

Через певні періоди часу (15хв, Згод. 24год, 3д, 10д, 61д, 1рік) дві трубки розпаковувались, та відокремлювались концентричні кільця, починаючи з верхнього. Концентричні кільця відповідали глибинам: 0-0.5, 0.5-1.0, 1.0-1.5, 1.5-2.0, 2-3, 3-4,4-5, 5-6, 6-8 та 8-10 см. Після цього проводились виміри концентрацій 134 Cs у поровій воді (Бк/м 3) та у намулах (ВБк/кг).



Для чисельного моделювання використовувались параметри, що наведені в Таблиці 6.2. Густина намулів, пористість та коефіцієнт K_d наведені в роботі [278].

Рисунок 6.3: Схема лабораторного експерименту [278]

на рис. 6.5 показано порівняння всіх значень вимірів концентрації радіонуклідів в досліді [278] з розрахунками. Середнє геометричне для відношення розрахунків до вимірів дорівнює 0.92 для повної концентрації на намулах і 0.81 для концентрації у поровій воді. Середньоквадратичне геометричне відхилення дорівнює 1.77 для концентрації на намулах та 2.8 для концентрації у поровій воді.

Окрім концентрації ¹³⁴ Cs у поровій воді, експериментально вимірювалась загальна концентрація у намулах та концентрація у повільній "незворотній" фазі намулів. Чисельна модель дозволяє відокремлювати "швидку" реверсивну та "повільну" нереверсивну фази забруднення намулів та дає змогу порівняти розрахунки з експериментальними даними. Експериментально було по-

Параметр	Значення
Вид радіонукліду	^{134}Cs
Параметр розпаду λ	$1.06 \cdot 10^{-8} s^{-1}$
Початкова концентрація у во-	$1.337\cdot 10^7 \mathrm{Kk/m}^3$
ді	
К-сть донних шарів	100
Товщина донних шарів	1мм
Пористість	0.93
Густина намулів	1420 кг/м 3
Коефіцієнт молекулярної ди-	$1.45 \cdot 10^{-9} \mathrm{m}^2/\mathrm{c}$
фузії	
Коефіцієнт біотурбації	$0 M^2/c$
K _d	$2 \mathrm{m}^3 / \mathrm{kg}$
a_{fs}, a_{sf}	$0.25 \cdot 10^{-7}, 0.25 \cdot 10^{-8} c^{-1}$

Табл. 6.2: Параметри для чисельного моделювання

казано, що в досліді [278] через 1 рік проведення експерименту близько 65% становило забруднення на швидкій обмінній фазі намулів, та лише 35% на повільній фазі. Щоб досягти таких результатів при чисельному моделюванні були обрані параметри a_{fs}, a_{sf} , що наведені в Таблиці 6.2. Так як не було жодної згадки про наявність живих організмів у намулах, при чисельному моделюванні було припущено, що протягом року в холодній воді без джерела кисню живі організми активності не проявляли. Тому коефіцієнт біотурбації був покладений рівним нулеві.

На рис. 6.4 наведено порівняння результатів моделювання через 10 днів, 2 місяці та 1 рік розрахунків з результатами досліду. Показані розраховані та виміряні профілі концентрації радіонуклідів у поровій воді, на швидкій фазі намулів та загальна концентрація у намулах. Порівняння показує, що модель достатньо точно описує розповсюдження радіонуклідів в шарі намулів. Хоча



Рисунок 6.4: Порівняння профілів концентрації радіонуклідів з лабораторним дослідом [278] в різні моменти проведення досліду. На верхній панелі – концентрація в намулах, на нижній – концентрація в поровій воді. Червоною лінією показана концентрація при розрахунках моделлю з одноступеневою кінетичною реакцією, чорною лінією показана концентрація при розрахунках моделлю з двоступеневою кінетичною реакцією

не був відтворений локальний максимум концентрації, що спостерігався у досліді біля поверхні дна.

На рис. 6.6 показано результати дослідження чутливості моделі до кількості шарів ґрунту, що беруть участь у моделюванні. При загальній товщині шару 10см, було проведено 5 чисельних експериментів з загальною кількістю шарів 100, 50, 20, 10 та 1. На рис. 6.6а показаний профіль концентрації радіонукліду у поровій воді при різній роздільній здатності шару ґрунту. Результат моделювання одного шару не показаний, бо він складається з одного значення і профіль не утворюється. З рис. 6.6а видно, що остаточний профіль концентрації збігається для всіх варіантів. На рис. 6.6б наведено залежність



Рисунок 6.5: Порівняння всіх значень вимірів концентрації радіонуклідів в досліді [278] з розрахунками. По осі абсцис відкладено виміри, а по осі ординат – розрахунки. Зліва – для концентрації адсорбованого на намулах ¹³⁴ Cs. Справа – концентрація розчиненого у воді поровій ¹³⁴ Cs



Рисунок 6.6: Профілі концентрації радіонуклідів після одного року моделювання у порівнянні з лабораторним дослідом [278]. Зліва - концентрація у поровій воді. Справа загальна концентрація а намулах.

інтегрального забруднення всього донного шару з часом. Видно, що забруднення швидко (протягом перших кількох днів) досягає максимуму та потім поступово зменшується завдяки розпаду. При чому результати розрахунків при кількості донних шарів 100, 50, 20 та 10 майже збігаються. У варіанті з одним донним шаром видно, що забруднення відбувається значно повільніше, але остаточно всі криві збігаються в одну. Це пояснюється тим, що наша система замкнена, тому рано чи пізно вона прямує до однакового положення рівноваги. В цьому відмінність з експериментами в каналі, що розглянуті в розділі 6.7. В тому випадку система була відкритою, тому розбіжності в забруднені дна з часом збільшувались у випадку одношарового та багатошарового дна.

6.4 Перерозподіл концентрації радіоактивності між поровою водою та намулами в ізольованому шарі дна

Розглянемо обмінні процеси в одному ізольованому донному шарі $(j=1; W_{pw}^{(0,1)} = W_{pw}^{(1,2)} = E_i = D_i = 0)$ при $\lambda = 0$. Розв'язок рівнянь (6.7-6.9) з початковими умовами при $t = 0: C_{d,1}^b = C_d^b(0), C_{s,i,1}^b = C_{s,i,j}^b(0)$ та $\tilde{C}_{s,i,1}^b = \tilde{C}_{s,i,j}^b(0)$ мають вигляд:

$$C_{d,1}^{b}(t) = \frac{1}{\beta S_{b} + 1} \left[S_{b}(\beta C_{d,1}^{b}(0) - C_{s,1}^{b}(0)) e^{-a_{ds}\theta(\beta S_{b} + 1)t} + (C_{d,1}^{b}(0) + C_{s,1}^{b}(0)S_{b}) \right],$$
(6.23)

$$\phi_{i,1}C^{b}_{s,i,1}(t) = -\frac{\beta_{i}}{(\beta S_{b}+1)\beta} \left[(\beta C^{b}_{d,1}(0) - C^{b}_{s,1}(0))e^{-a_{ds}\theta(\beta S_{b}+1)t} - \beta(C^{b}_{d,1}(0) + C^{b}_{s,1}(0)S_{b}) \right] + \left[C^{b}_{s,i,1}(0)\phi_{i} - \frac{\beta_{i}}{\beta}C^{b}_{s,1}(0) \right] e^{-a_{ds}\theta t},$$
(6.24)

де $S_b = (1 - \varepsilon_1) \rho_s^1 \varepsilon_1^{-1}, \ C_{s,1}^b(0) = \sum_{i=1}^n \phi_i C_{s,i,1}^b(0)$ та

$$\beta_i = \phi_i K_{d,i}, \quad \beta = K_{d,1}^b. \tag{6.25}$$

Співвідношення між $C^b_{s,i}$ та C^b_s має вигляд

$$C^{b}_{s,i,1}\phi_{i,1} - \frac{\beta_{i}}{\beta}C^{b}_{s,1} = \left(C^{b}_{s,i,1}(0)\phi_{i} - \frac{\beta_{i}}{\beta}C^{b}_{s,1}(0)\right)e^{-a_{ds}\theta t}.$$
(6.26)

Як випливає з розв'язку (6.23-6.24), концентрація активності в поровій воді швидко прямує до рівноваги з загальною концентрацією на намулах:

$$K^b_{d,1}C^b_{d,1} = C^b_{s,1}. (6.27)$$

Характерний час переходу ~ $\varepsilon_1(a_{ds}\theta K_{d,1}^b \rho_s^1(1-\varepsilon_1))^{-1}$ залежить від фракційного складу намулів, густини та пористості. Це приблизно 250с для характерних значень $\rho_s^1 = 2.6 \cdot 10^3$ кг м⁻³, $\varepsilon_1 = 0.6$, $K_{d,1}^b = 2$ м³ кг⁻¹. В той же час, як слідує з (6.24) розподіл радіоактивності між різними фракціями намулів є набагато повільнішим. Характерний час для досягнення рівноважних концентрацій на багатофракційних намулах ~ $a_{ds}^{-1}\theta^{-1}$ має порядок 10⁶ с (десять днів).

6.5 Спрощення моделі для одношарового представлення дна

В багатьох моделях переносу радіонуклідів розподіл радіоактивності в донних намулах апроксимується одним шаром (напр. [202],[250], таблиця 6.1). Беручи до уваги той факт, що час переходу для концентрації в поровій воді значно менший за інші часові масштаби, можливо провести спрощення для рівнянь, що описують один донний шар. Припустимо, що обмін між поровою водою та водним шаром в (6.8) урівноважений перерозподілом активності в донних намулах. Тоді концентрація в поровій воді а у донному шарі намулів може бути виражена таким чином:

$$C_{d}^{b} = \frac{W_{pw}^{(0,1)}C_{d}^{w}(-H) + a_{ds}\theta Z_{1}\rho_{s,1}(1-\varepsilon_{1})C_{s,1}^{b}}{W_{pw}^{(0,1)} + a_{ds}\theta Z_{1}\rho_{s,1}(1-\varepsilon_{1})K_{d,1}^{b}}.$$
(6.28)

Використовуючи (6.28) рівняння (6.8) для *m*=1 може бути переписане у вигляді

$$\frac{\partial Z_1 C_{s,i,1}^b}{\partial t} = a_{bds} Z_1 \left(C_d^w (-H) K_{d,1}^b - C_{s,1}^b \right) + a_{rs} Z_1 \left(C_s^b \frac{K_{d,i}^b}{K_{d,1}^b} - C_{s,i,1}^b \right) + \frac{D_i C_{s,i}^w}{\rho_{s,i} (1 - \varepsilon_1)} - \frac{E_i C_{s,i,1}^b}{\rho_{s,i} (1 - \varepsilon_1)} - a_{fs} Z_1 C_{s,i,1}^b + a_{sf} Z_1 \tilde{C}_{s,i,1}^b - \lambda Z_1 C_{s,i,1}^b,$$
(6.29)

де a_{bds} – швидкість "десорбції" радіоактивності з шару намулів у шар води, а a_{rs} – швидкість "перерозподілу" між фракціями намулів:

$$a_{bds} = \frac{a_{ds}\theta W_{pw}^{(0,1)}}{W_{pw}^{(0,1)} + a_{ds}\theta Z_1 \rho_s^{(1)} (1 - \varepsilon_1) K_{d,1}^b}$$

$$a_{rs} = \frac{a_{ds}^2 \theta^2 Z_1^2 \rho_s^{(1)} (1 - \varepsilon_1) K_{d,1}^b}{W_{pw}^{(0,1)} + a_{ds}\theta Z_1 \rho_s^{(1)} (1 - \varepsilon_1) K_{d,1}^b}.$$
(6.30)

Характерне значення $W_{pw}^{(0,1)}$ має порядок $10^{-6} - 10^{-5}$ м s⁻¹ для $u_* = 0.001 - 0.01$ м s⁻¹ та Sc=1000. Другий член в знаменнику обох виразів рівняння (6.30) набагато більший за перший при характерних значеннях $\rho_s^1 \sim 10^3$ кг м⁻³, $\varepsilon_1 \sim 1$, $K_{d,1}^b \sim 1$ м³kg⁻¹, $Z_1 \sim 10^{-2}$ м. Відношення $W_{pw}^{(0,1)}/(a_{ds}\theta Z_1\rho_s^{(1)}(1-\varepsilon_1)K_{d,1}^b)$ має порядок $10^{-2} - 10^{-1}$. В цьому випадку параметри a_{bds} та a_{rs} можуть бути наближено представлені у вигляді:

$$a_{bds} = \frac{W_{pw}^{(0,1)}}{Z_1 \rho_s^{(1)} (1 - \varepsilon_1) K_{d,1}^b}$$

$$a_{rs} = a_{ds} \theta.$$
(6.31)

Важливо відмітити, що a_{bds} в (6.31) регулюється процесами дифузії з шаром води та сорбції в шарі намулів. В той же час, швидкість десорбції не впливає на обмін між шаром води та шаром намулів. Це твердження може бути несправедливо для дуже тонкого шару при сильній турбулентності у воді та для випадку маленького коефіцієнту розподілу. Процес десорбції в моделі з одним шаром намулів важливий для перерозподілу активності між різними фракціями намулів. На відміну від (6.31) відповідний параметр в ([202]; [250]) є емпіричним та не залежить від товщини шару. Розглянемо ідеалізований випадок забруднення шару намулів водою завдяки дифузії. Рівняння (6.29) та (6.9) при $E_i = D_i = \lambda = 0$ та постійному Z_1 переписуються у вигляді:

$$\frac{\partial C^b_{s,i,1}}{\partial t} = a_{bds} \left(K^b_{d,i,1} C^w_d(-H) - C^b_{s,i,1} \right) - a_{fs} C^b_{s,i,1} + a_{sf} \tilde{C}^b_{s,i,1}, \tag{6.32}$$

$$\frac{\partial \tilde{C}^b_{s,i,1}}{\partial t} = a_{fs} C^b_{s,i,1} - a_{sf} \tilde{C}^b_{s,i,1} \tag{6.33}$$

Концентрація радіоактивності у воді задається таким способом, щоб симулювати аварійний викид та подальше очищення забрудненого дна:

$$C_d^w(-H) = C_0 \qquad 0 \le t \le t_1, C_d^w(-H) = 0 \qquad t_1 \le t,$$
(6.34)

де C_0 та t_1 – константи. Початкові значення $C^b_{s,i,1} = \tilde{C}^b_{s,i,1} = 0$ при t=0. Розв'язком системи рівнянь (6.32–6.33) є

$$C_{s,1}^b(t) = A \exp(k_1 t) + B \exp(k_2 t) + C, \qquad (6.35)$$

$$C_{s,1}^{b}(t) = A \frac{k_1 + a_{bds} + a_{fs}}{a_{sf}} \exp(k_1 t) + B \frac{k_2 + a_{bds} + a_{fs}}{a_{sf}} \exp(k_2 t) + \frac{a_{fs}}{a_{sf}}C, \quad (6.36)$$

де

$$\begin{cases} A = C_{s,1}^{b}(t_{1}) - B; \\ B = \frac{(k_{1} + a_{bds} + a_{fs})C_{s,1}^{b}(t_{1}) - a_{sf}\tilde{C}_{s,1}^{b}(t_{1})}{k_{1} - k_{2}}; \quad C = 0 \end{cases} \quad t_{1} \leq t, \\ k_{1,2} = -\frac{1}{2}(a_{bds} + a_{fs} + a_{sf}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(a_{bds} + a_{fs} + a_{sf})^{2} - a_{bds}a_{sf}}. \end{cases}$$

Для цього окремого випадку:

$$C^{b}_{s,i,1}\phi_{i,1} = \frac{\beta_i}{\beta}C^{b}_{s,1}; \quad C^{b}_{s,i,1}\phi_{i,1} = \frac{\beta_i}{\beta}C^{b}_{s,1};.$$
(6.38)

На рис. 6.7 показано залежність концентрації від фракційного складу та товщини верхнього шару. Розглядалося три фракції з розмірами R = 50;100та 200 μ . Відповідні параметри фракційного складу ϕ подані в Таблиці 6.3 разом з розрахованими значеннями $K_{d,1}^b$ та a_{bds} . Решта параметрів такі: $ho_{s,1} = 1600$ кг м $^{-3}, \ \varepsilon_1 = 0.6, \theta \ = 0.1.$ Забруднення $^{137}\,{
m Cs}$ моделювалося зі значенням параметра $\chi=3.8\cdot10^{-6}$ см $^{-1}$. Концентрація 137 Cs у воді була задана як $C_0 = 20,000$ Бк м⁻³ в початковий період $t_1 = 30$ днів. В розрахунках 1-3 склад намулів змінювався для того, щоб оцінити вплив сорбції-десорбції. Результати моделювання показали, що початковий зріст концентрації ¹³⁷Cs не залежить від складу намулів завдяки тому, що при малих $a_{bds}t$ залежність від $K_{d,1}^b$ зникає. Однак, очищення намулів залежить від фракційного складу намулів через значення $K^b_{d,1}$. Активність зменшується повільніше коли є більшою фракція мілких намулів. Вибір товщини донного шару і порівняння в сценаріях 1,4-5 сильно впливає як на максимальну концентрацію, так і на швидкість очищення. Потрібно зазначити, що використання одно-шарової апроксимації не є коректним для моделювання на великих проміжках часу.

На рис. 6.8 показано залежність концентрації від фракційного складу для двоступеневої моделі. Значення фракційного складу подано в Таблиці 6.3 разом з розрахованими значеннями $K_{d,1}^b$, a_{bds} , k_1 та k_2 (Сценарії 1-3). Решта параметрів такі самі, як було використано в попередніх розрахунках. В розрахунках 1-3 склад намулів змінювався для того, щоб оцінити вплив сорбції-десорбції для обміну між швидкою та повільною фракцією радіонуклідів. Графік показує концентрацію ¹³⁷ Cs для одно-ступеневої моделі та для дво-ступеневої (перша ступінь, друга ступінь та загальна концентрація). Ре-

Сценарії	1	2	3	4	5
ϕ_1	0.333	0.667	0	0.333	0.333
ϕ_2	0.333	0.333	0.667	0.333	0.333
ϕ_3	0.333	0	0.333	0.333	0.333
Z_1 м	0.05	0.05	0.05	0.025	0.10
$K^b_{d,1}$ м 3 кг $^{-1}$	4.05	5.79	2.32	4.05	4.05
$a_{bds} c^{-1}$	$5.06 \cdot 10^{-8}$	$3.59 \cdot 10^{-9}$	$8.58 \cdot 10^{-8}$	$9.7 \cdot 10^{-8}$	$2.6 \cdot 10^{-8}$
$k_1 c^{-1}$	$3.21 \cdot 10^{-9}$	$2.50 \cdot 10^{-9}$	$4.48 \cdot 10^{-9}$	$4.8 \cdot 10^{-9}$	$1.93 \cdot 10^{-9}$
$k_2 \ c^{-1}$	$1.57 \cdot 10^{-7}$	$1.43 \cdot 10^{-7}$	$1.91 \cdot 10^{-7}$	$2.02 \cdot 10^{-7}$	$1.33 \cdot 10^{-7}$

Табл. 6.3: Параметри сценаріїв

зультати моделювання показали, що початкове зростання концентрації ¹³⁷ Сs майже однакове для одно-ступеневої моделі та дво-ступеневої моделі. Концентрація другої ступіні повільно зростає. Однак зменшення концентрації ¹³⁷ Сs в донних намулах завдяки очищенню водою відбувається в різний спосіб для різних реакцій. Хоча для одно-ступеневої моделі концентрація затухає експоненційно з показником експоненти a_{bds} , процес затухання контролюється двома показниками для повільної та швидкої реакції. Для всіх випадків 1-3 повільна фракція була домінуючою, що призводило до дуже повільного затухання у порівнянні з одно-ступеневою моделлю.

6.6 Спрощення для багатошарової моделі міграції забруднення в намулах

Одношарове представлення забруднення донних намулів використовується в більшості моделей (таблиця 6.1). Однак, як показано в попередньому розділі, результати залежать від товщини шару та узгоджуються з багатошаро-



Рисунок 6.7: Зміна в часі концентрації ¹³⁷*Cs* згідно (6.19) для різних сценаріїв для одношарової моделі



Рисунок 6.8: Зміна в часі концентрації ¹³⁷Cs для одноступеневої та дво-ступеневої кінетичної реакції згідно (6.30-6.32) для сценарію 1 в одношаровій моделі

вою моделлю. В свою чергу, багатошарова модель (6.7)-(6.7) потребує малих часових кроків для того, щоб явно описати швидкий процес перерозподілу радіоактивності між намулами та поровою водою. Тому необхідно шукати спрощення для багатошарової моделі для застосування на великих часових масштабах шляхом фільтрації швидких процесів. Припустимо, на основі попереднього аналізу, обмін між поровою водою у верхньому шарі намулів (j=1) та водою у придонному шара врівноважується перерозподілом радіоактивності між намулами та обміном з нижнім шаром. Тоді концентрацію в поровій воді у верхньому донному шарі можна обчислити таким чином:

$$C_{d,1}^{b} = \frac{\varepsilon_{1} W_{pw}^{(0,1)} C_{d}^{w}(-H) + \varepsilon_{2} (W_{pw}^{(1,2)} + W_{bt}^{(1,2)}) C_{d,2}^{b} + a_{ds} \theta Z_{1}(1-\varepsilon_{1}) C_{s,1}^{b}}{\varepsilon_{1} (W_{pw}^{(0,1)} + W_{pw}^{(1,2)} + W_{bt}^{(1,2)}) + a_{ds} \theta Z_{1}(1-\varepsilon_{1}) \hat{K}_{d,1}^{b}}$$
(6.39)

Використовуючи (6.39) рівняння (6.8) для m=1 може бути переписане у вигляді

$$\frac{\partial Z_1 \phi_{i,1} C_{s,i,1}^b}{\partial t} = -W_{bt}^{(1,2)} \left(\phi_{i,1} C_{s,i,1}^b - \phi_{i,2} C_{s,i,2}^b \right) + a_{bds} Z_1 \cdot \left(C_d^w (-H) K_{d,i}^b - C_{s,i,1}^b \right) + a_{rs} Z_1 \left(C_s^b \frac{K_{d,i}^b}{\hat{K}_{d,1}^b} - C_{s,i,1}^b \right) - a_{11} C_{s,i,1}^b + a_{12} C_{d,2}^b + \frac{\phi_{i,1} D_i C_{s,i}^w}{\rho_{s,i} (1 - \varepsilon_1)} - \frac{E_i C_{s,i,1}^b}{\rho_{s,i} (1 - \varepsilon_1)} - a_{fs} \phi_{i,1} Z_1 C_{s,i,1}^b + a_{sf} \phi_{i,1} Z_1 \tilde{C}_{s,i,1}^b - \lambda \phi_{i,1} Z_1 C_{s,i,1}^b (6.40)$$

де

$$\begin{split} a_{bds} &= \frac{a_{ds}\theta\phi_{i,1}\varepsilon_1W_{pw}^{(0,1)}}{\varepsilon_1(W_{pw}^{(0,1)} + W_{pw}^{(1,2)} + W_{bt}^{(1,2)}) + a_{ds}\theta Z_1(1-\varepsilon_1)\hat{K}_{d,1}^b} \\ a_{rs} &= \frac{a_{ds}^2\theta^2\phi_{i,1}Z_1(1-\varepsilon_1)\hat{K}_{d,1}^b}{\varepsilon_1(W_{pw}^{(0,1)} + W_{pw}^{(1,2)} + W_{bt}^{(1,2)}) + a_{ds}\theta Z_1(1-\varepsilon_1)\hat{K}_{d,1}^b} \\ a_{11} &= \frac{a_{ds}\theta Z_1\varepsilon_1\phi_{i,1}(W_{pw}^{(1,2)} + W_{bt}^{(1,2)})}{\varepsilon_1(W_{pw}^{(0,1)} + W_{pw}^{(1,2)} + W_{bt}^{(1,2)}) + a_{ds}\theta Z_1(1-\varepsilon_1)\hat{K}_{d,1}^b} \\ a_{12} &= \frac{a_{ds}\theta\phi_{i,1}Z_1\varepsilon_2(W_{pw}^{(1,2)} + W_{bt}^{(1,2)})K_{d,i}^b}{\varepsilon_1(W_{pw}^{(0,1)} + W_{pw}^{(1,2)} + W_{bt}^{(1,2)}) + a_{ds}\theta Z_1(1-\varepsilon_1)\hat{K}_{d,1}^b} \end{split}$$

Припустимо, згідно розрахунків у попередньому розділі, що всюди, крім верхнього шару (j=1) концентрація у поровій воді знаходиться в рівновазі з намулами

$$\hat{K}_{d,j}C^b_{d,j} = C^b_{s,j} \tag{6.41}$$

де

$$\hat{K}_{d} = \sum_{i=0}^{n} \rho_{s,i} \phi_{i,1} K_{d,i}$$
(6.42)
Тоді рівняння (6.10)-6.11) можуть бути об'єднані в одне рівняння для

$$C_{e,j}^b = \varepsilon_j C_{d,j}^b + (1 - \varepsilon_j) C_{s,j}^b, \qquad (6.43)$$

де $C^b_{e,j}$ це "обмінна" фракція радіоактивності, що пов'язана з $C^b_{d,j}$ та $C^b_{s,j}$ в такий спосіб:

$$C_{d,j}^b = \frac{C_{e,j}}{\varepsilon_j + (1 - \varepsilon_j)\hat{K}_{d,j}}, \quad C_{s,j}^b = \frac{\hat{K}_{d,j}C_{e,j}}{\varepsilon_j + (1 - \varepsilon_j)\hat{K}_{d,j}}.$$
 (6.44)

Тоді рівняння для $C^b_{e,j}$ виглядає так

$$\begin{split} &\frac{\partial Z_j C_{e,j}^b}{\partial t} = \left(W_{pw}^{(j-1,j)} + W_{bt}^{(j-1,j)} \right) \left(\frac{\varepsilon_{j-1} C_{e,j-1}^b}{\varepsilon_{j-1} + (1 - \varepsilon_{j-1}) \hat{K}_{d,j-1}} - \frac{\varepsilon_j C_{e,j}^b}{\varepsilon_j + (1 - \varepsilon_j) \hat{K}_{d,j}} \right) + \\ &W_{bt}^{(j-1,j)} \left(1 - \varepsilon_j \right) \left(\frac{\hat{K}_{d,j-1} C_{e,j-1}^b}{\varepsilon_{j-1} + (1 - \varepsilon_{j-1}) \hat{K}_{d,j-1}} - \frac{\hat{K}_{d,j} C_{e,j}^b}{\varepsilon_j + (1 - \varepsilon_j) \hat{K}_{d,j}} \right) \right) \\ &+ \left(W_{pw}^{(j,j+1)} + W_{bt}^{(j,j+1)} \right) \left(\frac{\varepsilon_j C_{e,j}^b}{\varepsilon_j + (1 - \varepsilon_j) \hat{K}_{d,j}} - \frac{\varepsilon_{j+1} C_{e,j+1}^b}{\varepsilon_{j+1} + (1 - \varepsilon_{j+1}) \hat{K}_{d,j+1}} \right) + \\ &W_{bt}^{(j,j+1)} \left(1 - \varepsilon_j \right) \left(\frac{\hat{K}_{d,j} C_{e,j}^b}{\varepsilon_j + (1 - \varepsilon_j) \hat{K}_{d,j}} - \frac{\hat{K}_{d,j+1} C_{e,j+1}^b}{\varepsilon_{j+1} + (1 - \varepsilon_{j+1}) \hat{K}_{d,j+1}} \right) \\ &- \frac{a_{fs} Z_j \hat{K}_{d,j}}{\varepsilon_j + (1 - \varepsilon_j) \hat{K}_{d,j}} C_{e,j}^b + a_{sf} Z_j \sum_{i=1}^n \rho_{s,i} \phi_i \tilde{C}_{s,i,j}^b - \lambda Z_j C_{e,j}^b, \end{split}$$

$$\frac{\partial Z_{j}\phi_{i}C_{s,i,j}^{b}}{\partial t} = W_{bt}^{(j-1,j)}\left(\phi_{i,j-1}C_{s,i,j-1}^{b} - \phi_{i,j}C_{s,i,j}^{b}\right) - W_{bt}^{(j,j+1)} \cdot \left(\phi_{i,j}C_{s,i,j}^{b} - \phi_{i,j+1}C_{s,i,j+1}^{b}\right) + a_{ds}\theta\phi_{i,j}Z_{j}\left(\frac{K_{d,i}C_{e,j}^{b}}{\varepsilon_{j} + (1 - \varepsilon_{j})\hat{K}_{d,j}} - C_{s,i,j}^{b}\right) - a_{fs}\phi_{i,j}Z_{j}C_{s,i,j}^{b} + a_{sf}\phi_{i,j}Z_{j}\tilde{C}_{s,i,j}^{b} - \lambda\phi_{i,j}Z_{j}C_{s,i,j}^{b},$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z_j \phi_j \tilde{C}^b_{s,i,1}}{\partial t} &= W_{bt}^{(j-1,j)} \left(\phi_{j-1} \tilde{C}^b_{s,i,j-1} - \phi_j \tilde{C}^b_{s,i,j} \right) - W_{bt}^{(j,j+1)} \left(\phi_j \tilde{C}^b_{s,i,j} - \phi_{j+1} \tilde{C}^b_{s,i,j+1} \right) \\ &+ a_{fs} \phi_{i,j} Z_j C^b_{s,i,1} - a_{sf} \phi_{i,j} Z_j \tilde{C}^b_{s,i,1} - \lambda \phi_{i,j} Z_j \tilde{C}^b_{s,i,1}, \end{aligned}$$

6.7 Чисельні експерименти розповсюдження радіонуклідів в каналі із заглибленням

Для дослідження та демонстрації залежності результатів розрахунків від використання багато-шарового дна та дво-ступеневої реакції в намулах було проведено ряд чисельних тестів в каналі з постійною течією. Метою дослідження є оцінка важливості багато-шарового представлення для донних намулів та розгляд дво-ступеневої обмінної реакції радіонуклідів.

Розглянемо великий басейн довжиною 40км, шириною 1км та глибиною, що змінюється від 10-ти до 20-ти метрів, як зазначено на схемі експерименту на рис. 6.9. З лівої границі відбувається постійний витік води, що забруднена постійною концентрацією розчиненого радіонукліду. Дно вкрите однорідними піщинками. В такій конфігурації можна дослідити окремо процеси та параметри, що впливають на перенос радіонуклідів та забруднення дна. Як впливає врахування багатошаровості дна, двоступеневої реакції, наявність чи відсутність завислих намулів, наявність неоднорідностей дна (у нашому випадку заглиблення). Будемо досліджувати як процес забруднення дна, так і подальше його очищення, коли джерело радіоактивності перестало діяти. Було проведено низку чисельних експериментів, які буде детально описані у наступних підрозділах.

6.7.1 Довготривале забруднення дна за рахунок дифузії розчиненого радіонукліду

В даному підрозділі досліджується вплив багатошарового дна та наявності ями в каналі на процес забруднення дна. Вважаємо джерело забруднення нескінченно тривалим, щи витікає з відкритої границі каналу з постійною концентрацією. Розмив та осідання намулів не враховувались, забруднення



Рисунок 6.9: Схема чисельних експериментів в каналі з заглибленням



Рисунок 6.10: Концентрація ${}^{137}Cs$ у поверхневому шарі в кінці каналу (зліва); Концентрація ${}^{137}Cs$ у поверхневому шарі в ямі (справа)

дна відбувалось лише за рахунок дифузії розчиненого радіонукліду в порову воду. Чисельні значення основних параметрів моделі наведені в Таблиці 6.4. Список сценаріїв:

- 1. Один шар донних намулів, одно-ступенева реакція
- 2. Один шар донних намулів, дво-ступенева реакція
- 3. Багатошарове представлення дна, одно-ступенева реакція
- 4. Багатошарове представлення дна, дво-ступенева реакція

Параметр	Значення
Вид радіонукліду	¹³⁷ Cs
Середня швидкість води	0.4 м/
Концентрація	1 Бк/м ³
Роздільна здатність	100м,10м, 21 s рівнів
Пористість	0.6
Густина намулів	2600 кг/м ³
Уклін дна	$5 \cdot 10^{-6}$
Шорсткість дна	$1 \cdot 10^{-5}$ M
K _d	20 м $^3/$ кг
Розмір піщинок намулів	0.1мм

Табл. 6.4: Параметри моделі для тестів в каналі



Рисунок 6.11: Профілі концентрації в кінці каналу після 125 днів моделювання (зліва); Профілі концентрації в ямі після 125 днів моделювання (справа)

Основні висновки, які можна зробити на підставі проведених чисельних експериментів:

- 1. Модель, що враховує дво-ступеневу реакцію значно не відрізняється від одно-ступеневої на часових масштабах менше $1/a_{fs} \approx 100$ днів
- 2. Друга "повільна" фаза стає переважною при часових масштабах $t \gg 100$ днів



Рисунок 6.12: Профілі концентрації в кінці каналу після 250 днів моделювання (зліва); Профілі концентрації в ямі після 250 днів моделювання (справа)



Рисунок 6.13: Профілі концентрації в кінці каналу після 450 днів моделювання (зліва); Профілі концентрації в ямі після 450 днів моделювання (справа)

- Зменшення придонного тертя приводить до зниження концентрації в донних намулах та зменшенню відносної різниці між одно- та дво-ступеневими моделями.
- 4. Використання одношарової моделі донних намулів приводить до збільшення швидкості забруднення дна у порівнянні з багатошаровою моделлю, тому може призвести до значних похибок.
- 5. Врахування повільної фази забруднення намулів при довготривалих роз-



Рисунок 6.14: Профілі концентрації в кінці каналу після 750 днів моделювання (зліва); Профілі концентрації в ямі після 750 днів моделювання (справа)



Рисунок 6.15: Зміна запасу ${}^{137}Cs$ з часом в кінці каналу (зліва); Зміна запасу ${}^{137}Cs$ з часом в ямі (справа)

рахунках призводить до значного збільшення загального забруднення дна у порівнянні з одно-ступеневою моделлю.

6.7.2 Забруднення дна в каналі з урахуванням переносу намулів

В даному підрозділі описуються чисельні експерименти по забрудненню дна в каналі із заглибленням. Конфігурація розрахункової області вибрана така ж, як і в розділі 6.7.1. Метою чисельних розрахунків є дослідження



Рисунок 6.16: Стаціонарний розподіл концентрації зважених намулів у вертикальному перерізі

впливу транспорту намулів на забруднення донних намулів радіонуклідами. Як і раніше, розчинений у воді ${}^{137}Cs$ постійної концентрації поступав з лівої сторони каналу (рис. 6.9). При розрахунках використовувалась багатошарова модель донних намулів. При обчисленні процесів адсорбції-десорбції використовувалась модель одноступеневої кінетичної реакції. Концентрація розчиненого у воді ${}^{137}Cs$ на втоці в канал дорівнювала:

$$Cs = 10^{6} {
m Бк/m}^{3},$$
 при, $t < 14$ діб; $Cs = 0 {
m Бк/m}^{3},$ при $t > 14$ діб;

Тобто моделювалось початкове короткотривале (2 тижні) забруднення дна розчиненим радіонуклідом високої концентрації, а потім поступове очищення дня при нульовій концентрації ¹³⁷Cs, що втікає в канал. Було проведено два чисельних експерименти:

- Моделлю що не враховує наявність зважених намулів, осідання намулів та ерозію дна
- 2. Моделлю, що включає повну модель переносу намулів, змучування осідання та зміну рівня дна.

На рис. 6.16 показаний стаціонарний розподіл зважених намулів у вертикальному перерізі. Зважені намули зосереджені, в основному в придонному



Рисунок 6.17: Вертикальний переріз концентрації розчиненого у воді радіонукліду. Зліва – через 100 днів моделювання, справа – через 150 днів моделювання.



Рисунок 6.18: Вертикальний переріз концентрації адсорбованого на зважених намулах. Зліва – через 100 днів моделювання, справа – через 150 днів моделювання.

шарі. Концентрації намулів невеликі, максимальні придонні значення досягають 50мг/л. Концентрація зважених намулів зменшується із збільшенням глибини та обертається в нуль в найглибшій точці каналу.

Через наявність зважених намулів, у водному шарі починається процес адсорбції, при цьому зменшується концентрація розчиненого ^{137}Cs і з'являється новий механізм забруднення дна – осідання забруднених піщинок на дно. Коли припиняється дія постійного джерела розчиненого ^{137}Cs , то дно починає додатково очищуватись за рахунок ерозії та видаленню забруднених піщинок, а чиста вода, що втікає в канал, починає забруднюватись за рахунок процесу десорбції.

На рис. 6.17-6.18 показані вертикальні концентрації розчиненого та адсорбованого ^{137}Cs через 100 та 150 днів після початку моделювання. Джерелом забруднення розчиненим та адсорбованим радіонуклідом на ці моменти часу є забруднене дно. Наведені зображення ілюструють те, що розподіл ^{137}Cs не є стаціонарним в часі, його концентрація поступово зменшується разом із



Рисунок 6.19: Порівняння концентрації радіонуклідів у верхньому шарі намулів при врахуванні переносу намулів та без урахування.

очищенням дна та зменшенням потоку радіонуклідів через дифузійний обмін з поровою водою та через ерозію дна. Концентрація адсорбованого ^{137}Cs зосереджена у придонному шарі, в зоні найбільшою концентрації завислих намулів. А забруднення розчиненим ^{137}Cs розповсюджується по всій товщині водного шару завдяки турбулентному перемішуванню.

Результати моделювання повною морфологічною моделлю порівнювались з результатами моделювання без урахування переносу намулів у п'яти точках. Для порівняння було обрано такі положення: $x_1 = 10$ км– точка на плоскій ділянці каналу, перед заглибленням; $x_2 = 19$ км– точка на початку заглиблення; $x_3 = 20$ км– найглибше місце каналу; $x_4 = 22$ км– кінець заглиблення, початок плоскої ділянки каналу; $x_5 = 30$ км– плоска ділянка каналу після заглиблення.

На рис. 6.19 показано порівняння зміни концентрації забруднення верхнього шару намулів з часом у п'яти обраних точках для двох варіантів конфігурації моделі. В точках 1 та 5 концентрації майже не відрізняються одна від одної, бо на пласких ділянках потік ерозії у випадку морфологічної моделі



Рисунок 6.20: Порівняння загального забруднення дна при врахуванні переносу намулів та без урахування.

компенсується притоком зважених намулів зверху по течії. Найбільші розбіжності знаходяться в місцях неоднорідностей глибини. В точці 3 на початку заглиблення морфологічна модель прогнозує біль високу концентрацію намулів, за рахунок того, що на цьому схилі відбувається відкладення намулів, через те що падає швидкість потоку. На схилі в кінці ями, навпаки, відбувається швидкий розмив дна за рахунок прискорення потоку. Тому в точці 4 за кілька місяців звивається весь забруднений шар намулів, і концентрація стає майже рівною нулеві. В найглибшій точці каналу 3 немає ніякої різниці при моделювання різними конфігураціями моделей через те, що вкрив перенесу намулів не досягає такої глибини, всі зважені намули осідають на схилі. В цій точці забруднення дна відбувається тільки за рахунок дифузійного обміну.

Ще більшою різниця виглядає, якщо порівнювати загальне забруднення (проінтегроване по глибині шару донних намулів) в цих же точках. Таке порівняння показане на рис. 6.20. В точках 1 та 5 забруднення відрізняється не сильно. В точці три воно точно співпадає. А в точці 2, на початку схилу, урахування переносу намулів призводить до збільшення загального забруднення у близька 5 разів. Причому інтегральне забруднення монотонно збільшується



Рисунок 6.21: Порівняння профілів концентрації забруднення дна при врахуванні переносу намулів та без урахування.

з часом за рахунок за рахунок постійного притоку забруднених намулів.

На рис. 6.21 показані профілі забруднення дня через 150 днів моделювання. Можна бачити, що в точці 2 значно більшою є глибина проникнення забруднення за рахунок того, що у верхній шар існує постійне відкладення забруднених намулів. При такому процесі формується локальний максимум забруднення на деякій глибині. Причиною цього є те, що на поверхню відкладаються намули, концентрація забруднення яких зменшується з часом. Таким чином найбільш забруднені намули опиняються похованими під шаром більш чистих намулів.

Наведені розрахунки демонструють необхідність використання повної моделі переносу намулів при моделюванні забруднення дна радіонуклідами.

227

Процеси ерозії, осідання та переносу зважених намулів можуть біти причиною значних неоднорідностей в забрудненні дна, що спостерігається в деяких натурних дослідженнях, наприклад [289]

6.8 Лагранжевий алгоритм моделі дисперсії радіонуклідів

Для розв'язку задачі про розповсюдження радіонуклідів в морському середовищі побудуємо лагранжевий алгоритм розв'язку задачі, що в ейлеровій постановці ставиться рівняннями (6.7-6.12). Обмежимося випадком одношарового представлення дна. Згодом алгоритм може бути узагальнений для багатошарового дна з використанням підходів, що описані в розділі 4. В лагранжевому підході дисперсія радіонуклідів розглядається як рух певної кількості частинок, кожна з яких представляє собою певну кількість радіоактивності. Будемо вважати "заряд" кожної такої частинки рівним і незмінним в часі. Кожна частинка може існувати одночасно лише в одній "фазі", або в одному стані. Кожна "фаза" в ейлеровій постановці описується окремим рівнянням системи (6.7-6.12). Радіоактивний розпад, тобто зменшення кількості радіоактивності моделюється зменшенням кількості частинок, тобто знищенням деяких з них. Належність частинки до певної фази визначається атрибутами (властивостями, або мітками) частинки. Кожна частинка повинна мати мітку, по якій можна визначити до якої фази вона належить. Це означає, що кожна з частинок в кожний момент часу повинна мати одну з наступних міток.

- 1. Розчинена у воді (1 мітка)
- 2. Адсорбована на *i*-му класі намулів (*n* міток)

- 3. Розчинена у поровій воді (1 мітка)
- 4. Адсорбована на *i*-му класі донних намулів (*n* міток)

Всього потрібно 2n + 1 міток щоб описати всі можливі стани частинки. Де *n*– кількість класів розмірів намулів, що беруться до уваги. Крім опису адвективного переносу течіями та турбулентної дифузії задача зводиться до алгоритму зміни міток кожної частики з часом у відповідності до постановки задачі, що визначається рівняннями (6.7-6.12). Розглянемо окремо кожний механізм, що впливає на дисперсію радіонуклідів у водному середовищі.

6.8.1 Перенос та дифузія

Перенос та турбулентна дифузія моделюється методом інтегрування траєкторії частинок для адвективного переносу та метод випадкових блукань для турбулентної дифузії. Детально лагранжевий алгоритм вже розглянуто в розділі 2. В цьому сенсі перенос радіонукліду нічим не відрізняється від переносу часточок намулу або диспергованих нафтових крапель. Слід тільки зазначити, що радіонуклід адсорбований зваженим намулом має додаткову швидкість осідання, що дорівнює швидкості осідання даної частинки намулу.

6.8.2 Радіоактивний розпад

Радіоактивний розпад - це зменшення з часом радіоактивних частинок за рахунок випромінювання. Основною характеристикою радіоактивного розпаду є період напіврозпаду, тобто час за який кількість радіоактивної речовини зменшується вдвічі. Період напіврозпаду залежить від конкретної речовини, значення для деяких радіоактивних ізотопів наведені в Таблиці 6.5.

З Таблиці 6.5 видно, що періоди напіврозпаду для різних речовин можуть суттєво відрізнятися, в деяких випадках при короткостроковому процесі ни-

Назва ізотопу	Період напіврозпаду
¹³¹ <i>I</i>	8.04 діб
^{137}Cs	30.17 років
134Cs	2.06 років
⁹⁰ Sr	28.79 років
²³⁹ Pu	2.4 10 ⁴ років

Табл. 6.5: Значення періоду напіврозпаду для деяких радіоактивних ізотопів

ми можна знехтувати, а в деяких радіоактивний розпад може бути одним з основних процесів. Зменшення кількості радіоактивності описується рівнянням розпаду:

$$\frac{dC}{dt} = -\lambda C \tag{6.45}$$

де $\lambda = 0.693/T_{1/2}$ – швидкість розпаду, $T_{1/2}$ – період напіврозпаду. Співвідношення між швидкістю розпаду та періодом розпаду знаходиться виходячи з означення періоду розпаду ($C(0) = 2C(T_{1/2})$) та з розв'язку рівняння (6.45), звідки випливає, що $-\lambda T_{1/2} = \ln 1/2$. Для побудови лагранжевого алгоритму розглянемо розв'язок цього рівняння:

$$C(t) = C_0 e^{-\lambda t} \tag{6.46}$$

Тоді відносна кількість речовини, що має зменшитись за час Δt :

$$\frac{\Delta C}{C} = \frac{C(t) - C(t + \Delta t)}{C(t)} = \frac{C_0 - C_0 e^{-\lambda \Delta t}}{C_0} = 1 - e^{-\lambda \Delta t}$$
(6.47)

Відносне зменшення кількості речовини за один часовий крок моделювання для випадку лагранжевого моделювання частинками – це ймовірність зникнення частинки. Тобто

$$p = 1 - e^{-\lambda \Delta t}, \qquad p \in (0; 1)$$
 (6.48)

це ймовірність того, що на даному часовому кроці дана частинка може зникнути. Для чисельної реалізації такого механізму необхідно на кожному часо-



Рисунок 6.22: Моделювання радіоактивного розпаду ¹³¹*I*, при використанні 100 часток (зліва); 1000 часток (справа).



Рисунок 6.23: Моделювання радіоактивного розпаду¹³¹ I, при використанні 10000 часток (зліва); 100000 часток (справа)

вому кроці для кожної частинки згенерувати випадкове число r, що рівномірно розподілене на [0;1]. Тоді, якщо $p \ge r$, то частинку необхідно знищити, якщо $p \le r$, то частинка залишається до наступного кроку, на якому знову "розігрується" ймовірність знищення частинки.

6.8.3 Оцінка точності розв'язання рівняння розпаду стохастичним методом

Зрозуміло, що в чисельному алгоритмі (6.48) результат моделювання буде залежати від кількості частинок. Чим більше частинок, тим більш точним слід очікувати результат. В розділі 2.3 описаний загальний підхід для оцінки точності моделювання зміни станів речовини. В цьому розділі розглядаються конкретні приклади застосування до рівнянь, що стосуються зміни стану радіонуклідів з часом.

Розглянемо для прикладу радіоактивний розпад ¹³¹ / з параметром розпаду $\lambda = 9.97 \, 10^{-7} c^{-1}$. Отримаємо чисельний розв'язок рівняння (6.45) за допомогою алгоритма (6.48). Крім кількості частинок результат може залежати ще від часового кроку Δt , що присутній в формулі (6.48). Проведемо декілька чисельних експериментів з різною кількістю частинок і різними часовими кроками. Результати зміни кількості частинок в часі будемо порівнювати з точним розв'язком рівняння (6.45). На рис. (6.22,6.22) показано порівняння результатів моделювання статистичними методами процесу розпаду ^{131}I з точним розв'язком рівняння (6.45). З представлених рисунків випливає, як і було очікувано, що точність розрахунків збільшується із збільшенням кількості частинок та із зменшенням часового кроку. Побудуємо тепер стандартне відхилення в залежності від кількості частинок. Не рис. 6.24 показано, що стандартне відхилення швидко зменшується при збільшенні кількості частинок до 4000, далі точність також росте, але зростання сповільнюється. Також з графіку видно, що зменшення часового кроку також призводить до суттєвого уточнення результатів моделювання. При частинок більше 1000 стандартне відхилення не перевищує 1%. Зауважимо, графіки на рис. 6.24 отримані шляхом ковзного усереднення по шаблону з 11 точок для зручності візуалізації. Насправді, амплітуди випадкових коливань без згладжування є дещо більшими.

Слід зазначити, що при користуванні статистичним методами розв'язку рівнянь не зовсім коректно говорити про точність розв'язку в сенсі стандартного відхилення чисельного розв'язку від точного. Статистичні методи основані на використанні випадкових величин, які, хоч і мають певний розподіл, але, строго кажучи, можуть мати довільні послідовності випадкових чисел при кожному конкретному розрахунку. Тому чисельний розв'язок слід розуміти як випадковий розв'язок, *математичне сподівання* якого дорівнює точному розв'язку. *Точність* такого розв'язку визначається, як ймовірність того, що відхилення від математичного сподівання на задану величину не менше деякого значення:

$$P\left(\left|\frac{C-\tilde{C}}{C}\right| < \varepsilon\right) > P_0. \tag{6.49}$$

Тут $|C - \tilde{C}|$ відхилення точного розв'язку від чисельного, ε точність, P_0 - ймовірність того, що відхилення не перевищить точність. Нехай маємо *n* частинок в якійсь момент часу *t*. Для кожної частинки з ймовірністю $p = 1 - exp(-\lambda t)$ розігрується знищення частинки. Точна "бажана" кількість частинок, яка має бути знищена дорівнює

$$M = np \tag{6.50}$$

M– це математичне сподівання, яке рівне точному розв'язку $M = n(1 - exp(-\lambda t))$. Таке незалежного розігрування n частинок називається схемою незалежних дослідів *Бернуллі*. Згідно схеми Бернуллі, ймовірність того, що в n незалежних дослідах буде знищено m частинок дорівнює

$$P_{m,n} = C_n^m p^n (1-p)^{n-m} = \frac{n!}{m!(n-m)!} p^n (1-p)^{n-m}$$
(6.51)



Рисунок 6.24: Стандартне відхилення від точного розв'язку в залежності від кількості частинок та часового кроку

Розподіл (6.51) називається біноміальним. Тоді ймовірність того, що m = np, можна знайти за формулою (6.51) тобто $P_{[np],n}$. Для великих значень n (більше сотень) практичне використання формули (6.51) сильно ускладнюється в зв'язку з необхідністю обчислення факторіалів великих чисел. Тому використовується наближення локальної теореми Лапласа, згідно якої шукану ймовірність можна знайти наближено:

$$P_{m,n} \approx \frac{1}{npq} \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}} \tag{6.52}$$

де q = 1 - p- ймовірність залишитися частинці, $x = \frac{m - np}{\sqrt{npq}}$. З формули (6.52) випливає, що значення ймовірності того, що кількість знищених частинок буде дорівнювати математичному сподіванню:

$$P_{[np],n} \approx \frac{1}{npq} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tag{6.53}$$

Якщо ж потрібно розрахувати ймовірність потрапляння в деякий інтервал, як в рівнянні (6.49), то доцільно використати інтегральну теорему Лапласа, яка отримується інтегруванням рівняння (6.52) по інтервалу (m_1, m_2) . Ймовірність потрапляння в інтервал (m_1, m_2) дорівнює

$$P_{(m_1,m_2),n} \approx \Phi(x'') - \Phi(x'),$$
 (6.54)

де $\Phi(x) = \frac{1}{npq} \int_0^x e^{-z^2/2} dz$ - так звана функція помилок, $x' = \frac{m_1 - np}{\sqrt{npq}}$, $x'' = \frac{m_2 - np}{\sqrt{npq}}$. Тоді для заданої точності ε , ймовірність того, что кількість знищених частинок відхилиться від математичного сподівання з точністю не більше ε буде дорівнювати

$$P\left(\left|\frac{m}{np} - 1\right| < \varepsilon\right) = 2\Phi\left(\varepsilon p\sqrt{\frac{n}{pq}}\right) \tag{6.55}$$

 $\Phi(x)$ – монотонно зростаюча функція. З формули (6.55) випливає, що ймовірність відхилення менше заданої точності зростає із збільшенням кількості частинок, а також зростає із збільшенням значення p. Якщо залежність точності від кількості часток видається очевидною, то збільшення точності із збільшенням p виглядає трошки дивним, адже p монотонно залежить від Δt , а в чисельному експерименті було показано (рис. 6.24), що точність має падати із збільшенням часового кроку. Справа в тому, що формула (6.55) розглядає лише один часовий крок. Різні ймовірності p відповідають різним Δt , а тому відповідають різним моментам часу. Збільшення точності для маленьких кроків по часу (з маленькою p) досягається за рахунок збільшення кількості кроків, тобто збільшення кількості випробувань n.

Розглянемо тепер скінчений проміжок часу $t \in [0; T]$ на якому розв'язується рівняння розпаду (6.45), та розіб'ємо його на n_t рівних проміжків тривалістю $\Delta t = T/n_t$. Найімовірніше число частинок, яке залишиться через n_t часових кроків, при початковій кількості частинок n буде дорівнювати $n(1-p)^{n_t} = nq^{n_t}$. Тоді кількість частинок, що буде знищено за весь цей час буде дорівнювати $n - nq^{n_t} = n(1-q^{n_t})$. З іншого боку, математичне сподівання кількості знищених частинок має дорівнювати M = Np, де N- загальна кількість випробувань за n_t часових кроків. $N \neq nn_t$, тому що кількість частинок постійно зменшується з кожним часовим кроком. Тому, маємо, що матсподівання загальної кількості випробувань $N = n \frac{1-q^{n_t}}{p}$. Тоді, для оцінки точності в формулі (6.55) потрібно кількість випробувань n замінити на N, тоді отримаємо:

$$P\left(\left|\frac{m}{n(1-q^{n_t})}-1\right|<\varepsilon\right) = 2\Phi\left(\varepsilon p\sqrt{n\frac{1-q^{n_t}}{p^2q}}\right)$$
(6.56)

Формула (6.56) задає вираз для залежності точності розрахунків з часом і може бути використана для планування та визначення параметрів моделі, наприклад кількості частинок для досягнення бажаної точності наприкінці часу розрахунків.

Замість оцінки ймовірності відхилення, зручно користуватися значенням середньоквадратичного відхиленням, що є характеристикою випадкової величини. Розглянемо залежність точності розрахунків, а саме розрахунків часу життя частинки, від часового кроку. Розглянемо розподіл часу життя одної частинки. Ймовірність того, що частинка зникне через один часовий крок Δt дорівнює $P(\Delta t) = p$. Щоб частинка зникла на другому кроці, необхідно, щоб з ймовірністю q = 1 - p вона не зникла на першому кроці і з ймовірністю p зникла на другому. Згідно теореми множення ймовірностей незалежних подій, ймовірність такої події дорівнює $P(2\Delta t) = p(1-p) = pq$. Щоб подія відбулася на часовому кроці $n\Delta t$, потрібно, щоб перед цим на n - 1-му кроці частинка не зникла, а зникла лише на n-му. Тоді $P(n\Delta t) = pq^{n-1}$. Ймовірність того, що частинка зникне на проміжку $t \in [0; n\Delta t]$ дорівнює $\sum_{n=1}^{n} pq^{n-1} = p\frac{1-q^n}{p} = 1-q^n$ згідно суми геометричної прогресії. При $n \to \infty$ Математичне сподівання такої випадкової величини буде дорівнювати:

$$M[X] = \sum_{n=1}^{\infty} n\Delta t p q^{n-1} = \frac{\Delta t}{p}$$

Другий момент дорівнює

$$M[X^{2}] = \sum_{n=1}^{\infty} (n\Delta t)^{2} p q^{n-1} = \frac{\Delta t^{2}(2-p)}{p^{2}}$$

Тоді можемо розрахувати дисперсію

$$D[X] = M[X^2] - M^2[X] = = \frac{\Delta t^2 q}{p^2}$$

Маємо вираз для середньоквадратичного відхилення часу життя частинки:

$$\sigma = \sqrt{D[X]} = \frac{\Delta t}{p} \sqrt{q} \tag{6.57}$$

З наведенного співвідношення видно, що точність розрахунку тривалості життя частинки прямо пропорційне ймовірності зникнення частинки за один часовий крок та обернено пропорційне часовому кроку.

Повернемося тепер до оцінки точності розрахунку кількості частинок. Для біноміального розподілу (6.51) середньоквадратичне відхилення дорівнює $\sigma = \sqrt{npq}$. Якщо розглянути один часовий крок і нормувати середньоквадратичне відхилення до загальної кількості частинок, то отримаємо

$$\bar{\sigma} = \sqrt{\frac{pq}{n}} \tag{6.58}$$

Побудуємо тепер розподіл кількості частинок у довільний момент часу $T = j\Delta t$. Будемо позначати його $P_{j,(k,n)}$ -ймовірність того, що на j-му кроці зникне k частинок при початковій кількості частинок перед початком процесу n. На першому кроці отримаємо біноміальний розподіл (6.51), тобто

$$P_{1,(k,n)} = C_n^k p^k q^{n-k} (6.59)$$

На часовому кроці *ј* ймовірність $P_{j,(k,n)}$ за формулою умовної ймовірності:

$$P_{j,(k,n)} = \sum_{i=0}^{k} P_{j-1,(i,n)} \left(C_{n-i}^{k-i} p^{k-i} q^{n-k} \right)$$
(6.60)

Тут перший множник під сумою є ймовірністю того, що на j-1-му кроці були зниклими *i* частинок, а другий множник ймовірність того, що на *j*-му кроці зникне ще k-i частинок. Запишемо вираз для 2-го кроку:

$$P_{2,(k,n)} = \sum_{i=0}^{k} C_n^i p^i q^{n-i} C_{n-i}^{k-i} p^{k-i} q^{n-k} = C_n^k p^k q^{2n-k} \sum_{i=0}^{k} C_k^i q^{-i}$$
(6.61)

Скориставшись формулою біному Ньютона, знайдемо, що $\sum_{i=0}^{k} C_k^i q^{-i} = (1+1/q)^k$. Остаточно отримаємо вираз для $P_{2,(k,n)}$:

$$P_{2,(k,n)} = C_n^k p^k q^{2n-k} \left(\frac{1+q}{q}\right)^k$$
(6.62)

Таким же чином знайдемо вираз для 3-го кроку:

$$P_{3,(k,n)} = \sum_{i=0}^{k} P_{2,(i,n)} \left(C_{n-i}^{k-i} p^{k-i} q^{n-k} \right) = C_n^k p^k q^{3n-k} \left(\frac{1+q+q^2}{q^2} \right)^k \tag{6.63}$$

Продовживши послідовність, отримаємо загальний вираз для $P_{j,(k,n)}$:

$$P_{j,(k,n)} = C_n^k p^k q^{jn-k} \left(\frac{1+q+q^2+\ldots+q^{j-1}}{q^{j-1}}\right)^k \tag{6.64}$$

Скориставшись формулою суми геометричної прогресії, і враховуючи, що p = 1 - q отримаємо вираз:

$$P_{j,(k,n)} = C_n^k q^{j(n-k)} (1-q^j)^k$$
(6.65)

Співвідношення (6.65) задає розподіл кількості зниклих частинок на часовому кроці *j*. З формули біному Ньютона випливає, що

$$\sum_{k=0}^{n} P_{j,(k,n)} = 1 \tag{6.66}$$

Якщо зробити заміну $p' = 1 - q^j$, $q' = q^j$, то розподіл (6.65) перетвориться в стандартний біноміальний розподіл, для якого добре відомі математичне сподівання та середньоквадратичне відхилення.

$$M_{j}[k] = np' = n(1 - q^{j})$$

$$\bar{\sigma}_{j}[k] = \sqrt{\frac{p'q'}{n}} = \sqrt{\frac{(1 - q^{j})q^{j}}{n}}$$
(6.67)

Перше співвідношення з рівняння (6.67) задає математичне сподівання кількості зниклих частинок на часовому кроці *j*. Якщо підставити значення $q^{j} = (1-p)^{j} = exp(-\lambda\Delta t)^{j} = exp(-\lambda j\Delta t)$, то отримаємо, що

$$M_j[k] = n(1 - e^{-\lambda j\Delta t}) \tag{6.68}$$

задає аналітичне значення кількості зниклих часток, що випливає з рівняння (6.45). Тому можна бути певними, що чисельний алгоритм завжди призводить до випадкового результату, математичне сподівання якого дорівнює аналітичному розв'язку. Згідно 2-го співвідношення (6.67), середньоквадратичне відхилення чисельного розв'язку зменшується із збільшенням кількості частинок *n*, а також залежить від номеру часового кроку. Підставивши значення ймовірності *q*, отримаємо

$$\bar{\sigma}_j[k] = \frac{1}{\sqrt{n}} \sqrt{(1 - e^{-\lambda j \Delta t})e^{-\lambda j \Delta t}}$$
(6.69)

Відмітимо, що $\bar{\sigma}_j[k]$ не залежить явно від часового кроку, а залежить від загального проміжку $T = j\Delta t$. $\bar{\sigma}_j[k]$ є мінімальним на початку моделювання (при j = 1), і починає збільшуватись з плином часу. При заданій кількості часток, середньоквадратичне відхилення досягає максимуму при $q^j = 1/2$, тобто $e^{-\lambda j\Delta t} = 1/2$. Це означає, що похибка є максимальною при часі моделювання, що дорівнює періоду напіврозпаду $T_{1/2}$, в цей момент середньоквадратичне відхилення досягає максимального значення, що дорівнює:

$$\bar{\sigma}_{\max}[k] = \frac{1}{2\sqrt{n}} \tag{6.70}$$



Рисунок 6.25: Стандартне відхилення від точного розв'язку в залежності від кількості частинок та часового кроку. Різні криві побудовані для різних значень часового кроку при моделюванні. Суцільною чорною кривою показано аналітична оцінка для максимального середньоквадратичного відхилення.

Співвідношення (6.70) можна використовувати для оцінки максимальної похибки при моделюванні статистичним методом. На рис. 6.25 показано порівняння стандартного відхилення з аналітично знайденим значенням максимального середньоквадратичного відхилення. Порівняння підтверджує справедливість знайденої оцінки для максимальної похибки. Також з формули (6.70) випливає, що будь-якої бажаної точності можна досягти використанням достатньої кількості частинок при моделюванні. Необхідну кількість частинок, щоб гарантувати задану точність $\bar{\sigma}_{max}[k]$ можна знайти зі співвідношення (6.70).

Рис. 6.26 показує залежність нормованого на \sqrt{n} середньоквадратичного відхилення, що задається співвідношенням (6.70) для ¹³¹I з періодом напіврозпаду $T_{1/2} = 8.04$ доби. Тепер, для того, щоб розрахувати "середнє" середньоквадратичне відхилення за весь період моделювання, тобто стандартне



Рисунок 6.26: Середньоквадратичне відхилення від точного розв'язку в залежності від часу моделювання

відхилення, яке було знайдено чисельно на рис. 6.24, треба усереднити в часі співвідношення (6.69). Послідовно отримаємо:

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{n}} \sqrt{\frac{1}{N_t} \sum_{j=1}^{N_t} q^j (1-q^j)} = \frac{1}{\sqrt{n}} \sqrt{\frac{(q-q^{N_t})(1-q^{N_t})}{N_t (1-q^2)}}$$
(6.71)

Виявилося, що для розглянутого періоду часу T = 60 діб, для розпаду ¹³¹I середнє стандарте відхилення майже не залежить від часового кроку і приблизно дорівнює

$$\bar{\sigma} = \frac{0.31}{\sqrt{n}} \tag{6.72}$$

Ця крива також показана на рис. 6.26. Незалежність від часового кроку можна зрозуміти обчисливши вираз (6.71) наближено. Покладемо $q \approx 1$, що справедливо $\Delta t \ll T$, та розклавши знаменник в ряд Тейлора, залишивши перші два члени $1 - q^2 = 1 - exp(2\lambda\Delta t) \approx 1 - (1 - 2\lambda\Delta t)$. Тоді маємо наближений вираз:

$$\bar{\sigma} \approx \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1 - e^{-\lambda T}}{\sqrt{2\lambda T}} \tag{6.73}$$

Цей вираз не залежить від часового кроку, а тільки від періоду усереднення. Отже, знайдено аналітичний вираз (6.70), який задає максимальне середньоквадратичне відхилення в довільний момент часу при розв'язанні рівняння розпаду (6.45) методом частинок. Знайдено вираз (6.71) та наближений вираз (6.73) для середнього в часі відхилення від точного розв'язку. Аналітичні вирази узгоджені з чисельними експериментами.

Формула (6.70) задає середньоквадратичне відхилення, тобто параметр розподілу випадкової величини. Для того, щоб оцінити точність розрахунків за формулою (6.55) можна використати нерівність Чебишева [22], яка має місце для будь-якого розподілу випадкової величини:

$$P\left(|X - M[x]| < \varepsilon\right) \ge 1 - \frac{D[x]}{\varepsilon^2} \tag{6.74}$$

В цій формулі ε – абсолютна похибка. Тобто, в нашому випадку, кількість частинок. Якщо замість абсолютної похибки обчислити відносну (замінити $\varepsilon = \varepsilon M[x]$), то можна отримати оцінку точності по вже знайденим значенням $M[x], D[x] = \sigma^2$:

$$P\left(|X - M[x]| < M[x]\varepsilon\right) \ge 1 - \frac{\sigma^2}{M^2[x]\varepsilon^2} = 1 - \frac{e^{-\lambda T}}{\varepsilon^2 n}$$
(6.75)

З формули (6.75) випливає, що для будь-якої заданої точності (відносної похибки) можна знайти таку кількість частинок n, щоб ймовірність відхилення від точного розв'язку була більшою за будь-яке задане значення. Причому точність буде збільшуватись з часом. Необхідну кількість частинок для заданої точності ε та ймовірності відхилення можна обчислити за формулою (6.75). Наприклад, щоб досягти ймовірності 0.99 відхилення від точного розв'язку не більше ніж на 1% ($\varepsilon = 0.01$) вже в початковий момент часу, необхідно використати не менш як 10⁶ частинок. Якщо ж достатньо ймовірності 0.9, то для такої ж точності достатньо 10⁵ частинок. З часом ймовірність досягти заданої точності зростає і прямує до 1.

6.8.4 Адсорбція/десорбція при однофракційних намулах

Для моделювання процесів адсорбції-десорбції розглянемо тепер алгоритм розв'язку методом частинок системи рівнянь типу:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_1}{\partial t} = -\alpha C_1 + \beta C_2 \\ \frac{\partial C_2}{\partial t} = \alpha C_1 - \beta C_2 \end{cases}$$
(6.76)

Тут α , $\beta > 0$. Ця система особлива тим, що стоковий член одного рівняння точно дорівнює джерелу другого рівняння, і навпаки. Тобто дану систему можна розглядати як два рівняння розпаду (що детально описане в розділі 6.8.3), в якому речовина при розпаді не пропадає, а переходить до іншого стану (фази). Попавши до іншої фази, речовина може повернутися по первісного стану знову шляхом розпаду з іншої фази. Рівняння (6.81) має властивість консервативності, бо

$$\frac{\partial(C_1 + C_2)}{\partial t} = 0, \tag{6.77}$$

тобто загальна кількість речовини не змінюється. Тому чисельний розв'язок такого рівняння можна шукати методом частинок, як розв'язок двох рівнянь розпаду, коли при розпаді частинка не зникає, а переходить до іншої фази. Чисельний алгоритм розв'язку системи (6.81) має наступний вигляд.

- Якщо частинка належить до першої фази, то з ймовірністю p₁ = 1 e^{-αΔt} перемістити її до другої фази.
- Якщо частинка належить до другої фази, то з ймовірністю p₂ = 1 − e^{-βΔt} перемістити її до першої фази.
- 3. Перейти на наступний часовий крок і повторити.

Якщо тепер записати рівняння (6.1,6.2) для одної фракції намулів, відкинувши всі члени, крім фазових обмінних членів між водою та намулами, то отримаємо систему двох рівнянь:

$$\begin{cases}
\frac{\partial C_d^w}{\partial t} = -a_{ds} \left(C_d^w S K_d - C_p^w \right) \\
\frac{\partial C_s^w}{\partial t} = a_{ds} \left(C_d^w S K_d - C_p^w \right)
\end{cases}$$
(6.78)

Якщо привести систему (6.78) до вигляду (6.78) та позначити за p_1 ймовірність адсорбції частинки, а за p_2 ймовірність десорбції, то отримаємо:

$$p_{1} = 1 - e^{-a_{ds}SK_{d}\Delta t}$$

$$p_{2} = 1 - e^{-a_{ds}\Delta t}$$
(6.79)

Використовуючи отримані значення ймовірностей адсорбції та десорбції та алгоритм розв'язку рівняння розпаду, можна отримати розв'язок рівняння (6.78), тобто змоделювати обмінні члени рівняння (6.1,6.2) для випадку одної фракції намулів.

6.8.5 Ймовірність фазового переходу частинки як розв'язок рівняння Колмогорова

В розділі (6.8.3) був представлений та проаналізований алгоритм розв'язку рівняння розпаду. Ймовірність зникнення частинки було виведено з аналітичного розв'язку рівняння, та показано, що запропонований чисельний алгоритм приводить до випадкового розв'язку з матсподіванням, що рівне точному аналітичному розв'язку.

В розділі (6.8.4) був даний алгоритм розв'язку систему двох рівнянь фазових трансформацій. Алгоритм заснований на ймовірності переходу частинки з одного стану в інший і навпаки. Значення ймовірностей переходу частинки отримані по аналогії з рівнянням розпаду, але, строго кажучи, ці ймовірності не було виведено аналітично. В роботі, наприклад, [249] було показано, що даний алгоритм ефективно розв'язує систему рівнянь (6.81) і експериментально показано, що чисельний розв'язок збігається до аналітичного із збільшенням кількості частинок. Але залишається питання як подібний алгоритм узагальнити для випадку коли станів частинки може бути більше двох. Наприклад, якщо разом з адсорбцією-десорбцією розглянути радіоактивний розпад та/або дифузійний обмін з дном. Тоді правильний чисельний алгоритм та вираз для ймовірностей переходу стає неочевидним. Даний розділ показує як можна отримати ймовірності переходу для всіх станів частинки користуючись рівнянням Колмогорова. Такі ймовірності можна моделювати по схемі неперервних марківських процесів. Цей метод застосовується для систем, що змінюють свій стан у випадкові моменти часу. В цьому розділі застосовується загальний підхід для розрахунку ймовірностей зміни станів речовини, що описаний в розділі 2.2.

Рівняння розпаду (6.45) та рівняння фазових перетворень (6.81) при застосуванні методу частинок можна розглядати як рівняння Колмогорова для опису ймовірностей стану частинки. Одержавши аналітичні розв'язки такої системи з початковими умовами $p_i(0) = 1$ можна отримати ймовірності фазових переходів за формулою (2.64).

Покажемо для прикладу спочатку застосування рівняння Колмогорова для моделювання рівняння розпаду (6.45). Маємо два стани частинки: S_1 – жива, та S_2 – мертва частинка. Тоді рівняння, що описують ймовірності перебування в обох станах будуть такими:

$$\begin{cases} \frac{\partial p_1}{\partial t} = -\lambda p_1(t) \\ \frac{\partial p_2}{\partial t} = \lambda p_1(t) \end{cases}$$
(6.80)

Розв'язком такої системи буде $p_1(t) = e^{-\lambda t}$, тоді ймовірність "смерті" такої частинки за час Δt дорівнює $1 - p_1 \Delta t = 1 - e^{-\lambda \Delta t}$, що збігається з виразом, отриманим в розділі (6.8.3).

Перейдемо тепер до системи двофазних перетворень (6.81). Граф такої



Рисунок 6.27: Граф двофазних перетворень станів

системи показаний на рис. 6.27. Рівняння Колмогорова для такого графу:

$$\begin{cases} \frac{\partial p_1}{\partial t} = -\alpha p_1 + \beta p_2 \\ \frac{\partial p_2}{\partial t} = \alpha p_1 - \beta p_2 \end{cases}$$
(6.81)

Розв'язком такої системи при початкових умовах $p_1(0) = p_{10}, p_2(0) = p_{20}$ буде:

$$p_{1}(t) = \frac{\beta}{\alpha + \beta} \left(\frac{\alpha p_{10} - \beta p_{20}}{\beta} e^{-(\alpha + \beta)t} + (p_{10} + p_{20}) \right)$$

$$p_{2}(t) = \frac{\alpha}{\alpha + \beta} \left(\frac{\beta p_{20} - \alpha p_{10}}{\alpha} e^{-(\alpha + \beta)t} + (p_{10} + p_{20}) \right)$$
(6.82)

Отримавши розв'язок при початкових умовах $p_1(0) = 1$, $p_2(0) = 0$, отримаємо ймовірність переходу частинки з стану 1 в стан 2 за час Δt :

$$p_{12} = 1 - p_1(\Delta t) = \frac{\alpha}{\alpha + \beta} \left(1 - e^{-(\alpha + \beta)\Delta t} \right)$$
(6.83)

А отримавши розв'язок при початкових умовах $p_1(0) = 0, p_2(0) = 1$, отримаємо ймовірність переходу частинки з стану 2 в стан 1 за час Δt :

$$p_{21} = 1 - p_2(\Delta t) = \frac{\beta}{\alpha + \beta} \left(1 - e^{-(\alpha + \beta)\Delta t} \right)$$
(6.84)

Бачимо, що формули (6.83,6.84) досить сильно відрізняються від формул (6.79) ($p_{12} = (1 - e^{-\alpha \Delta t})$, $p_{21} = (1 - e^{-\beta \Delta t})$). Причина того, що підхід (6.79) застосовується на практиці та дає вірні результати криється в наступному. Якщо ми розкладемо експоненту в ряд по Δt та відкинемо члени другого порядку малості, то для обох формул (6.83,6.84) та (6.79) ми отримаємо однакове наближення:

$$p_{12}(\Delta t) \approx \alpha \Delta t$$

$$p_{21}(\Delta t) \approx \beta \Delta t$$
(6.85)

Рівняння (6.85) є найпростішою чисельною схемою для розв'язку рівняння Колмогорова (6.81), що випливає з означення щільності ймовірності переходу (2.62). Тому чисельний розв'язок, отриманий по такій схемі буде збігатися до точного при $\Delta t \rightarrow 0$. Формули (6.79) також є чисельною схемою що приводить в границі до точного розв'язку. А рівняння (6.83,6.84) є не чисельною схемою, а точним розв'язком рівняння Колмогорова, тому мають не залежати від часового кроку.

Порівняємо тепер три різних формулювання ймовірностей переходу, що задаються формулами (6.85), (6.79) та (6.83,6.84). Для цього розв'яжемо рівняння адсорбції радіонукліду на завислих намулах (6.78) використовуючи ці три методи. Будемо використовувати такі чисельні параметри. $K_d = 2 M^3 / \kappa \Gamma$, $S = 1 \kappa \Gamma / M^3$, $a_{12} = 1.16 \cdot 10^{-5} c^{-1}$, $\alpha = a_{12} K_d S$, $\beta = a_{12}$. Тоді можемо побудувати залежність ймовірності переходу p_{12} від часового кроку Δt . Графік такої залежності показаний на рис. (6.28).

На рис. (6.28) цифрою 1 позначена формула (6.85). Це лінійна функція, що має обмеження по часовому кроку, так як рано чи пізно вона досягне одиниці і тоді моделювання за цією формулою втратить сенс. Цифрою 2 позначена ймовірність, розрахована за формулою (6.79). Видно, що на початковому проміжку часу вона близька до лінійної функції, але з часом також прямує до 1. Цифрою 3 позначена ймовірність, розрахована за формулою (6.83), яка, як ми стверджуємо, є найбільш точною та придатною для будь-яких часових кроків.

На рис. 6.29 показано результат моделювання рівняння (6.78) трьома методами при використанні часового кроку 100с та 10000с з загальною кількістю



Рисунок 6.28: Залежність ймовірності переходу від часового кроку для трьох різних виразів ймовірностей



Рисунок 6.29: Моделювання адсорбції-десорбції радіонукліду, при використанні часового кроку 100 сек. (зліва); 10000 сек. (справа).

частинок 10000. Видно, що результати для всіх методів добре узгоджені між собою та з точним розв'язком. Це можна було передбачити, з огляду на те, що для таких часових кроків ймовірності переходу близькі між собою, що видно з рис. (6.28). Але з цього ж рисунку видно, що слід очікувати значних розбіжностей при більших часових кроках.

На рис. 6.30 показано результати моделювання при часовому кроці 40000с. З рисунку видно, що лінійна апроксимація ймовірностей приводить до вели-



Рисунок 6.30: Моделювання адсорбції-десорбції радіонукліду, при використанні часового кроку 40000 сек.

ких похибок на початку моделювання. Формули (6.79) приводять до систематичного відхилення від точного розв'язку, а формули (6.83, 6.84), як і передбачувалось залишились такими ж точними, як і для менших часових кроків. На перший погляд може статися дивним, що проста лінійна функція з часом дає більш точний розв'язок, ніж більш точні формули (6.79). Це можна пояснити тим, що граничний рівноважний стан системи залежить не стільки від точності виразів для ймовірностей, скільки від відношення ймовірностей p_{12}/p_{21} . Це відношення у випадку лінійної апроксимації співпадає з точним аналітичним, тому виводить систему на точний рівноважний стан. У випадку використання формул (6.79) $\lim_{\Delta t\to\infty} p_{12}/p_{21} = 1$, що приведе до того, що чисельний розв'язок буде все більше відхилятись від правильного рівноважного із збільшенням часового кроку. Можна зробити висновок,що використання для таких систем формул (6.79) не є виправданим, тому що при маленьких часових кроках розв'язок збігається з більш простими формулами, а при великих кроках може призводити до значних похибок. Формули (6.83, 6.84) є універсальними і можуть бути використані при будь-яких Δt

6.8.6 Оцінка точності розв'язання рівнянь адсорбції-десорбції стохастичним методом

Розглянемо чисельний розв'язок системи рівнянь (6.81), що знаходиться стохастичним методом за допомогою ймовірностей переходів між двома станами, які задаються формулами (6.83,6.84). Кожна частинка в кожний момент часу може перебувати в одному з двох станів: в розчиненому або адсорбованому. Нехай в початковий момент часу всі n частинок перебувають в першому стані. Розглянемо розподіл ймовірностей станів одної частинки і його зміну з часом. Позначимо $P_1^{(j)}$ ймовірність перебування частинки після j часових кроків в розчиненому стані (1-й стан), а $P_2^{(j)}$ – ймовірність перебування частинки після j часових кроків в адсорбованому стані (2-й стан). Так як частинка обов'язково знаходиться в якомусь з двох станів в будь-який момент часу, то

$$\forall j \ge 0, \qquad P_1^{(j)} + P_2^{(j)} = 1$$
 (6.86)

Згідно обраних початкових умов:

$$P_1^{(0)} = 1 \qquad P_2^{(0)} = 0 \tag{6.87}$$

Якщо частинка в якийсь момент часу перебуває в першому стані, то з ймовірністю p_1 , що визначається формулою (6.83) вона переходить до другого стану, а з ймовірністю $q_1 = 1 - p_1$ залишається в першому стані. Якщо частинка в якийсь момент часу перебуває в другому стані, то з ймовірністю p_2 , що визначається формулою (6.84) вона переходить до першого стану, а з ймовірністю $q_2 = 1 - p_2$ залишається в другому стані. В такому випадку можна виразити ймовірності перебування частинки в кожному стані в поточний момент часу через ймовірності з попереднього моменту часу через формулу повної ймовірності:

$$P_1^{(j)} = P_1^{(j-1)} q_1 + P_2^{(j-1)} p_2$$

$$P_2^{(j)} = P_1^{(j-1)} p_1 + P_2^{(j-1)} q_2$$
(6.88)

Врахувавши, що $P_1^{(j)} + P_2^{(j)} = 1$, отримаємо:

$$P_1^{(j)} = P_1^{(j-1)} q_1 + \left(1 - P_1^{(j-1)}\right) p_2 = P_1^{(j-1)} (q_1 - p_2) + p_2$$

$$P_2^{(j)} = \left(1 - P_2^{(j-1)}\right) p_1 + P_2^{(j-1)} q_2 = P_2^{(j-1)} (q_2 - p_1) + p_1$$
(6.89)

Тепер, використовуючи початкові умови послідовно знайдемо:

$$P_{1}^{(1)} = q_{1}, \qquad P_{1}^{(2)} = q_{1}(q_{1} - p_{2}) + p_{2}, \qquad P_{1}^{(3)} = q_{1}(q_{1} - p_{2})^{2} + p_{2}(q_{1} - p_{2}) + p_{2}$$

$$P_{1}^{(j)} = q_{1}(q_{1} - p_{2})^{j-1} + p_{2}(q_{1} - p_{2})^{j-2} + \dots + p_{2}(q_{1} - p_{2}) + p_{2}$$

$$P_{2}^{(1)} = p_{1}, \qquad P_{2}^{(2)} = p_{1}(q_{2} - p_{1}) + p_{1}, \qquad P_{2}^{(3)} = p_{1}(q_{2} - p_{1})^{2} + p_{1}(q_{2} - p_{1}) + p_{1}$$

$$P_{2}^{(j)} = p_{1}(q_{2} - p_{1})^{j-1} + p_{1}(q_{2} - p_{1})^{j-2} + \dots + p_{1}(q_{2} - p_{1}) + p_{1}$$

$$(6.90)$$

Спростивши останню рівність за допомогою формули геометричної прогресії, отримаємо

$$P_2^{(j)} = \frac{p_1}{1 - (q_2 - p_1)} \left(1 - (q_2 - p_1)^j \right)$$

$$P_1^{(j)} = 1 - P_2^{(j)}$$
(6.91)

або

$$P_2^{(j)} = \frac{p_1}{p_1 + p_2} \left(1 - (1 - p_1 - p_2)^j \right)$$

$$P_1^{(j)} = 1 - P_2^{(j)}$$
(6.92)

Тепер повернемося до розгляду n частинок. Маємо n частинок, кожна з яких з ймовірністю $P_1^{(j)}$ знаходиться в першому стані, і з ймовірністю $P_2^{(j)}$ в другому стані. Тобто в кожний момент часу можемо побудувати розподіл кількості частинок в кожному стані згідно схеми незалежних дослідів Бернуллі. Розподіл ймовірності кількості частинок, що перебувають в стані 1 дорівнює:

$$P(n_1 = k) = C_n^k P_1^{(j)^k} P_2^{(j)^{n-k}}$$
(6.93)

А розподіл ймовірності кількості частинок, що перебувають в стані 2 дорівнює:

$$P(n_2 = k) = C_n^k P_2^{(j)^k} P_1^{(j)^{n-k}}$$
(6.94)

Математичне сподівання та середньоквадратичне відхилення для біноміального розподілу добре відомі. Підставивши вирази для ймовірностей з (6.83,6.84), отримаємо вираз для середньоквадратичного відхилення:

$$\bar{\sigma}_{1}(t) = \sqrt{\frac{P_{1}^{(j)}P_{2}^{(j)}}{n}} = \frac{1}{\alpha + \beta}\sqrt{\frac{\beta}{n}e^{-(\alpha + \beta)t}\left(1 - e^{-(\alpha + \beta)t}\right)}$$

$$\bar{\sigma}_{2}(t) = \sqrt{\frac{P_{1}^{(j)}P_{2}^{(j)}}{n}} = \frac{1}{\alpha + \beta}\sqrt{\frac{\alpha}{n}e^{-(\alpha + \beta)t}\left(1 - e^{-(\alpha + \beta)t}\right)}$$
(6.95)

Відмітимо, що, як і у випадку з рівнянням розпаду, середньоквадратичне відхилення не залежить від часового кроку, а залежить лише від загального часу моделювання. Ця властивість випливає з того, що при моделюванні було використано точні розв'язки відповідних рівнянь Колмогорова. З формул (6.96) випливає, що максимального значення середньоквадратичне відхилення набуває, коли $e^{-(\alpha+\beta)t} = \frac{1}{2}$, тобто $t = \ln 2/(\alpha+\beta)$. Тоді отримаємо оцінку для максимального середньоквадратичного відхилення незалежно від часу моделювання:

$$\bar{\sigma}_{1,max}(t) = \frac{1}{2(\alpha+\beta)} \sqrt{\frac{\beta}{n}}$$

$$\bar{\sigma}_{2,max}(t) = \frac{1}{2(\alpha+\beta)} \sqrt{\frac{\alpha}{n}}$$

(6.96)
6.8.7 Моделювання системи рівнянь розпаду, коли кількість станів речовини більше двох

Побудуємо тепер алгоритм розв'язку задачі, що враховує сорбцію-десорбцію та радіоактивний розпад одночасно. Граф такої системи зображений на рис. 6.31. Станом S₁ позначимо розчинений у воді радіонуклід, S₂ - адсорбована частинка, S₃ - мертва частинка. Рівняння Колмогорова для такого процесу має вигляд:

$$\begin{cases} \frac{\partial p_1}{\partial t} = -\alpha p_1 + \beta p_2 - \lambda p_1 \\ \frac{\partial p_2}{\partial t} = \alpha p_1 - \beta p_2 - \lambda p_2 \\ \frac{\partial p_3}{\partial t} = \lambda p_1 + \lambda p_2 \end{cases}$$
(6.97)

Розв'язком такої системи при початкових умовах $p_1(0) = p_{10}, p_2(0) = p_{20}, p_3(0) = 0$ є:

$$p_{1}(t) = \frac{\beta}{\alpha + \beta} \left\{ \frac{\alpha p_{10} - \beta p_{20}}{\beta} e^{-(\alpha + \beta + \lambda)t} + (p_{10} + p_{20})e^{-\lambda t} \right\}$$

$$p_{2}(t) = \frac{\alpha}{\alpha + \beta} \left\{ \frac{\beta p_{20} - \alpha p_{10}}{\alpha} e^{-(\alpha + \beta + \lambda)t} + (p_{10} + p_{20})e^{-\lambda t} \right\}$$

$$p_{3}(t) = 1 - e^{-\lambda t}$$
(6.98)

Якщо система знаходиться в стані S_1 , то ймовірності переходів знаходяться з умов $p_{10} = 1, p_{20} = 0$, отримаємо:

$$1 - p_1(\Delta t) = \frac{\alpha}{\alpha + \beta} \left(\frac{\alpha + \beta(1 - e^{-\lambda \Delta t})}{\alpha} - e^{-(\alpha + \beta + \lambda)\Delta t} \right)$$

$$p_{12} = p_2(\Delta t) = \frac{\alpha}{\alpha + \beta} \left(e^{-\lambda \Delta t} - e^{-(\alpha + \beta + \lambda)\Delta t} \right)$$

$$p_{13} = p_3(\Delta t) = 1 - e^{-\lambda \Delta t}$$

(6.99)

Тут $1 - p_1(\Delta t)$ - ймовірність того, що частинка змінить свій стан протягом часу Δt , якщо вона спочатку перебувала в стані S_1 . $p_{12}(\Delta t)$ - ймовірність



Рисунок 6.31: Граф розподілу ймовірностей для сорбції-десорбції та розпаду переходу в адсорбований стан, $p_{13}(\Delta t)$ – ймовірність зникнути в результаті розпаду.

Якщо система знаходиться в стані S_2 , то ймовірності переходів знаходяться з умов $p_{10} = 0, \, p_{20} = 1$, отримаємо:

$$1 - p_2(\Delta t) = \frac{\beta}{\alpha + \beta} \left(\frac{\beta + \alpha(1 - e^{-\lambda \Delta t})}{\beta} - e^{-(\alpha + \beta + \lambda)\Delta t} \right)$$

$$p_{21} = p_1(\Delta t) = \frac{\beta}{\alpha + \beta} \left(e^{-\lambda \Delta t} - e^{-(\alpha + \beta + \lambda)\Delta t} \right)$$

$$p_{23} = p_3(\Delta t) = 1 - e^{-\lambda \Delta t}$$

(6.100)

Тут $1 - p_2(\Delta t)$ - ймовірність того, що частинка змінить свій стан протягом часу Δt , якщо вона спочатку перебувала в стані S_2 . $p_{21}(\Delta t)$ – ймовірність переходу в розчинений стан, $p_{23}(\Delta t)$ – ймовірність зникнути в результаті розпаду.

6.8.8 Адсорбція/десорбція при багатофракційних намулах

Якщо стоїть задача змоделювати обмін радіонуклідами між водою та багатофракційними намулами, з кількістю фракційних розмірів *n*, то маємо розв'язати систему з *n* + 1 рівнянь:

$$\begin{cases}
\frac{\partial C_d^w}{\partial t} = -a_{ds} \left(C_d^w \sum_{i=1}^n S_{p,i} K_{d,i} - C_p^w \right) - \lambda C_d^w \\
\frac{\partial C_{p,i}^w}{\partial t} = a_{ds} \left(C_d^w S_{p,i} K_{d,i} - C_{p,i}^w \right) - \lambda C_{p,i}^w, \quad i = \overline{1, n}
\end{cases}$$
(6.101)



Рисунок 6.32: Граф розподілу ймовірностей для багатофракційної сорбції-десорбції та розпаду

де $C_p^w = \sum_{i=1}^n C_{p,i}^w$. Граф такої системи зображено на рис. 6.32. S_0 -розчинений у воды стан, S_i , $i = \overline{1, n}$ – адсорбований на *i*-му класі намулів, S_{n+1} -мертва внаслідок розпаду частинка. Рівняння Колмогорова для цього графа виглядає таким чином:

$$\begin{cases} \frac{\partial p_0}{\partial t} = -\sum_{i=1}^n \alpha_i p_0 + \beta \sum_{i=1}^n p_i - \lambda p_0 \\ \frac{\partial p_i}{\partial t} = \alpha_i p_0 - \beta p_i - \lambda p_i, \qquad i = \overline{1, n} \\ \frac{\partial p_{n+1}}{\partial t} = \lambda \left(p_0 + \sum_{i=1}^n p_i \right) \end{cases}$$
(6.102)

Тут $\alpha_i = a_{ds}S_{p,i}K_{d,i}, \qquad \beta = a_{ds}$. Позначимо $\alpha = \sum_{i=1}^n \alpha_i, \qquad P_s = \sum_{i=1}^n p_i$. Для розв'язання системи (6.101) перейдемо спочатку до системи з двох рівнянь відносно повної концентрації радіонуклідів, адсорбованих на всіх фракціях намулів. Так як рівняння лінійні, то склавши n рівнянь для $C_{p,i}^w$, отримаємо:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_d^w}{\partial t} = -a_{ds} \left(C_d^w \sum_{i=1}^n S_{p,i} K_{d,i} - C_p^w \right) - \lambda C_d^w \\ \frac{\partial C_p^w}{\partial t} = a_{ds} \left(C_d^w \sum_{i=1}^n S_{p,i} K_{d,i} - C_p^w \right) - \lambda C_p^w \end{cases}$$
(6.103)

Від цієї системи перейдемо до відповідного рівняння Колмогорова.

$$\begin{cases} \frac{\partial p_0}{\partial t} = -\alpha p_0 + \beta P_s - \lambda p_0 \\ \frac{\partial P_s}{\partial t} = \alpha p_0 - \beta P_s - \lambda P_s \\ \frac{\partial p_{n+1}}{\partial t} = \lambda \left(p_0 + P_s \right) \end{cases}$$
(6.104)

Розв'язок такої системи рівнянь задається рівняннями (6.98). Та ймовірностями переходів (6.99,6.100). Єдина відмінність полягає в тому, що після розв'язку системи (6.104), потрібно повернутися до системи (6.102) щоб знайти ймовірності p_i переходів до кожної окремої фракції завислих намулів. Скориставшись отриманими розв'язками (6.98) другим співвідношенням системи (6.102), щоб знайти $p_i(t)$, можемо виписати розв'язок рівняння Колмогорова з початковими умовами $p_0(0) = p_{00}, p_i(0) = p_{i0}, P_s(0) = \sum p_{i0} = P_{s0}, p_{n+1}(0) = 0$:

$$p_{0}(t) = \frac{\beta}{\alpha + \beta} \left(\frac{\alpha p_{00} - \beta P_{s0}}{\beta} e^{-(\alpha + \beta + \lambda)t} + (p_{00} + P_{s0})e^{-\lambda t} \right)$$

$$P_{s}(t) = \frac{\alpha}{\alpha + \beta} \left(\frac{\beta P_{s0} - \alpha p_{00}}{\alpha} e^{-(\alpha + \beta + \lambda)t} + (p_{00} + P_{s0})e^{-\lambda t} \right)$$

$$p_{i}(t) = \frac{\alpha_{i}}{\alpha(\alpha + \beta)} \left((\beta P_{s0} - \alpha p_{00})e^{-(\alpha + \beta + \lambda)t} + \alpha(p_{00} + P_{s0})e^{-\lambda t} \right) + \left(\frac{\beta P_{s0} - \alpha p_{00}}{\alpha} \right) e^{-(\alpha + \beta + \lambda)t}$$

$$p_{i}(t) = \frac{\alpha_{i}}{\alpha(\alpha + \beta)} \left((\beta P_{s0} - \alpha p_{00})e^{-(\alpha + \beta + \lambda)t} + \alpha(p_{00} + P_{s0})e^{-\lambda t} \right) + \left(\frac{\beta P_{s0} - \alpha p_{00}}{\alpha} \right) e^{-(\lambda + \beta)t}$$

$$p_{i}(t) = \frac{\alpha_{i}}{\alpha(\alpha + \beta)} \left((\beta P_{s0} - \alpha p_{00})e^{-(\alpha + \beta + \lambda)t} + \alpha(p_{00} + P_{s0})e^{-\lambda t} \right) + \left(\frac{\beta P_{s0} - \alpha p_{00}}{\alpha} \right) e^{-(\alpha + \beta + \lambda)t}$$

 $p_{n+1}(t) = 1 - e^{-\lambda t}$

Тепер, користуючись отриманими розв'язками знайдемо ймовірності переходів частики. Якщо система знаходиться в стані S₀ (частинка розчинена у воді), то ймовірності переходів знаходяться з умов $p_{00} = 1, p_{i0} = 0$, отримаємо:

$$1 - p_0(\Delta t) = \frac{\alpha}{\alpha + \beta} \left(\frac{\alpha + \beta(1 - e^{-\lambda\Delta t})}{\alpha} - e^{-(\alpha + \beta + \lambda)\Delta t} \right)$$

$$p_{0i} = p_i(\Delta t) = \frac{\alpha_i}{\alpha + \beta} e^{-\lambda\Delta t} \left(1 - e^{-(\alpha + \beta)\Delta t} \right)$$

$$p_{0,n+1} = p_{n+1}(\Delta t) = 1 - e^{-\lambda\Delta t}$$

(6.106)

Тут $1 - p_0(\Delta t)$ - ймовірність того, що частинка змінить свій стан протягом часу Δt , якщо вона спочатку перебувала в стані S_0 . $p_i(\Delta t)$ – ймовірність переходу в адсорбований стан, на завислий намул класу i, $p_{n+1}(\Delta t)$ – ймовірність зникнути в результаті розпаду.

Якщо система знаходиться в стані $S_i, i = \overline{1, n}$, то ймовірності переходів знаходяться з умов $p_{00} = 0, p_{i0} = 1, p_{j0} = 0, j \neq i$, тоді одержимо:

$$1 - p_{i}(\Delta t) = \frac{\beta}{\alpha + \beta} \left(\frac{\beta + \alpha(1 - \frac{\alpha_{i}}{\alpha}e^{-\lambda\Delta t})}{\beta} - \frac{\alpha_{i}}{\alpha}e^{-(\alpha + \beta + \lambda)\Delta t} \right) + \left(\frac{\alpha_{i}}{\alpha} - 1\right)e^{-(\lambda + \beta)\Delta t}$$

$$p_{i0} = p_{0}(\Delta t) = \frac{\beta}{\alpha + \beta}e^{-\lambda\Delta t} \left(1 - e^{1 - (\alpha + \beta)\Delta t}\right)$$

$$p_{i}(\Delta t) = \frac{\alpha_{j}}{(\alpha + \beta)}e^{-\lambda\Delta t} \left(1 + \frac{\beta}{\alpha}e^{-(\alpha + \beta)\Delta t}\right) + e^{-\lambda\Delta t} \left(1 - \frac{\alpha_{j}}{\alpha}\right)e^{-\beta\Delta t}$$

$$p_{ij} = p_{j}(\Delta t) = \frac{\alpha_{j}}{(\alpha + \beta)}e^{-\lambda\Delta t} \left(1 + \frac{\beta}{\alpha}e^{-(\alpha + \beta)\Delta t}\right) - e^{-\lambda\Delta t}\frac{\alpha_{j}}{\alpha}e^{-\beta\Delta t}$$

$$p_{i,n+1} = p_{n+1}(\Delta t) = 1 - e^{-\lambda\Delta t}$$
(6.107)

Тут $1 - p_i(\Delta t)$ - ймовірність того, що частинка змінить свій стан протягом часу Δt , якщо вона спочатку перебувала в стані S_i . $p_0(\Delta t)$ – ймовірність переходу в розчинений стан, $p_{n+1}(\Delta t)$ – ймовірність зникнути в результаті розпаду, $p_i(\Delta t)$ – ймовірність залишитися в стані S_i , $p_j(\Delta t)$ – ймовірність переходу в адсорбований стан на інший клас завислого намулу j. На перший погляд може здатися дивним наявність переходу p_{ij} , тому що в графі нашої системи (рис. 6.32) переходи між різними класами намулів не передбачені. Але для скінченого проміжку часу Δt частинка може встигнути перейти до розчиненого стану, а потім, вже з нього, до будь-якого класу намулів. Тому існує ненульова ймовірність $p_j(\Delta t)$ того, що частинка за час Δt перейде з адсорбованого класу *i* на клас *j*.

Отже, незалежно від того в якому стані S_i знаходиться частинка, при розв'язку задачі адсорбції на багатофракційних намулах можна знати ймовірності перебування у всіх інших класах (та в класі S_i також) на наступному часовому кроці $p_i(\Delta t)$, $i = \overline{0, n+1}$. Причому $\sum_{i=0}^{n+1} p_i(\Delta t) = 1$. Тепер задача зводиться до того, що із заданими ймовірностями розподілити частинку по всім можливим класам.

Для моделювання ймовірностей розподілу частинки введемо послідовність чисел:

$$r_i: \quad r_0 = p_0, r_1 = r_0 + p_1, \dots, r_i = r_{i-1} + p_i, \dots, \beta_{n+1} = \beta_1 + p_{n+1} = 1$$
 (6.108)

Числа r_i ділять відрізок [0;1] на відрізки довжиною p_i . Тепер, для того, щоб визначити до якої саме фракції перейде частинка з класу i, необхідно згенерувати випадкове число $r \in (0;1)$ і визначити індекс j, при якому $r_{j-1} < r < r_j$. Індекс j буде номером стану S_j до якого перейде частинка. Алгоритм адсорбції радіонуклідів багатофракційними намулами методом частинок побудований.

З практичної точки зору, інколи зручно спочатку знайти ймовірність того, що частинка змінить свій стан і розіграти спочатку цю подію. Якщо виявилось, що частинка стану не змінює, то нічого більше робити не потрібно. Якщо ж виявилось, що треба змінити стан частинки, то, щоб визначити в який саме стан частинка перейде, розглядаються нормовані ймовірності $p'_j = p_j/(1 - p_i), \quad i \neq j$. З нормованими ймовірностями p'_j будується послідовність чисел згідно (6.108) з кількістю відрізків на один менше, бо ми виключили з розгляду стан i.



Рисунок 6.33: Схема алгоритму дифузії між поровою водою та водою

6.8.9 Обмін між поровою водою та водним стовпом

Розглянемо як задовольнити методом частинок граничні умови (6.18) та відповідне рівняння балансу у верхньому шарі порової води (6.7). Запишемо граничні умови (6.18) та рівняння (6.7) відкинувши в них все, крім дифузійного обміну:

$$\begin{cases} \nu_T \frac{\partial C_d^w}{\partial z} = \varepsilon_1 W_{pw}^{(0,1)} \left(C_d^w - C_{d,1}^b \right) \\ \frac{\partial Z_1 \varepsilon_1 C_{d,1}^b}{\partial t} = \varepsilon_1 W_{pw}^{(0,1)} \left(C_d^w (-H) - C_{d,1}^b \right) \end{cases}$$
(6.109)

Запишемо тепер перше рівняння (граничну умову) цієї системи у вигляді балансового рівняння з розподіленим джерелом у придонному шарі, товщиною Z_1 . Тобто, розглядаємо два прилеглих один до одного шари, товщиною Z_1 , верхній з яких належить воді, а нижній – поровій воді у дні. Границя між шарами – це границя між водою та дном (рис. 6.33). Система рівнянь матиме вигляд:

$$\begin{cases}
\frac{\partial C_d^w}{\partial t} = \frac{\varepsilon_1}{Z_1} W_{pw}^{(0,1)} \left(C_d^w - C_{d,1}^b \right) \\
\frac{\partial \varepsilon_1 C_{d,1}^b}{\partial t} = \frac{\varepsilon_1}{Z_1} W_{pw}^{(0,1)} \left(C_d^w (-H) - C_{d,1}^b \right)
\end{cases}$$
(6.110)

Таким чином, ми отримали систему з двох рівнянь розпаду, до розв'язку якої можна застосувати методи розділів 6.8.4,6.8.5. Алгоритм чисельного методу схематично зображений на рис. 6.33. Частинка, що потрапляє в придонний шар, товщиною Z_1 з ймовірністю p_{w_p} осідає на дно та стає частинкою порової води. Перебуваючи в придонному шарі, на кожному часовому кроці випадково розігрується чи осідає частинка на дно, чи залишається на місці. Така процедура відбувається до тих пір, поки частинка не осяде, або частинка не залишить придонний шар. Якщо частинка осіла на дно та перетворилась у порову воду, то на кожному часовому кроці з ймовірністю p_{p_w} ця частинка може відкріпитися від дна і стати розчиненим у придонному шарі радіонуклідом. Згідно розв'язку системи рівнянь двофазних перетворень (6.81), ймовірності фазових переходів системи (6.110) можна записати у вигляді формул (6.83,6.84):

$$p_{w_p} = \frac{1}{2} \left(1 - e^{-\frac{2\varepsilon_1}{Z_1} W_{pw}^{(0,1)} \Delta t} \right)$$

$$p_{p_w} = \frac{1}{2} \left(1 - e^{-\frac{2\varepsilon_1}{Z_1} W_{pw}^{(0,1)} \Delta t} \right)$$
(6.111)

З останнього рівняння випливає, що ймовірності переходу частинки з розчиненого у воді стану до порової води, та навпаки, рівні між собою. Якщо частинка, що представляє собою розчинений радіонуклід у воді, потрапляє до порової води, то вона рівноймовірно розподіляється у верхньому шарі ґрунту, товщиною Z_1 . Для цього вона отримує вертикальну координату $z = -rZ_1$, де r – рівномірно розподілена на [0; 1] випадкова величина. Якщо ж частинка, що представляє собою розчинений радіонуклід у поровій воді, потрапляє до придонного водного шару товщиною Z_1 , то вона рівномірно розподіляється у ньому. Для цього вона отримує вертикальну координату $z = rZ_1$, де r – рівномірно розподілена на [0; 1] випадкова величина. Зауважимо що система рівнянь (6.110) та відповідні ймовірності переходу отримані без урахування радіоактивного розпаду. Для урахування розпаду для визначення ймовірностей необхідно користуватись формулами (6.99,6.100).

6.8.10 Дифузія між поровою водою та водним стовпом з урахуванням сорбції-десорбції у придонному шарі.

Об'єднаємо тепер випадки, що розглянуті в розділах 6.8.8,6.8.9. Знайдемо розподіл ймовірності для частинки, що знаходиться в придонному шарі при наявності в ньому завислих намулів. По аналогії з попередніми розділами рівняння Колмогорова для цього випадку буде виглядати так:

$$\begin{cases} \frac{\partial p_0}{\partial t} = -\sum_{i=1}^n \alpha_i p_0 + \beta \sum_{i=1}^n p_i - \lambda p_0 - \gamma (p_0 - p_{n+2}) \\ \frac{\partial p_i}{\partial t} = \alpha_i p_0 - \beta p_i - \lambda p_i, \qquad i = \overline{1, n} \\ \frac{\partial p_{n+1}}{\partial t} = \lambda \left(p_0 + \sum_{i=1}^n p_i + p_{n+2} \right) \\ \frac{\partial p_{n+2}}{\partial t} = \gamma (p_0 - p_{n+2}) - \lambda p_{n+2} \end{cases}$$
(6.112)

Як і раніше позначимо $\alpha = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i$, $P_s = \sum_{i=1}^{n} p_i$ та перейдемо до рівняння для повної ймовірності адсорбції на всіх класах намулів.

$$\begin{pmatrix}
\frac{\partial p_0}{\partial t} = -\alpha p_0 + \beta P_s - \lambda p_0 - \gamma (p_0 - p_{n+2}) \\
\frac{\partial P_s}{\partial t} = \alpha p_0 - \beta P_s - \lambda P_s \\
\frac{\partial p_{n+1}}{\partial t} = \lambda (p_0 + P_s) \\
\frac{\partial p_{n+2}}{\partial t} = \gamma (p_0 - p_{n+2}) - \lambda p_{n+2}
\end{cases}$$
(6.113)

Така система зводиться до розв'язання кубічного характеристичного рівняння, розв'язок якого можна отримати, але він виглядає досить громіздким. Тому тут пропонується розв'язати останнє рівняння наближено, а для інших використати вже отримані аналітичні розв'язки. Будемо шукати розподіл ймовірностей для частинки, що знаходиться в розчиненому стані. Припустимо, що в початковий момент часу частинка з ймовірністю $\gamma \Delta t$ перейде до стану S_{n+2} , тобто до стану розчиненого у поровій воді, і повернутися протягом часу Δt ця частинка не може. Таким чином ми виключаємо з розгляду останнє рівняння та останній член першого рівняння. Для перших двох рівнянь можна отримати аналітичний розв'язок, що задається формулами (6.105). Щоб знайти розподіл ймовірностей для розчиненої частинки, покладемо початкові умови $p_{00} = 1 - \gamma \Delta t$, $P_{s0} = 0$. Тоді отримаємо розв'язок:

$$p_{0}(\Delta t) = \frac{\beta}{\alpha + \beta} (1 - \gamma \Delta t) e^{-\lambda \Delta t} \left(\frac{\alpha}{\beta} e^{-(\alpha + \beta)\Delta t} + 1 \right)$$

$$p_{0i} = p_{i}(\Delta t) = \frac{\alpha_{i}}{\alpha + \beta} (1 - \gamma \Delta t) e^{-\lambda \Delta t} \left(1 - e^{-(\alpha + \beta)\Delta t} \right)$$

$$p_{0,n+1} = p_{n+1}(\Delta t) = 1 - e^{-\lambda \Delta t}$$

$$p_{0,n+1} = p_{n+2}(\Delta t) = e^{-\lambda \Delta t} \gamma \Delta t$$
(6.114)

Цей розв'язок є наближеним в тому сенсі, що ймовірність переходу в порову воду була розрахована наближено з першим порядком точності. Інші ймовірності було знайдено з точних аналітичних розв'язків.

Якщо частинка знаходиться у адсорбованому стані, то можна вважати, що з поровою водою вона напряму не взаємодіє, тому можна користуватися розподілом ймовірностей, що задається формулами (6.107)

6.8.11 Адсорбція/десорбція в багатофракційних донних намулах

Адсорбція та десорбція, що відбувається в донних намулах між поровою водою та частинками намулів моделюється за таким же алгоритмом, як і для завислих намулів. Запишемо рівняння (6.7,6.8) залишивши лише обмінні члени:

$$\begin{cases}
\frac{\partial \varepsilon_1 C_d^b}{\partial t} = -a_{ds} \theta (1 - \varepsilon_1) \left(C_d^b \sum_{i=0}^n \rho_{s,i} \phi_{i,1} K_{d,i} - C_s^b \right) \\
\frac{\partial C_{s,i}^b}{\partial t} = a_{ds} \theta \left(K_{d,i} C_d^b - C_{s,i}^b \right), \quad i = \overline{1, n}
\end{cases}$$
(6.115)

Тут C_s^b має розмірність Бк/кг. Щоб побудувати чисельний алгоритм, перейдемо до концентрації $C_{s,i}^{'b} = (1 - \varepsilon) C_{s,i}^b \rho_{s,i} \phi_i$, що має розмірність Бк/м³. Та запишемо рівняння відносно повної адсорбованої концентрації $C_s^{'b} = \sum_{i=0}^n C_{s,i}^{'b}$:

$$\begin{cases} \frac{\partial \varepsilon C_d^b}{\partial t} = -a_{ds}\theta \left((1-\varepsilon)C_d^b \sum_{i=0}^n \rho_{s,i}\phi_i K_{d,i} - C_s'^b \right) \\ \frac{\partial C_{s,i}'^b}{\partial t} = a_{ds}\theta \left((1-\varepsilon)C_d^b \sum_{i=1}^n \rho_{s,i}\phi_i K_{d,i} - C_{s,i}'^b \right) \end{cases}$$
(6.116)

Тоді, згідно алгоритму розв'язання системи рівнянь розпаду методом частинок, отримаємо вирази для ймовірності адсорбції та десорбції:

$$p_{ads,b} = \frac{(1-\varepsilon)\sum_{i=0}^{n} \rho_{s,i}\phi_{i}K_{d,i}}{(1-\varepsilon)\sum_{i=0}^{n} \rho_{s,i}\phi_{i}K_{d,i} + 1} \left(1-e^{-a_{ds}\theta\left((1-\varepsilon)\sum_{i=0}^{n} \rho_{s,i}\phi_{i}K_{d,i} + 1\right)\Delta t}\right)$$

$$p_{des,b} = \frac{1}{(1-\varepsilon)\sum_{i=0}^{n} \rho_{s,i}\phi_{i}K_{d,i} + 1} \left(1-e^{-a_{ds}\theta\left((1-\varepsilon)\sum_{i=0}^{n} \rho_{s,i}\phi_{i}K_{d,i} + 1\right)\Delta t}\right)$$

$$(6.117)$$

Для частинки, для якої відбулася адсорбція з ймовірністю $p_{ads,b}$, необхідно, як і у випадку завислих намулів, визначити до якого класу намулів ця частинка потрапить. Для цього, по аналогії з формулою (6.106) розраховуються ймовірності r_i потрапляння на класс намулів i:

$$r_i \approx \frac{\rho_{s,i}\phi_i K_{d,i}}{\sum\limits_{i=0}^n \rho_{s,i}\phi_i K_{d,i}}$$
(6.118)

Далі розрахунок номеру і проводиться згідно алгоритму (6.108).

6.8.12 Обмін між швидкою і повільною реверсивними фазами

Обмін між швидкою та повільною реверсивними фазами у намулах описується однаковими рівняннями незалежно від того, розглядаємо ми завислі чи донні намули.

$$\begin{cases}
\frac{\partial C_{s,i,1}^b}{\partial t} = -a_{fs}C_{s,i,1}^b + a_{sf}\tilde{C}_{s,i,1}^b \\
\frac{\partial C_{s,i,1}^b}{\partial t} = a_{fs}C_{s,i,1}^b - a_{sf}\tilde{C}_{s,i,1}^b
\end{cases} (6.119)$$

Так як частинка при переході з швидкої фази у повільну і навпаки не змінює номер класу намулів, то ймовірності переходів визначається згідно алгоритму розв'язку системи з двох рівнянь розпаду:

$$p_{fs} = \frac{a_{fs}}{a_{fs} + a_{sf}} \left(1 - e^{-(a_{fs} + a_{sf})\Delta t} \right)$$

$$p_{sf} = \frac{a_{sf}}{a_{fs} + a_{sf}} \left(1 - e^{-(a_{fs} + a_{sf})\Delta t} \right)$$
(6.120)

Кожна частинка, що в поточний момент часу адсорбована на швидкій фазі намулів протягом часу Δt з ймовірністю p_{fs} переходить на повільну фазу, не змінюючи номеру класу намулів. Кожна частинка, що в поточний момент часу адсорбована на повільній фазі намулів протягом часу Δt з ймовірністю p_{sf} переходить на швидку фазу, не змінюючи номеру класу намулів.

6.8.13 Дифузія та біотурбація

Якщо донна частинка представляє собою розчинений у поровій воді радіонуклід, то вона може рухатись вертикально завдяки молекулярній дифузії порової води. На цей процес впливає звивистість, що виникає внаслідок присутності частинок намулів і подовженню дифузійного шляху. Алгоритм руху такої частинки, згідно методу випадкових блукань, виглядає таким чином:

$$z_i^{n+1} = z_i^n + R\sqrt{6\nu'_D \Delta t},$$
 (6.121)

де ефективний коефіцієнт дифузії ν'_D визначається за формулою (6.22), що включає в себе звивистість, а R- рівномірно розподілена на [-1;1] випадкова величина.

Якщо донна частинка представляє собою радіонуклід, що адсорбований частинкою намулу, то вона може рухатись завдяки біотурбації – механічному перемішуванню намулів донними організмами. В такому випадку рух частинку також описується методом випадкових блукань з коефіцієнтом дифузії, що рівний коефіцієнту біотурбації:

$$z_i^{n+1} = z_i^n + R\sqrt{6\nu_B'\Delta t},$$
 (6.122)

6.8.14 Загальний підхід до розрахунку ймовірностей переходу між станами радіонуклідів

Детально, кожен з видів фазових перетворень окремо був розглянутий в розділах 6.8.3-6.8.13. В цьому розділі дамо загальний підхід для алгоритму одночасного моделювання всіх видів фазових перетворень, що розглядаються. Нехай, маємо *n* класів розмірів намулів. Тоді кожна частинка, що представляє собою певну кількість радіонуклідів може належати одному з наступних класів:

1. Розчинена у воді

Один клас

2. Адсорбована на швидкому реверсивному стані завислого намулу класу і

п класів

3. Адсорбована на повільному реверсивному стані завислого намулу класу і

п класів

4. Розчинена у поровій воді

Один клас

ī

- 5. Адсорбована на швидкому реверсивному стані донного намулу класу і п класів
- Адсорбована на повільному реверсивному стані донного намулу класу і п класів

Якщо ще виокремити один клас мертвих частинок, тоді загалом маємо m = 4n + 3 можливих станів частинки. Тоді ймовірності перебування частинки в кожному можливому стані можна описати рівнянням Колмогорова, яке в загальному вигляді можна записати так:

$$\frac{dp_i}{dt} = \sum_{j=1}^m \alpha_{i,j} p_j, \qquad i = \overline{1,m}$$
(6.123)

де α_{i,j} визначаються коефіцієнтами диференціальних рівнянь, що описують фазові перетворення. Система рівнянь (6.123) є системою лінійних однорідних звичайних диференціальних рівнянь з постійними коефіцієнтами. Така система є інтегровною в елементарних функціях, або в квадратурах (34). Розв'язок такої системи зводиться до розв'язку характеристичного рівняння:

$$\Delta(\lambda) \equiv \begin{vmatrix} \alpha_{1,1} - \lambda & \alpha_{1,2} & \dots & \alpha_{1,m} \\ \alpha_{2,1} & \alpha_{2,2} - \lambda & \dots & \alpha_{2,m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{m,1} & \alpha_{m,2} & \dots & \alpha_{m,m} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$
(6.124)

Хоча матриця нашої системи буде дуже розріджена, все ж таки, в загальному випадку, аналітичний розв'язок виглядає дуже громіздким для практичного застосування. При розв'язанні рівняння можна розглядати повну

266



Рисунок 6.34: Граф всіх перетворень станів системи, не враховуючи розподіл по фракціям та радіоактивний розпад

концентрацію на намулах без розподілу по класам. Отримати розподіл по класам можна розв'язавши попередньо рівняння для повної концентрації. Розпад теж можна врахувати після отримання розв'язку системи без розпаду. Таким чином можно значно зменшити кількість рівнянь системи. Граф шести станів системи зображений на рис. 6.34.

Матриця такої системи є трьохдіагональною. Граф 6.34 представляє собою класичну задачу народження та загибелі із теорії марківських процесів, коли з кожного стану можливий перехід по ланцюжку тільки до сусідніх станів. На жаль така система може бути проінтегрована аналітично лише в деяких специфічних випадках коефіцієнтів системи. В загальному випадку розв'язок ще не знайдено.

Якщо записати рівняння 6.123 у матричному вигляді

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \mathbf{Q}\mathbf{P} \tag{6.125}$$

де *Q*-матриця системи. Тоді розв'язок такого рівняння можна записати в матричному вигляді.

$$\mathbf{P} = e^{\mathbf{Q}t}\mathbf{C} \tag{6.126}$$

де **С** – вектор констант інтегрування, $\mathbf{P}(0) = \mathbf{P}_0 \Rightarrow \mathbf{C} = \mathbf{P}_0$. Скориставшись означенням матричної експоненти, можемо записати розв'язок системи у вигляді нескінченного ряду:

$$\mathbf{P}(t) = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathbf{Q}^n t^n}{n!}\right) \mathbf{P}_0 \tag{6.127}$$

Цей ряд є збіжним для всіх t, тому для отримання бажаної точності, необхідно потрібну кількість разів перемножити матрицю системи. Для застосування в чисельних моделях можна використовувати розв'язок у вигляді ряду або будь-які інші чисельні розв'язки системи (6.123). Для того, щоб знайти розподіл ймовірностей $p_{i,j}$ для частинки, що знаходиться в стані S_i потрібно розв'язати систему (6.123) з початковими умовами $p_i(0) = 1$, $p_j(0) = 0$, $i \neq j$. Тобто, щоб знайти розподіл ймовірностей для всіх можливих станів частинки, нам необхідно знайти m розв'язків системи (6.123) з різними початковими умовами. Коефіцієнти системи та початкові умови є постійними, незмінними у часі. Тому ймовірності $p_{i,j}$ не будуть змінюватися протягом моделювання, якщо у чисельної моделі незмінний часовий крок Δt . Тому m^2 значень $p_{i,j}$ (несиметричну матрицю $m \times m$) можна знайти будь-яким чисельним методом розв'язку систем лінійних ЗДР. Як було показано в розділі 6.8.5 при достатньо малих кроках по часу прийнятною є чисельна схема

$$p_{i,j} = \alpha_{i,j} \Delta t, \qquad i \neq j$$

$$p_{i,i} = 1 + \alpha_{i,i} \Delta t \qquad (6.128)$$

що є чисельною схемою Ейлера першого порядку точності. Для збільшення точності розрахунку можна використовувати схеми більш високого порядку точності.

6.8.15 Загальний опис лагранжевого алгоритму для моделювання переносу, дифузії та зміни станів радіонуклідів у водному середовищі та намулах

Перенос та дифузія. Для розчинених у воді радіонуклідів та для радіонуклідів, що адсорбовані на зважених намулах, алгоритм переносу течіями та турбулентним перемішуванням такий же як і для, наприклад, зважених намулів. Алгоритм детально описаний в розділі.

Для розчинених у поровій воді радіонуклідів та для радіонуклідів, що адсорбовані на донних намулах, алгоритм руху завдяки молекулярній дифузії та біотурбації описаний в розділі 6.8.13

Перетворення стану. Загальний метод розрахунку ймовірностей переходів між станами частинки викладений в розділі 6.8.14. В цьому розділі дамо опис чисельного алгоритму для практичного застосування, що представляє собою одну з можливих чисельних схем розв'язку загальної системи (6.123).

Якщо частинка належить до класу **розчиненого у воді радіонукліду**, то вона може перейти до адсорбованому на завислому намулі стану, до порової води, якщо вона знаходиться в придонному шарі, або зникнути за рахунок розпаду. Введемо такі позначення: p_{dec} – ймовірність розпаду, визначається формулою (6.48), $q_{dec} = 1 - p_{dec}$; $p_{ads,w}$ – ймовірність адсорбції завислими намулами, визначається формулою (6.107), $q_{ads,w} = 1 - p_{ads,w}$; p_{dif} – ймовірність переходу до порової води, визначається формулою (6.111), $q_{dif} = 1 - p_{dif}$. Тому ймовірність того, що така частинка змінить свій стан дорівнює:

$$p = 1 - q_{dec}q_{ads,w}q_{dif} = 1 - e^{-\left(\lambda + a_{ds}\sum_{i=1}^{n} S_{p,i}K_{d,i} + \Lambda(z)\frac{\varepsilon_1}{Z_1}W_{pw}^{(0,1)}\right)\Delta t}$$

де $\Lambda(z) = 1$ в придонному шарі та $\Lambda(z) = 0$ в стовпі води, крім придонного шару. Якщо подія відбулася, тобто, частинка має змінити свій стан, то вона має розподілитися між іншими можливими станами у пропорціях:

$$\alpha_{1} = \frac{\lambda}{\lambda + a_{ds} \sum_{i=1}^{n} S_{p.i} K_{d,i} + \Lambda(z) \frac{\varepsilon_{1}}{Z_{1}} W_{pw}^{(0,1)}},$$

$$\alpha_{2} = \frac{a_{ds} \sum_{i=1}^{n} S_{p.i} K_{d,i}}{\lambda + a_{ds} \sum_{i=1}^{n} S_{p.i} K_{d,i} + \Lambda(z) \frac{\varepsilon_{1}}{Z_{1}} W_{pw}^{(0,1)}},$$

$$\alpha_{3} = \frac{\Lambda(z) \frac{\varepsilon_{1}}{Z_{1}} W_{pw}^{(0,1)}}{\lambda + a_{ds} \sum_{i=1}^{n} S_{p.i} K_{d,i} + \Lambda(z) \frac{\varepsilon_{1}}{Z_{1}} W_{pw}^{(0,1)}}$$

Тоді моделювання до якого саме стану перейде частинка проводиться згідно алгоритму (6.108), що описаний у розділі 6.8.8. В результаті такого алгоритму частинка або зникне в результаті розпаду, або адсорбується на завислих намулах, або перейде до порової води. Якщо частинка зникає, або перетворюється на порову воду, то алгоритм фазового переходу частики, що представляє собою розчинений у воді радіонуклід, закінчується. Якщо сталася подія переходу частинку до адсорбованого стану, то необхідно визначити до якого саме класу розмірів намулів потрапляє частинка. Для цього ще раз застосовується алгоритм (6.108) і визначається номер класу намулів на якому адсорбується розчинена у воді частинка радіонукліду. На цьому алгоритм зміну стану розчинених у воді частинок завершений.

Якщо частинка **адсорбована** на *i*-му класі **завислих** намулів у **швид**кому стані, то вона може перейти до розчиненого у воді вигляду за рахунок десорбції, або перейти у повільний реверсивний стан, або зникнути за рахунок розпаду. Ймовірність зміну стану такої частинки дорівнює:

$$p = 1 - e^{-(\lambda + a_{ds} + a_{fs})\Delta t}$$

Якщо відбулася подія зміни стану частинки, то що саме з нею сталося визначається з ймовірностей α_i :

$$\alpha_1 = \frac{\lambda}{\lambda + a_{ds} + a_{fs}}$$
$$\alpha_2 = \frac{a_{ds}}{\lambda + a_{ds} + a_{fs}}$$
$$\alpha_3 = \frac{a_{fs}}{\lambda + a_{ds} + a_{fs}}$$

Застосувавши алгоритм (6.108) визначимо в який саме стан переходить частинка.

Якщо частинка **адсорбована** на *i*-му класі **завислих** намулів на **повільній** фазі, то вона може перейти у швидку реверсивну фазу, або зникнути за рахунок розпаду. Ймовірність зміну стану такої частинки дорівнює:

$$p = 1 - e^{-(\lambda + a_{sf})\Delta t}$$

Якщо відбулася подія зміни стану частинки, то що саме з нею сталося визначається з ймовірностей α_i :

$$\alpha_1 = \frac{\lambda}{\lambda + a_{sf}}$$
$$\alpha_2 = \frac{a_{sf}}{\lambda + a_{sf}}$$

Застосувавши алгоритм (6.108) визначимо в який саме стан переходить частинка.

Якщо частинка належить до класу **розчиненого у поровій воді радіонукліду**, то вона може перейти до адсорбованому на донному намулі стану, до розчиненого у придонному шарі води, якщо вона знаходиться у верхньому донному шарі, або зникнути за рахунок розпаду. Ймовірність того, що така частинка змінить свій стан дорівнює:

$$p = 1 - e^{-\left(\lambda + a_{ds}\theta(1-\varepsilon)\sum_{i=0}^{n}\rho_{s,i}\phi_{i}K_{d,i} + \Lambda(z)\frac{\varepsilon_{1}}{Z_{1}}W_{pw}^{(0,1)}\right)\Delta t}$$

де $\Lambda(z) = 1$ у верхньому донному шарі та $\Lambda(z) = 0$ в інших донних шарах. Якщо подія відбулася, тобто, частинка має змінити свій стан, то вона має розподілитися між іншими можливими станами у пропорціях:

$$\alpha_1 = \frac{\lambda}{\lambda + a_{ds}\theta(1-\varepsilon)\sum_{i=0}^n \rho_{s,i}\phi_i K_{d,i} + \Lambda(z)\frac{\varepsilon_1}{Z_1}W_{pw}^{(0,1)}},$$

$$\alpha_2 = \frac{a_{ds}\theta(1-\varepsilon)\sum_{i=0}^n \rho_{s,i}\phi_i K_{d,i}}{\lambda + a_{ds}\theta(1-\varepsilon)\sum_{i=0}^n \rho_{s,i}\phi_i K_{d,i} + \Lambda(z)\frac{\varepsilon_1}{Z_1}W_{pw}^{(0,1)}},$$

$$\alpha_3 = \frac{\Lambda(z)\frac{\varepsilon_1}{Z_1}W_{pw}^{(0,1)}}{\lambda + a_{ds}\theta(1-\varepsilon)\sum_{i=0}^n \rho_{s,i}\phi_i K_{d,i} + \Lambda(z)\frac{\varepsilon_1}{Z_1}W_{pw}^{(0,1)}}$$

Застосувавши алгоритм (6.108) визначимо в який саме стан переходить частинка.

Якщо частинка **адсорбована** на *i*-му класі **донних** намулів на **швидкій** фазі, то вона може перейти до розчиненого у поровій воді вигляду за рахунок десорбції, або перейти у повільну реверсивну фазу, або зникнути за рахунок розпаду. Ймовірність зміну стану такої частинки дорівнює:

$$p = 1 - e^{-(\lambda + a_{ds}\theta + a_{fs})\Delta t}$$

Якщо відбулася подія зміни стану частинки, то що саме з нею сталося визначається з ймовірностей α_i :

$$\alpha_1 = \frac{\lambda}{\lambda + a_{ds}\theta + a_{fs}}$$
$$\alpha_2 = \frac{a_{ds}\theta}{\lambda + a_{ds}\theta + a_{fs}}$$
$$\alpha_3 = \frac{a_{fs}}{\lambda + a_{ds}\theta + a_{fs}}$$

Застосувавши алгоритм (6.108) визначимо в який саме стан переходить частинка.

Якщо частинка **адсорбована** на *i*-му класі **донних** намулів на **повільній** фазі, то вона може перейти у швидку реверсивну фазу, або зникнути за рахунок розпаду. Ймовірність зміну стану такої частинки дорівнює:

$$p = 1 - e^{-(\lambda + a_{sf})\Delta t}$$

Якщо відбулася подія зміни стану частинки, то що саме з нею сталося визначається з ймовірностей α_i :

$$\alpha_1 = \frac{\lambda}{\lambda + a_{sf}}$$
$$\alpha_2 = \frac{a_{sf}}{\lambda + a_{sf}}$$

Застосувавши алгоритм (6.108) визначимо в який саме стан переходить частинка.



Рисунок 6.35: Конфігурація каналу для чисельного експерименту

Параметр	Значення
Вид радіонукліду	^{137}Cs
Параметр розпаду λ	$7.33 \cdot 10^{-10} s^{-1}$
Витрата води на лівій границі	$10000 \mathrm{m}^3/c$
Початкова концентрація у воді	$1.0 \mathrm{K}/\mathrm{m}^3$
Роздільна здатність	100м,100м,21 <i>σ</i> -рівень
Швидкість осідання намулів	5мм/с
Потік ерозії	$5\cdot 10^{-4}$ кг/м $^2/c$
Критичне донне напруження	$0.05N/\mathrm{m}^2$
Пористість	0.4
Густина намулів	2600 кг/м 3
Параметр шорсткості дна	0.53мм
Уклін дна	10^{-5}

Табл. 6.6: Параметри для чисельного моделювання

6.9 Порівняння лагранжевої та ейлерової моделі розповсюдження радіонуклідів на прикладі потоку в каналі

В даному підрозділі описуються чисельні експерименти з течією в каналі із заглибленням. Метою розрахунків є перевірка алгоритму та чисельної реалізації лагранжевої моделі переносу радіонуклідів. Для перевірки алгори-



Рисунок 6.36: Стаціонарний розподіл концентрації завислих намулів у вертикальному перерізі



Рисунок 6.37: Вертикальний переріз концентрації розчиненого у воді ¹³⁷Cs розрахований за допомогою ейлерової моделі (зліва) та лагранжевої моделі (справа)

тму лагранжевої моделі проводилося порівняння розрахунків з результатами розрахунків такої ж задачі ейлеровою скінченно-елементною моделлю. В даному чисельному експерименті розглядаються процеси переносу радіонуклідів течіями, турбулентне перемішування, адсорбція-десорбція на завислих намулах. Процеси забруднення дна та міграція радіонуклідів в донних нарах намулів не розглядається.

Схема чисельного експерименту показана на рис. 6.36. Розрахунковий канал мав довжину 10 км, ширину 1 км та глибину від 10 до 60 метрів. З лівої границі задавався постійний витік забрудненої розчиненим радіонуклідом води. Дно вкрите однорідними за розмірами піщинками. Чисельні параметри моделювання подані в таблиці 6.6.

На рис. 6.36 показаний стаціонарний розподіл концентрації завислих намулів у вертикальному перерізі. Так як на втоці концентрація намулів дорів-



Рисунок 6.38: Вертикальний переріз концентрації адсорбованого ¹³⁷Cs розрахований за допомогою ейлерової моделі (зліва) та лагранжевої моделі (справа)

нює нулі, но концентрація поступово збільшується вниз по потоку на плоскій ділянці каналу. Над заглибленням швидкість потоку зменшується, та концентрація намулів падає.

На рис. 6.37 показано стаціонарний розподіл концентрації розчиненого у воді ^{137}Cs у вертикальному перерізі і порівняння з розрахунками за допомогою лагранжевого алгоритму. Концентрація радіонукліду поступово зменшується за рахунок адсорбції. В придонному шарі концентрація падає швидше за рахунок того, що там вища концентрація завислих намулів, і процеси адсорбції відбуваються швидше. Загалом, протягом всього каналу концентрація розчиненого ^{137}Cs зменшується приблизно вдвічі.

На рис. 6.38 показано стаціонарний розподіл концентрації адсорбованого на зважених намулах ^{137}Cs у вертикальному перерізі і порівняння з розрахунками за допомогою лагранжевого алгоритму. Концентрація радіонукліду поступово збільшується вниз по потоку за рахунок адсорбції. В придонному шарі концентрація росте швидше за рахунок того, що там вища концентрація завислих намулів, і процеси адсорбції відбуваються швидше. Найбільшою концентрація адсорбованого радіонукліду є в найглибших місцях каналу. Такий розподіл встановлюється по причині того, що за час, поки частики намулів осідають на дно, за рахунок адсорбції, вони встигають отримати значну порцію забруднення. Таким чином виходить, що найбільша концентрація адсорбованого радіонукліду знаходиться на великих глибинах, хоча концентрація завислих намулів в тих місцях є незначною.

Порівняння результатів розрахунків (рис. 6.37,6.38) за допомогою скінченноелементного методу та методу частинок показало, що лагранжевий метод та його чисельна реалізація правильно описують процеси переносу, турбулентного перемішування, граничні умови на дні, поверхні та на відкритих границях, а також процеси адсорбції-десорбції та розпаду.

6.10 Моделювання гіпотетичного аварійного викиду ¹³⁷Cs з АЕС Санмень

Лагранжева модель дисперсії радіонуклідів в морському середовищі була застосована для моделювання гіпотетичного аварійного викиду ^{137}Cs а AEC Санмень в акваторії Жовтого моря з метою оцінки можливого забруднення моря, намулів та оцінки впливу багатофракційних донних та завислих намулів на розповсюдження радіонуклідів. Атомна електростанція Санмень знаходиться на західному китайському березі Жовтого моря південніше естуарію р. Янцзи (рис. 6.39). Жовте море досить мілке, середня глибина складає близько 40 метрів, завдяки сильним припливним течіям та мулистому дну в морі спостерігається висока концентрація завислих намулів. Можна очікувати, що наявність великої кількості завислих намулів може суттєво вплинути на розповсюдження радіонуклідів внаслідок гіпотетичного аварійного викиду.

Для розрахунку тривимірного поля течій, рівню вільної поверхні та коефіцієнтів турбулентної дифузії використовувалась тривимірна гідродинамічна гідростатична модель SELFE, що була описана в розділі 3.2 та включала в себе спектральну модель хвиль для врахування радіаційних напружень та додаткового донного тертя.



Рисунок 6.39: Розташування АЕС Санмень

Жовте море відоме своїми сильними припливними течіями та високої концентрацією намулів. Для розрахунку переносу намулів та концентрацій завислих намулів, що необхідно для моделі переносу радіонуклідів, використовувалась Ейлерова модель переносу багатофракційних намулів, що описана в розділі 3.4. Модель здатна описувати суміш зв'язних намулів (глина) та декількох фракцій незв'язних намулів (мул та пісок різного гранулометричного складу). Ейлерова модель переносу намулів була обрана з огляду на великий час моделювання, що потрібен для розгону моделі а також, щоб отримати гладкі поля концентрації намулів для подальшого використання в моделі переносу радіонуклідів.

Попередньо розраховані поля течій, коефіцієнтів турбулентного перемішування, концентрацій завислих намулів з часовим кроком 1 година використовувались для розрахунків лагранжевою моделлю переносу радіонуклідів, алгоритм якої описаний в розділі 6.8.

Сценарій витоку ¹³⁷*Cs* вибирався подібний до аварії, що відбулася у 2011му році на АЕС Фукусіма для того, щоб оцінити можливі наслідки для акваторії Жовтого моря для гіпотетичної аварії такого масштабу. Моделювався неперервний витік ¹³⁷*Cs* протягом двох тижнів з початком 20го березня 2011го року із загальною кількістю радіонукліду 4ПБк (4 · 10¹⁵ Бк). Для розгону гідродинамічної моделі, перевірки її роботи і коректного моделювання завислих намулів розрахунки гідродинамічних полів почалися з 1го січня 2007го року.

6.10.1 Розрахункова сітка

Для розрахунку гідродинамічних полів було побудовано розрахункову сітку для скінченно-елементної гідродинамічної моделі з 50613 вузлів та 96217 трикутних елементів (рис. 6.40). Роздільна здатність розрахункової сітки складала до 8км на відкритій південній границі та до 400м вздовж китайського та корейського берегів. По вертикалі використовувалась змішана $\sigma - z$ система координат: 11 σ – рівнів на глибині до 300м та 7 z-рівнів для більших глибин. Паралельні розрахунки проводилися на 80-ти процессорах кластеру Корейського Інституту Наук про Океан та Технологій (KIOST).



Рисунок 6.40: Розрахункова область та розрахункова сітка гідродинамічної моделі Жовтого моря.

6.10.2 Граничні умови

Для того, щоб задати граничні умови на відкритих границях було використано результати глобального моделювання моделі НҮСОМ за 2007-2011 роки (https://hycom.org/dataserver/glb-analysis). Ці дані глобального моделювання є у відкритому доступі, роздільна здатність 1/12° по горизонталі та 36 zрівнів по вертикалі. Гідродинамічні дані доступні з часовим кроком 1 день. Для задання граничних умов у граничних вузлах моделі було проведено інтерполяцію даних в точки розташування вузлів в просторі та в часі. Так як гідродинамічна модель НҮСОМ не враховує припливи, то до граничних умов на рівень вільної поверхні було добавлено припливну компоненту рівня вільної поверхні з часовим кроком 12 хвилин. Для розрахунку припливних рівнів вільної поверхні на відкритій границі була використана глобальна модель прогнозування припливів NAO99b (http://www.miz.nao.ac.jp/staffs/nao99/), що основана на спектральному аналізі. Для розрахунку вітрових напружень на поверхні, а також теплообміну між атмосферою та океаном були використані глобальні метеорологічні дані ERA-INTERIM (http://apps.ecmwf.int/datasets/data/interim-full-daily/levtype=sfc/). Було використано дані по температурі повітря, атмосферного тиску, вологості повітря, хмарності та швидкості вітру з часовим кроком 6 годин.

Був врахований витік прісної води і зважених намулів з 6 головних річок Жовтого моря: Фучун Цзян, Янцзи, Хуай, Хуанхе, Хаіхо і річки Хан, кліматичні стоки яких зображено на рис. 6.41.

6.10.3 Розподіл параметрів донних намулів

Для розрахунку концентрації завислих намулів, потоків ерозії та осідання за допомогою багатофракційної моделі переносу намулів було побудовано



Рисунок 6.41: Кліматичні стоки основних річок Жовтого моря. 1– Фучун Цзян, 2– Янцзи, 3– Хуай, 4– Хуанхе, 5–Хаіхо, 6– Хан.

карту гранулометричного складу донних намулів Жовтого моря. Для цього було використано дані про розподіл середнього діаметру намулів (d_{50}), що був наданий Першим Океанографічним Інститутом Китаю (FIO) (рис. 6.42). Так як діаметри намулів можуть відрізнятися на декілька порядків, то прийнято зображати розміри за допомогою параметра $d = 2^{-\varphi}$, де d в мм. Згідно загальновживаної шкали розмірів Вентворта ([313]) розміри $\varphi > 8$ вважаються глиною (зв'язні намули), розміри $4 > \varphi > 8$ відповідають мулам (незв'язні), розміри $-1 > \phi > 4$ відповідають піску (незв'язні).

Для побудови гранулометричного розподілу намулів Жовтого моря було використано дані з Атласу Жовтого моря [111], в якому наведено розподіл глинистої фракції ($\varphi > 8$), рис. 6.43.

Припускаючи логнормальний розподіл діаметру намулів кожній точці, або



Рисунок 6.42: Середній розмір донних намулів, φ_{50}

нормальний розподіл параметру φ

$$p(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(\varphi - \varphi_{50})^2}{2\sigma^2}}$$

в кому є невідомий параметр σ . Для знаходження σ можна скористатися відомим значенням фракції зв'язних намулів, тоді σ можна знайти зі співвідношення

$$f_c = \int_{8}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(\varphi - \varphi_{50})^2}{2\sigma^2}}$$

Розв'язавши чисельно це рівняння для кожного вузла розрахункової області було знайдено значення середньоквадратичного відхилення σ для кожного вузла (рис. 6.44).

Для проведення розрахунків було обрано п'ять класів розмірів намулів:



Рисунок 6.43: Розподіл фракції зв'язних намулів, $\varphi>8$



Рисунок 6.44: Розподіл розрахованого середнь
оквадратичного відхилення розмірів намулів σ

Клас розмірів	φ
глина	$\varphi > 8$
дрібний мул	$8>\varphi>6$
крупний мул	$6 > \varphi > 4$
дрібний пісок	$4 > \varphi > 2$
крупний пісок	2 > arphi > 0

Після обчислення параметру *σ* фракції кожного складу намулів обчислювалися як

$$f_i = \int_{\varphi_i}^{\varphi_{i+1}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(\varphi - \varphi_{50})^2}{2\sigma^2}}$$

Таким чином було побудовано карту неперервного розподілу гранулометричного складу намулів Жовтого моря, що використовувалася при моделюванні дисперсії намулів.

6.10.4 Результати розрахунків

Припливи

Припливні течії є домінуючими в Жовтому морі [101]. Амплітуда припливів в деяких місцях може сягати 4.5 метрів а швидкість припливних течій більше 2 м/с. При короткочасному моделюванні розповсюдження різного роду забруднень (до кількох тижнів) в Жовтому морі необхідно особливу увагу приділяти саме припливним течіям. Саме припливні течії є основним джерелом завислих намулів в морі, концентрація яких може сягати більше 1 кг/м³. Тому при для коректного моделювання гідродинамічних процесів Жовтого моря проводилося порівняння результатів розрахунків рівня вільної поверхні за даними вимірювань. На рис. 6.45 показано розташування припливних станцій Жовтого моря. Для кожної станції Інститутом КІОЅТ було надано амплітуди та фази 62 припливних гармонік для кожної припливної станції за якими було відтворено припливні рівні вільної поверхні для часу чисельних розрахунків.

На рис. 6.46 показано порівняння даних розрахунків та вимірювань рівнів вільної поверхні для восьми станцій Жовтого моря. З порівняння випливає, що чисельна модель адекватно описує припливні течії, співпадіння добре на відкриті границі (що слід очікувати, тому що там задаються граничні умо-



Рисунок 6.45: Положення припливних станцій у Жовтому морі



Рисунок 6.46: Порівняння розрахованих та виміряних рівнів вільної поверхні для деяких станцій Жовтого моря: 1 - Anheung, 2 - Dalian, 3 - Kanmen, 4 - Keelung, 5 - Naha, 6 -Nakano, 7 - Seogwipo, 8 - Shijisuo

ви), вздовж корейського берега де спостерігаються найбільш припливи та у бохайській затоці. Розраховані припливи виявилася трохи заниженими на західному березі в центральній частині моря.

Хвилі

Основна частина Жовтого моря досить мілка, максимальна глибина основної його частини до 100м. Завдяки високим припливам, значні райони біля берегів бувають затоплені чи осушені в залежності від фази припливу. В таких умовах значну роль можуть відігравати поверхневі хвилі, які можуть впливати на вздовжберегові течії та сприяти додатковій ерозії намулів через підсилення донного тертя. Для моделювання хвильових параметрів було використана спектральна модель хвиль, що описана в розділі 3.2. Модель використовувала ті ж вузли, що і гідродинамічна модель, 12 напрямків та 10 частот хвиль. Для перевірки роботи моделі було проведено порівняння розрахунків з вимірами значущих висот хвиль на декількох станціях, розташування яких показано на рис. 6.47.



Рисунок 6.47: Розташування станцій вимірів хвильових параметрів

Дані про виміри висот хвиль було надано Корейською Гідрографічною та Океанографічною Агенцією (КНОА). На рис. 6.48 зображене порівняння часових рядів висот хвиль розрахованих з виміряними. З порівняння випливає, що чисельна модель досить добре описує помірні хвилі, а при екстремальних подіях (штормах та тайфунах) модель дещо недооцінює висоти хвиль. Це можна пояснити тим, що станції вимірів знаходяться близько до берега (рис. 6.47), де не вистачає роздільної здатності моделі для того, щоб коректно



Рисунок 6.48: Порівняння розрахованих висот хвиль з даними вимірювань для чотирьох станцій: 1 - Boksacho, 2 - Donongtan, 3 - Gyoboncho, 4 - Ieodo

описати екстремальні події.

На рис. 6.49 показане розраховане чисельною моделлю поле висот та напрямків хвиль при проходженні тайфуну Muifa у серпні 2011 року. Згідно розрахунків, найбільша висота хвилі становила близько 8.5 метрів в районі острова Чечжу, що узгоджується зі спостережуваними хвилями близько 9-ти метрів в тому районі (http://www.koreaherald.com/view.php?ud=20110807000254).

Концентрація завислих намулів

Наявність високої концентрації завислих намулів можна мати значну роль при розповсюдженні радіонуклідів у морському середовищі. В Жовтому морі, що відоме високими концентраціями намулів необхідно використовувати модель переносу намулів. Для чисельного розрахунку параметрів намулів було використано ейлерову модель переносу багатофракційних намулів, що описана в розділі 3.4. Для перевірки розрахунків моделі та визначення емпіричних параметрів моделі необхідно провести порівняння з даними вимірів. Прямі виміри наявності намулів у період моделювання (2007-2011) проводилися тільки в роботі [69], але в цих дослідженнях вимірювалась не концентрація намулів,



Рисунок 6.49: Розраховане поле висот та середніх напрямків хвиль при проходженні тайфуну Muifa з півдня на північ для 5,6,7,8 серпня 2011 року.

а каламутність води (turbidity) в одиницях FTU (Formazin Turbidity Units). Так як не існує прямого однозначного співвідношення між концентрацією завислих намулів та каламутністю для даного району спостережень, то прямо порівнювати результати розрахунків та спостережень складно. Порівняння показало, що характер розповсюдження концентрації намулів в розрахунках та спостереженнях схожий, співпадають зони максимальних та мінімальних концентрацій.

Для прямого порівняння було використано дані спостережень геостаціонарного супутника GOCI, дані обробки супутникових фотографій згідно алгоритму [100] було надана Інститутом KIOST. Так як якість супутникових даних дуже сильно залежить від хмарності, та від довжини світлового дня,



Рисунок 6.50: Порівняння загальної поверхневої концентрації намулів згідно даних супутникових спостережень (зліва) та розрахунків чисельної моделлю переносу намулів (справа) для моменту часу 12 квітня 2011 року

то для порівняння було обрано два найбільш безхмарних знімки 2011 року за 14 квітня та 13 травня. Алгоритм [100] був калібрований на даних прямих вимірів біля корейських берегів, точність алгоритму для центральної частини Жовтого моря та для китайських берегів невідома.

На рис. 6.50, 6.51 показане порівняння розрахованої загальної приповерхневої концентрації і дані обробки супутникових фотографій (GOCI) згідно алгоритму [100]. Порівняння показує, що модель здатна відтворювати характер та абсолютні значення розподілу концентрації завислих намулів в прибережних районах та в центральній частині Жовтого моря.

Розподіл радіонуклідів у воді

Для оцінки гіпотетичного забруднення дна та розповсюдження у водному середовищі ¹³⁷Cs внаслідок можливої аварії на АЕС Санмень було проведено моделювання лагранжевою моделлю дисперсії радіонуклідів, алгоритм якої описаний в розділі 6.8. Для розрахунку переносу, дифузії та адсорбції-


Рисунок 6.51: Порівняння загальної поверхневої концентрації намулів згідно даних супутникових спостережень (зліва) та розрахунків чисельної моделлю переносу намулів (справа) для моменту часу 13 травня 2011 року



Рисунок 6.52: Концентрація розчиненого ^{137}Cs у приповерхневому шарі моря

десорбції було використано попередньо розраховані за допомогою ейлерової моделі поля течій, коефіцієнту турбулентного перемішування та концентрації завислих намулів.

На рис. 6.52,6.54 показано розподіл концентрації розчиненого радіонукліду та радіонукліду, що адсорбований на завислих намулах в послідовні моменти



Рисунок 6.53: Концентрація адсорбованого на завислих намулах $^{137}Cs\,$ у приповерхневому шарі моря

часу. З рисунків випливає, що через значну концентрацію намулів у воді, концентрації розчиненого та адсорбованого радіонукліду мають один порядок величини, що говорить про необхідність враховування процесів адсорбції в даному випадку.

Забруднення радіонуклідами донних намулів

При наявності високої концентрації намулів, а відповідно і концентрації адсорбованого на намулах радіонукліду підсилюється забруднення дна через осідання забруднених частинок намулів. Адсорбція сприяє швидкому очищенню води від розчиненого радіонукліду та сильнішому забрудненню дна. Тому висока концентрація намулів сприяє зменшенню області розповсюдження розчиненого радіонукліду, але призводить до більш високих концентрацій забруднення донних намулів в околі аварії.

На рис. 6.54 показане загальне забруднення дна [Бк/м²] в послідовні моменти часу. З рисунку випливає, що більша частина радіонукліду випадає на дно на невеликій відстані від станції.



Рисунок 6.54: Загальне забруднення дна адсорбованим на донних намулах ¹³⁷Cs



Рисунок 6.55: Загальний баланс ¹³⁷Cs протягом першого місяця після аварійного викиду

На рис. 6.55 показано зміну загального балансу радіонуклідів в різних станах з часом: в розчиненому стані, а адсорбованому на завислих намулах стані, та в адсорбованому на донних намулах стані. З рисунку випливає, що протягом двох тижнів після закінчення витоку зі станції основна частина забруднення випадає на дно, а загальна кількість розчиненого радіонукліду зменшується вдвічі.

6.11 Умовні позначення до розділу

 a_{ds} швидкість десорбції для радіонукліду, адсорбованого на зважених намулах, 1/c

*a*₁₃ швидкість десорбції для радіонукліду, адсорбованого на верхньому шарі донних намулів

 C_d^w концентрація розчиненого у воді радіонукліду, Бк/м 3

 $C_{p,i}^w$ концентрація адсорбованого радіонукліду на зважених намулах фракції $i,~{\rm K}/{\rm M}^3$

 C_p^w загальна концентрація адсорбованого на зважених намулах радіонукліду, Бк/м 3

 $C^b_{d,j}$ концентрація розчиненого радіонукліду в донній поровій воді, у донному шарі намулів j, Бк/м³

 $C^b_{s,i,j}$ концентрація адсорбованого радіонукліду на донних намулах фракції *i*, у донному шарі намулів *j*, Бк/кг

 $C^b_{s,j}$ загальна концентрація адсорбованого радіонукліду в донних намулах, в шарі $j,~{\rm K}\kappa/{\rm K}$

 D_i потік осідання намулів фракції iна дно, кг м $^{-2}\,\mathrm{c}^{-1}$

 E_i потік ерозії намулів фракції iз д
на, кг м $^{-2}\,{\rm c}^{-1}$

і індекс фракції розмірів намулів

ј індекс донного шару

 $K^w_{d,i}$ коефіцієнт розподілу радіонукліду для зважених намулів фракції $i,\,{
m M}^3/{
m kr}$

 $K^b_{d,i,j}$ коефіцієнт розподілу радіонукліду для донних намулів фракції i, м 3 /кг

 R_i радіус частинки намулів фракції i, (m)

п загальна кількість класів розмірів намулів

т загальна кількість шарів донних намулів

 $S_{p,i}\,$ концентрація i-го класу зважених намулів, кг м $^{-3}$

 $\vec{U} = (U, V, W)$ швидкості течії в декартових координатах, м/с $W_{p,i}$ швидкість осідання частинки намулу фракції *i*, м/с Z_j товщина *j*-го шару донних намулів, м χ швидкість адсорбції, м/с λ швидкість радіоактивного розпаду, с⁻¹ $\phi_{i,j}$ об'ємна доля частинок фракції *i* в *j*-му шарі донних намулів, ν_T коефіцієнт вертикального перемішування, м² с⁻¹ ν_D коефіцієнт дифузії у поровій воді, м² с⁻¹ $\rho_{s,i}$ густина намулів фракції розмірів *i*, кг м⁻³

6.12 Висновки до розділу

Наведений опис нової тривимірної моделі розповсюдження радіонуклідів. Модель здатна описувати тривимірний перенос та турбулентну дифузію, процеси адсорбції та десорбції із завислими та донними намулами, а також процес розпаду радіонуклідів. Модель враховує міграцію радіонуклідів у донному шарі за рахунок молекулярної дифузії та механічному перемішуванню донними організмами. Отримано нові аналітичні розв'язки для розрахунку ймовірностей переходу частинок між станами при радіоактивному розпаді, адсорбції-десорбції. Представлено новий лагранжевий алгоритм розв'язку рівнянь моделі, що дозволяє моделювати процеси радіоактивного розпаду та адсорбцію-десорбцію на багатофракційних намулах. Отримано алгоритм моделювання граничних умов для методу частинок, що заснований на розрахунку ймовірності зміни стану частинок біля границі. Розрахунки моделі перевірені на аналітичних розв'язках, на лабораторному експерименті по міграції радіонуклідів в донному ґрунті. Порівняння всіх значень вимірів концентрації радіонуклідів в досліді [278] з модельними розрахунками показало, що середнє геометричне для відношення розрахунків до вимірів дорівнює 0.92 для повної концентрації на намулах і 0.81 для концентрації у поровій воді, а середньоквадратичне геометричне відхилення дорівнює 1.77 для концентрації на намулах та 2.8 для концентрації у поровій воді. Проведено моделювання гіпотетичного аварійного викиду ^{137}Cs в Жовтому морі з урахуванням припливів, вітрових поверхневих та намулів. Було показано, що для даних умов значну роль для забруднення дна та розповсюдження розчиненого радіонукліду відіграють процеси адсорбції та десорбції радіонуклідів на завислих намулах.

Розділ 7

МОДЕЛЮВАННЯ РОЗПОВСЮДЖЕННЯ ¹³⁷CS В ОКЕАНІ ВНАСЛІДОК АВАРІЇ НА АЕС ФУКУСІМА

Атомна електростанція Фукусіма-1 (Fukushima Daiichi), розташована в префектурі Фукусіма на східному узбережжі о. Хонсю, складається з шести киплячих ядерних реакторів (BWR). Ці легководні реактори мали потужність 4.7 ГВт, що робило Фукусіма-1 одною з 15 найбільших атомних електростанцій у світі (рис. 7.1).



Рисунок 7.1: Атомна електростанція Фукусіма-1 до та після аварії

Аварія на Фукусімській АЕС внаслідок 9-ти бального землетрусу Тохоку і цунамі відбулася 11 березня 2011 року на північно-східному узбережжі Японії. Блоки 4, 5 і 6 були зупинені до землетрусу для планового технічного обслуговування. Решта реакторів були закриті системою SCRAMed автоматично після землетрусу, а тепло що залишилося внаслідок розпаду палива відводилося за рахунок енергії від аварійних генераторів. Подальше руйнівне цунамі з хвилями висотою до 14 метрів, що були більше ніж висота захисних дамб, затопило аварійні генератори, необхідні для охолодження реакторів і відпрацьованого палива в басейнах в блоках 1-5. Протягом наступних трьох тижнів мало місце часткове розплавлення активних зон реакторів блоків 1- 3, виділення водню з ТВЕЛів з подальшими вибухами. Викиди радіоактивності в атмосферу, витоки в океан (в основному ¹³¹I, ¹³⁴Cs і ¹³⁷Cs) призвели до значного забруднення суходолу та моря. На відміну від чорнобильської аварії біля 80% радіоактивності випало в Тихому океані.

Протягом перших місяців після аварії концентрація ^{134}Cs і ^{137}Cs (період напіврозпаду 2.06 і 30.2 років, відповідно) швидко зменшилася в результаті переносу і розчинення течіями [85,261]. Проте, відносно висока концентрація ^{137}Cs зберігалася наступні два роки після аварії біля східного узбережжя Японії [173,241,72,52]. Стійке забруднення донних намулів потенційно може вплинути на харчовий ланцюг в зв'язку з постійним прийомом їжі органічної речовини із забрудненого шару осаду донними безхребетними і придонними рибами [86,279,310], тому для прогнозування таких процесів необхідна модель, що здатна описувати міграцію радіонуклідів у донних шарах багатофракційних намулів.

7.1 Вхідні дані для моделювання розповсюдження радіонуклідів після аварії на АЕС Фукусіма-1

Для моделювання розповсюдження ¹³⁷ Cs внаслідок аварії на AEC Фукусіма було побудовано неструктуровану розрахункову сітку (рис. 7.2) що складається з 49700 вузлів та 97989 трикутних елементів. Роздільна здатність сітки нерівномірна, і складає близько 500м біля витоку станції і близько 10-15км на відкритій границі. Карта глибин була отримана з глобального масиву GEBCO-08 з роздільною здатністю 30 секунд. По вертикалі використовувалася σ -система координат з 36 рівнями, що мають згущення біля дна та біля поверхні.



Рисунок 7.2: Розрахункова область і сітка

7.1.1 Джерела забруднення

Можна виділити чотири основних джерела радіонуклідів, які попали в океан в результаті аварії на AEC Фукусіма 1. Найбільшим та найпершим джерелом є викиди з AEC за рахунок вентилювання і вибухові викиди газів і летючих радіонуклідів в атмосферу, що призвело до випадінь на суші і в океа-

298

Оцінки загальної атмосферних випадінь ¹³⁷ Cs сильно розрізняються через невизначеність в параметрах перенесення і осідання в атмосферних моделях, а також відсутність спостережень, необхідних для проведення обернених розрахунків. Дещо менший прямий вилив забрудненої матеріалу в океан мав місце під час надзвичайної ситуації при охолодженні реакторів, яка привела до стоку забрудненої води в океан з підвалу будівлі реактора. Цей процес досяг свого піку близько 6 квітня 2011 року, коли найвища концентрація радіоцезію спостерігалась в океані в безпосередній близькості від АЕС [85]. Щоб оцінити загальний прямий викид радіоцезію в океан, кілька груп використовували моделі океану в поєднанні зі спостереженнями ^{134,137}Ся в поверхневих водах, близьких до АЕС в період найвищого прямого витоку з березня по травень 2011 року [162, 118, 165, 211]. Надходження радіоцезію в японські прибережні води також відбувалося через гирла річок та поверхневого змиву [94, 231, 120]. Цезій в значній мірі нерозчинний в прісній воді, і, таким чином, його перенос та постачання через річки в море пов'язані в основному з високою концентрацією завислих намулів під час сильних дощів і повеней. Модельні оцінки [120] дають, що це відповідало б менше 1-2% від загального випадіння радіоцезію на сушу. Потік за рахунок ґрунтових вод являє собою додаткове довгострокове джерело радіоцезію до океану, зокрема, від забрудненої території АЕС. В роботі [160] було оцінено цей потік, який має той же порядок що і величина притоку з річок, хоча велика частина притоку цезію з річок в океан складається з адсорбованого на намулах цезію, в той час як розчинений цезій є домінуючим в ґрунтових водах.

На рис. 7.3 подано прямий потік зі станції [165], що було використано при моделюванні. На рис. 7.4 представлено загальне випадіння ¹³⁷Cs з атмосфери, що було використано в моделі як об'ємне джерело, що розподілене у верх-





Рисунок 7.3: Прямий витік ¹³⁷ Ся в океан [165]



Рисунок 7.4: Загальне атмосферне випадіння ¹³⁷ Cs на поверхню океану

ній комірці моделі.

7.1.2 Граничні умови

Для запуску гідродинамічної моделі на трикутній скінченно-елементній розрахунковій сітці, що показана на рис. 7.2 необхідно було підготувати граничні умови на відкритих границях та на поверхні океану. На відкритих границях значення компонент швидкості, температури, солоності та рівня вільної поверхні задавалися з результатів розрахунків глобальної тривимірної гідродинамічної моделі *HYCOM* (*https://hycom.org/dataserver/glb-analysis*). Ці дані є у відкритому доступі, роздільна здатність 1/12° по горизонталі та 36 z-рівнів по вертикалі. Гідродинамічні дані доступні з часовим кроком 1 день. Для задання граничних умов у граничних вузлах моделі було проведено інтерполяцію даних в точки розташування вузлів в просторі та в часі. Так як в *HYCOM* не враховуються припливи, то до граничних умов на рівень вільної поверхні було добавлено припливну компоненту рівня вільної поверхні з часовим кроком 12 хвилин. Для розрахунку припливних рівнів вільної поверхні на відкритій границі була використана глобальна модель прогнозування припливів NAO99b (http://www.miz.nao.ac.jp/staffs/nao99/), що основана на спектральному аналізі. Для розрахунку вітрових напружень на поверхні, а також теплообміну між атмосферою та океаном були використані глобальні метеорологічні дані ERA-INTERIM (http://apps.ecmwf.int/datasets/data/interim-full-daily/levtype=sfc/). Було використано дані по температурі повітря, атмосферного тиску, вологості повітря, хмарності та швидкості вітру з часовим кроком 6 годин.

7.1.3 Розподіл параметрів донних намулів

Використовуючи опубліковані дані натурних досліджень ([72,52,240, 173]) було побудовано неоднорідний по простору розподіл середніх розмірів піщинок намулів (рис. 7.5). Згідно даних натурних досліджень [173] для даного регіону існує сильна залежність між середнім розміром піщинок та вмістом води у намулах (пористістю). Для побудови розподілу перемінної пористості для використання при моделюванні була використана емпірична формула:

$$D_{50} = 121\varepsilon^{-1.85}$$

де ε пористість (%).

В роботі [72] було одержано експериментальну оцінку для коефіцієнту біодифузії. Було знайдено, що коефіцієнт біотурбації може змінюватись у широкому діапазоні від 0.1 до більш, ніж 10 см²/рік. Було побудовано кореляційну криву залежності коефіцієнта біотурбації від глибини, та використано в чисельній моделі співвідношення:

$$\nu_{bio} = \min(10, \max(0.1, 2807.36D^{-1.296}))$$



Рисунок 7.5: Розподіл середнього діаметру донних намулів згідно компіляції даних натурних досліджень [72,52,240,173]

7.2 Розповсюдження ¹³⁷Cs в океані

До 2011 р. концентрація ¹³⁷ Сs в поверхневих водах північної частини Тихого океану і його окраїнних морів була 1-2 Бк/м³, як наслідок випробувань в атмосфері ядерної зброї [53,54]. У березні- на початку квітня 2011 року концентрація ¹³⁷ Cs стрімко зросла до 68 мільйонів Бк/м³ в поверхневих водах, що безпосередньо прилягають до Фукусіма-1, а потім знизився більш ніж на три порядка протягом приблизно місяця, і приблизно 10 000 Бк/м³ до початку 2012 року [85], і приблизно 1000 Бк/м³ з 2013 до 2015 року.

Більшість радіонуклідів, які витекли з АЕС Фукусіма швидко змішалися з океанськими водами в енергетичних прибережних водах Японії під впливом течій, припливів, і мезомасштабних вихорів. Забруднені води просуваються на схід під впливом течії Ойясіо, направленої на південний схід і далі на схід під впливом теплої течії Куросіо. У південному напрямку переносу забруднення, або принаймні його прояв на поверхні, було заблокований течією Куросіо [86]. Перенос на схід був обумовлений Північно-тихоокеанською течією, яка розгалужується в міру наближення до Північної Америки. Вважається, що концентрація ¹³⁷ Cs досягла свого максимуму в 2015-2016 роках і має знизитися до 2020 року до рівня приблизно 1-2 Бк/м³ що приблизно відповідає рівню забруднення пов'язаного з фоновими випадіннями від випробувань ядерної зброї.

На рис. 7.6 наведені розраховані приповерхневі концентрації ¹³⁷ Сѕ на моменти 1 квітня, 6 квітня, 11 квітня, 21 квітня, 1 травня та 21 травня, що відповідають датам спостережень [55]. З розрахунків видно складну системи течій та різномасштабних вихорів, що контролює розповсюдження розчиненого радіонукліду в розрахунковій області. Добре видно фронт чистої води, що утворюється через сильну течію Куросіо, яка блокує розповсюдження радіонуклідів на південь. В роботах [254,255,256,257,275], що присвячені, зокрема, моделюванню різними моделями наслідків аварії на АЕС Фукусіма, показано, що моделювання течій є дуже складною задачею для цього регіону. Порівняння результатів різних моделей (в тому числі і моделі, що представляється в дисертації) призводить до суттєво різних результатів для концентрацій розчинених радіонуклідів, особливо в районах, що виходять за двадцятикілометрову зону навколо АЕС. Для даного регіону кращих результатів при моделюванні течій можна досягти використовуючи засвоєння даних вимірів при розрахунках.

Розрахунки розповсюдження 137 Cs проводилися також лагранжевою моделлю по полям швидкостей та коефіцієнту вертикального перемішування, що розраховані гідродинамічною моделлю та збережені з часовим кроком 1 год. В моделюванні брало участь 100000 частинок. На рис. 7.7 показано розташування частинок у приповерхневому 10-тиметровому шарі для моментів часу за 11 та 20 квітня 2011 року, а на рис. 7.8 зображено концентрацію розчиненого 137 Cs, побудовану за розподілом частинок методом усереднення по об'єму.



ітня 2011 1 травня 2011 11 травня

Рисунок 7.6: Концентрація ¹³⁷ Cs на поверхні

На рис. 7.10 представлено порівняння результатів моделювання приповерхневої концентрації ¹³⁷ Cs з даними вимірювань TEPCO (http://www.tepco.co.jp/en/nu/fukushima-np/f1/index2-e.html). Розташування точок вимірів показано на рис. 7.9. З розрахунків випливає, що результати розрахунків добре узгоджені з вимірами в точках близьких до станції. Середнє геометричне значення відношення розрахунків приповерхневої концентрації розчиненого ¹³⁷ Cs до результатів вимірювань в точках 1,2 складає 1.03. Середнє геометричне квадратичне відхилення для цих точок складає 2.57. Результати порівняння погіршуються при віддалені від точки виливу, що свідчить про складності моделювання течій для даного регіону. Порівняння результатів моделюван-



Рисунок 7.7: Розподіл положення лагранжевих частинок розчиненого ¹³⁷ Cs на моменти часу 11 та 20 квітня 2011 року в результаті розрахунків лагранжевою моделлю переносу радіонуклідів



Рисунок 7.8: Концентрація розчиненого ¹³⁷ Cs на моменти часу 11 та 20 квітня 2011 року побудована по розподілу частинок, що розрахований лагранжевою моделлю переносу радіонуклідів

ня з іншими моделями в роботі [254] показало, що чисельні моделі інших авторів мають приблизно однакову точність розрахунків для даної задачі. Результати порівняння свідчать, що похибка при моделюванні течій значно більше впливає не результат моделювання переносу радіонуклідів, ніж різні формулювання моделей переносу радіонуклідів.



Рисунок 7.9: Розташування точок вимірювання за даними ТЕРСО

7.3 Забруднення радіонуклідами донних відкладень

Відкладення на морському дні мають важливе значення для утримання адсорбованих радіонуклідів і служать як резервуар забруднень для організмів, які харчуються і живуть на морському дні. Вони також можуть бути довгостроковим джерелом забруднюючих речовин через змучування дрібнодисперсних частинок донних покладів, біотурбацію і втрати розчинених радіонуклідів з порових вод. Експериментальні профілі забруднення розрізнялися за глибиною проникнення кернів від менш 3 см до більш ніж 20 см [173, 241,52,72, 240]. У радіоактивному забрудненні донних відкладень на ділянках дна у східного узбережжя Японії переважають ¹³⁴ Cs і ¹³⁷ Cs [173,241, 289,52,72, 240, 279,232]. Кількість ⁹⁰ Sr у донних відкладеннях на три порядки нижче, ніж загальна кількість ⁹⁰ Sr в товщі води завдяки низькій здатності ⁹⁰ Sr до адсорбції на частинках донних намулів.

Розподіл ¹³⁷ Cs у донних покладах вздовж берегів Японії після аварії на



Рисунок 7.10: Порівняння розрахунків концентрації $^{137}Cs\,$ на поверхні з даними спостережень ТЕРСО-2011

АЕС Фукусіма залежить від джерел забруднення, мінералогії покладів, локальних течій та діяльності донних організмів яка приводить до перемішування покладів (біодифузія та біоірігація). В цілому, відкладення на морському дні містять менше 1% (130 ± 60 ТБк) активності ¹³⁷ Сs, який поступив в морське середовище з АЕС Фукусіма [173,72]. Однак, з огляду на поступове зниження концентрації розчиненого ¹³⁷ Сs в товщі води з початку забрудне-



Рисунок 7.11: Місця вимірів концентрації ¹³⁷ Cs в донних відкладеннях, що використовуються для розрахунку запасів

ння, зараз кількість радіоцезію у донних покладах в 5-10 разів більше, ніж у воді (36°-38°N, в воді на глибині до 200 м) [72]. Швидке перемішування забруднених відкладень завдяки біотурбації допомагає зменшити поверхневу концентрацію радіоцезію у відкладеннях і зменшити біологічне поглинання забруднень, але в той же час біотурбація може також повертати забруднені донні відкладення до поверхні дна на масштабах від декількох років до десятиліть. Ерозія донних покладів течіями та хвилями призведе до перерозподілу забруднення з частковим переходом його у розчинну форму але приплив активності з річок та ґрунтових вод може суттєво збалансувати ці втрати, в результаті чого слід очікувати невеликі зміни в запасах активності у донних відкладеннях. Таким чином, ці результати свідчать про те, що в прибережній зоні Японії залишиться значне довгострокове джерело радіоцезію протягом від декількох років до десятиліть, в залежності місця і типу відкладень, хоча подальші дослідження необхідні, щоб оцінити ці процеси.

Запаси ¹³⁷ Cs в донних відкладеннях були оцінені в дослідженнях [241, 173,52,240,72] за період червень 2011- травень 2013 р. Місця відповідних вимірювань наведені на рис. 7.11.



Рисунок 7.12: Порівняння даних запасів ¹³⁷ Cs у донних відкладеннях згідно вимірів [241], що проведені у червні, серпні, жовтні 2011 та у січні 2012 з даними вимірів [52], що проведені у липні 2012

Багато місць вимірювань близькі, що дозволяє порівнювати запаси для різних вимірів і для різних часів. В дослідженні [52] виміри проводилися у лютому та липні 2012 року на регулярній сітці з роздільною здатністю 5'. Декілька інших досліджень для інших дат попадають в область вимірів [52], тому з цими даними можливе порівняння запасів, розрахованих на різний час іншими дослідниками.

Порівняння даних запасів ¹³⁷ Cs у донних відкладеннях згідно вимірів [241], що проведені у червні, серпні, жовтні 2011 та у січні 2012 з даними вимірів [52], що проведені у липні 2012 показано на рис. 7.12. Як видно на рисунках, в червні 2011 року запаси ¹³⁷ Cs в області вимірювання [241] істотно більше, ніж через рік, що узгоджується з вимірами [279] для концентрації ¹³⁷ Cs в верхньому шарі відкладень на шельфі, де показане швидке зниження



Рисунок 7.13: Порівняння даних запасів ¹³⁷ Cs у донних відкладеннях згідно вимірів [240], що проведені у жовтні 2012 з даними вимірів [52], що проведені у липні 2012



Рисунок 7.14: Порівняння даних запасів ¹³⁷ Cs у донних відкладеннях згідно вимірів [72], що проведені протягом 2013р. з даними вимірів [52], що проведені у липні 2012

активності в 2011 році. Пізніше (серпень 2011-липень 2012 року) зміни запасів в основному пов'язані з перерозподілом активності на шельфі через течії, припливи і хвилі в мілководних районах та з повільною десорбцією.

Порівняння даних після липня 2012 року (рис. 7.13,7.14) показує подальше зниження запасів. Можна припустити, що ремобілізація активності з відкладень і перемішування з нижніми шарами посилюється при проходженні тайфунів і штормів в період літнього мусону, що може посилити повторне розчинення в ¹³⁷ Cs з відкладень на шельфі.



Рисунок 7.15: Порівняння даних запасів ¹³⁷ Cs у донних відкладеннях згідно вимірів [52], що проведені у лютому та у липні 2012р.



Рисунок 7.16: Загальне забруднення дна ¹³⁷ Сs

На рис. 7.16 представлено результати моделювання загального забруднення дна на моменти часу згідно спостережень [55]. З розрахунків випливає, що забруднення дна розповсюджується протягом всього часу моделювання.

310



Рисунок 7.17: Розташування точок, в яких порівнювалося забруднення дна з даними [72]

Особливо помітний приріст забруднення в зонах малої концентрації за кілька сотень кілометрів від положення місця аварії. З розрахунків видно, що через три місяці моделювання розподіл забруднення дна не є стаціонарним, а продовжує суттєво еволюціонувати в часі.

На рис. 7.18,7.19 показано зміну в часі профілів концентрації згідно результатів чисельного моделювання в точках, що відповідають точкам спостережень в роботі [72], що зображені на рис. 7.17. Подано профілі концентрації ¹³⁷ Сѕ в донних намулах та у поровій воді через 1,2 та 3 місяці після початку витоку. На графіках видно, що динаміка забруднення різна в різних точках. В точці №10, що знаходиться найдалі від джерела забруднення концентрація рівномірно зростає протягом трьох місяців як на поверхні дна, так і в глибших шарах. В трохи ближчій точці №14 забруднення зростає протягом двох місяці, а на третій концентрація на поверхні починає зменшуватись. Особливо це помітно на профілі концентрації в поровій воді. Якщо ж поглянути на результати розрахунків в ближніх до аварії точках (№18,19,20), то видно що концентрація на поверхні починає стрімко зменшуватись вже через місяць після аварії. Хоча в глибших шарах концентрація продовжує рости. В точці №19



Рисунок 7.18: Профілі концентрацій в намулах (зліва) і в поровій воді (справа) в точках № 10,14,18 (зверху вниз)

процес очищення верхнього шару ґрунту настільки швидкий, що призводить до формування локального максимума концентрації розчиненого радіонукліду у поровій воді під поверхнею дна. Наведені розрахунки свідчать про те, що подібна динаміка забруднень може бути описана лише за допомогою багато-



Рисунок 7.19: Профілі концентрацій в намулах (зліва) і в поровій воді (справа) в точках № 19,20 (зверху вниз)

шарової моделі донних намулів. Цьому висновку також сприяють графіки на рис. 7.20, на яких показано різницю в результатах моделювання загального забруднення дна при моделюванні одношаровою та багатошаровою моделлю. Графіки наведено в точках, що відповідають точкам на рис. 7.17. З графіків випливає, що в точках, які знаходяться далеко від джерела забруднення та процес забруднення відбувається повільно і поступово, різниця між використанням одношарової та багатошарової моделі невелика. В точках, які близькі до джерела, і в яких забруднення відбуваються короткочасним імпульсом, різниця між моделями може бути значною. В точці №19 багатошарова модель прогнозує рівень запасу у три рази менший за одношарову модель після трьох місяців моделювання. В точці №16 одношарова модель прогнозує за-



Рисунок 7.20: Результати моделювання загального забруднення дна при використанні одношарової та багатошарової моделі донних відкладень

бруднення вдвічі більше за багатошарову модель, причому з графіку видно, що різниці продовжує збільшуватись з часом. Одношарова модель прогнозує майже монотонне збільшення запасу протягом всього періоду моделювання, в той час як багатошарова модель прогнозує монотонне зменшення повного обсягу ¹³⁷Cs вже через місяць після початку аварії.

На рис. 7.21 показано порівняння результатів моделювання загального за-



Рисунок 7.21: Порівняння результатів моделювання забруднення дня з даними спостережень [72]

бруднення дна ¹³⁷ Cs з результатами натурних спостережень в точках, що зображені на рис. 7.17. З порівняння слідує, що модель прогнозує рівень забруднення вище вимірювань в точках з високими концентраціями, які знаходяться близько до джерела. Також розраховані значення є меншими за виміри у зонах малих та помірних концентрацій, що знаходяться далеко від місця аварії. Слід зазначити, що розраховані точки представлені на момент часу 3 місяці після аварії, в той час як виміри проводилися в різні моменти часу через 1.5-2.5 роки після аварії. Як видно з графіків залежності від часу на рис. 7.21 розраховані запаси ¹³⁷ Cs в зонах високої концентрації зменшуються з часом, в той час як в зонах з малими концентраціями збільшуються з часом.

7.4 Висновки до розділу

В даному розділі лагранжева та ейлерова чисельні моделі розповсюдження радіонуклідів були застосовані до розрахунку наслідків аварії на AEC Фукусіма. Розрахунки та аналіз даних вимірювань ^{137}Cs показали, що з часом після аварії в результаті інтенсивних течій вода очищується, та основним джерелом забруднення стають донні намули. Порівняння розрахунків приповерхневої концентрації ¹³⁷Cs з даними вимірів біля станції показали, що середнє геометричне значення відношення розрахунків до результатів вимірювань в точках складає 1.03, а середнє геометричне квадратичне відхилення для цих точок складає 2.57. Максимальні концентрації спостерігаються через 1-2 тижні після початку аварій, а потім монотонно зменшуються до майже фонових значень (за виключенням кілька-кілометрової зони навколо місця аварії). Виміри забруднення дна показують, що можуть відбуватися значні зміни концентрації забруднення і через 1-2 роки після аварії. Виміри в однакових точках в різний час показують, що концентрація в дні може як зменшуватись, так і збільшуватись. Зони, що зазнали сильного початкового забруднення мають тенденцію до зменшення концентрації, а в зонах з невисоким рівнем забруднення концентрація може збільшуватися. Тому для довгострокових прогнозів важливе моделювання процесів, що відбуваються в донних намулах, зокрема біотурбація та дифузія в поровій воді. Дифузія в поровій воді та біотурбація призводить до зменшення потоку радіонуклідів в воду в процесі очищення дна за рахунок зменшення концентрації радіонуклідів на поверхні дна. Розрахунки показали необхідність використання для даної задачі моделі з багатошаровим представленням донних відкладень через складність процесів, що відбувається при міграції радіонуклідів в донних покладах. Було показано, що тільки багатошарова модель, що представлена в роботі, здатна коректно описувати інтегральне забруднення дна. Отримані результати показали, що лагранжеве моделювання є найбільш ефективне на ранніх етапах розповсюдження забруднень та може бути використане в системах підтримки прийняття рішень при ядерних та хімічних аваріях.

ВИСНОВКИ

Дисертаційна робота присвячена розробці та впровадженню чисельних методів моделювання розповсюдження забруднень та намулів в прибережних зонах морів. Побудовані нові чисельні схеми розв'язання рівнянь переносу та дифузії та рівнянь мілкої води методами частинок. Розроблений комплекс математичних та чисельних моделей, що дозволяють прогнозувати та досліджувати розповсюдження намулів та більшості типів забруднень в прибережних зонах. Порівняння розрахунків з даними лабораторних та натурних експериментів показують, що розроблені підходи та моделі можуть застосовуватись для досліджень та для підтримки прийняття рішень як для аварійних ситуацій, пов'язаних з викидами шкідливих речовин в морське середовище, так і для планування з ціллю зниження ризиків та мінімізації наслідків забруднення навколишнього середовища та можливих аварійних ситуацій.

Зокрема, в роботі отримані такі нові наукові результати:

1. Представлений новий алгоритм, що дозволяє будувати чисельні схеми випадкових блукань з незміщеною дисперсією для загального випадку змінного поля течії та коефіцієнту дифузії. Отримано нові аналітичні розв'язки для зміщення центру мас та дисперсії розподілу частинки при моделюванні переносу та дифузії методом випадкових блукань для окремих часткових випадків одновимірного руху, за допомогою яких виведено критерії оцінки максимальних часових кроків для розв'язку рівняння адвекції-дифузії методом частинок.

- 2. Застосовано теорію стохастичних процесів до моделювання методом частинок процесів зміну стану речовини, таких як, наприклад, хімічні реакції, радіоактивний розпад та адсорбція-десорбція радіонуклідів на піщинках завислих чи донних намулах. Побудована нова чисельна схема для узагальненого випадку розрахунку ймовірності зміни стану для частинки протягом часового кроку. Вираз для математичного сподівання та дисперсії розподілу стану речовини, отриманий з розв'язку рівняння Колмогорова, використано для побудови алгоритму для оцінки точності розв'язку рівняння перетворення станів речовини в залежності від часового кроку та кількості частинок. На основі отриманих результатів побудовані узагальнені чисельні алгоритми розв'язку рівнянь переносу та дифузії неконсервативних домішок методом частинок.
- 3. Модифікована тривимірна гідростатична гідродинамічна модель для врахування взаємодії поверхневих хвиль та течій з урахуванням радіаційних напружень, хвильового придонного тертя і потоку імпульсу в течії за рахунок перекидання хвиль. Порівняння модельних розрахунків з аналітичним розв'язком та з вимірами в лабораторному експерименті показали необхідність використання тривимірного представлення радіаційних напружень, а також необхідність врахування перелічених факторів.
- 4. Вдосконалено чисельний алгоритм тривимірної негідростатичної моделі з вільною поверхнею для застосування узагальненої вертикальної системи координат, що дозволяє розв'язувати задачі моделювання негідростатичних струменевих та гравітаційних течій в прибережних областях з різкими змінами рельєфу дна.

- 5. Представлена нова математична модель переносу багатофракційних намулів, яка описує морфологічні зміни дна та зміни фракційного складу в донних шарах намулів в результаті ерозії та осідання намулів. Вперше побудоване рівняння для зміни пористості викликане механічним перемішуванням донними організмами (біотурбацією).
- 6. На основі ейлерової моделі переносу багатофракційних намулів побудована нова тривимірна лагранжева модель, що використовує метод випадкових блукань для моделювання переносу та дифузії та описує перенос суміші зв'язних та незв'язних багатофракційних намулів з перемінним гранулометричним складом. Отримано вираз для ймовірності осідання незв'язних намулів залежно від характеристик турбулентності та швидкості осідання частинок намулів, що використовується для задання граничних умов для при розв'язанні рівняння переносу та дифузії методом частинок. Результати розрахунків добре узгоджуються з аналітичним і чисельним розв'язками для ейлерової моделі та з даними лабораторного експерименту. Модель була застосована для дослідження виникнення гравітаційних каламутних течій на схилах в результаті шельфової конвекції та для моделювання набігання внутрішніх хвиль на уклін дна. Показано, що гравітаційні течії та внутрішні хвилі є одними з механізмів переносу донних намулів в шельфових зонах.
- 7. В результаті дослідження стійкості дна та берегів під дією струменевих течій від судових рушіїв за допомогою негідростатичної гідродинамічної моделі показано, що при моделюванні розмиву дна градієнт динамічного тиску необхідно враховувати поряд з дотичними напруженнями тертя. Розроблена лагранжева модель переносу намулів в поєднанні з негідростатичною гідродинамічною моделлю може використовуватись для роз-

рахунків локального переформування дна навколо перешкод, моделювання днопоглиблювальних робіт або розмиву дна під впливом струменів від судових рушіїв або хвиль при проходженні судів.

- 8. Розроблена нова чисельна тривимірна лагранжева модель переносу нафтопродуктів, що складається з моделі поверхневої плівки нафти та моделі дисперсії нафтових крапель в шарі води. Побудований чисельний лагранжевий метод взаємодіючих частинок, що дозволяє рамках моделі суцільного середовища розраховувати поле тиску в плямі та розв'язувати задачу про гравітаційне розтікання поверхневої плівки нафти в неоднорідному полі течій. Особливістю моделі є врахування впливу обертання Землі, що важливо для великих часових масштабів.
- 9. Отримано нові автомодельні розв'язки рівнянь моделі для одновимірного та осесимметричного розтікання нафтової плівки в гравітаційнов'язкому, гравітаційно-турбулентному і гравітаційно-в'язко-обертальному режимах для миттєвого і неперервного розливу. Показано, що при великих часових масштабах під нафтовою плівкою може виникати ламінарний пограничний шар Екмана, який призводить до істотного уповільнення розтікання порівняно з необертальним рухом та до відхилення швидкості розтікання нафти на 45° від напрямку швидкості в разі відсутності обертання.
- 10. Порівняння проведеного чисельного моделювання розповсюдження нафтового розливу внаслідок аварії на танкері "Hebei Spirit" у грудні 2007го року зі спостереженнями показало, що модель адекватно прогнозує положення нафтової плями та зони максимального ураження берегової лінії. Зроблено висновок, що для даного випадку процес дисперсії нафти під дією хвиль, що перекидаються, несуттєвий, хоча ефект поверхневих

хвиль необхідно враховувати при розрахунках стоксового дрейфу поверхневої плівки.

- 11. Розроблена нова математична тривимірна модель розповсюдження радіонуклідів, що описує перенос та турбулентну дифузію, ерозію та осідання адсорбованих радіонуклідів, процеси адсорбції, десорбції із завислими та донними намулами, процес розпаду радіонуклідів, враховує міграцію радіонуклідів у донному шарі за рахунок молекулярної дифузії та біотурбації. Розрахунки моделі перевірені на лабораторному експерименті по міграції радіонуклідів в донному ґрунті.
- 12. На основі побудованих алгоритмів розв'язку рівнянь переносу та дифузії медом частинок розроблений новий лагранжевий алгоритм розв'язку рівнянь моделі розповсюдження радіонуклідів в морському середовищі, що дозволяє моделювати процеси радіоактивного розпаду та адсорбціюдесорбцію на багатофракційних намулах. Розроблений алгоритм задання граничних умов для методу частинок, що заснований на розрахунку ймовірності зміни стану частинок біля границі. Проведене моделювання гіпотетичного аварійного викиду ¹³⁷Cs в Жовтому морі з урахуванням припливів, хвиль та намулів показало, що для даних умов велику роль для забруднення дна та розповсюдження розчиненого радіонуклідів на завислих намулах.
- 13. Лагранжева та ейлерова чисельні моделі розповсюдження радіонуклідів були застосовані до розрахунку наслідків аварії на АЕС Фукусіма. Розрахунки та аналіз даних вимірювань ¹³⁷Cs показали, що з часом після аварії в результаті дії інтенсивних течій вода очищується, та основним джерелом забруднення стають донні намули. Тому для довгострокових

прогнозів рівня забруднення важливе моделювання процесів, що відбуваються в донних намулах, зокрема біотурбація та дифузія в поровій воді. Дифузія в поровій воді та біотурбація призводить до ефективного зменшення потоку радіонуклідів в воду в процесі очищення дна за рахунок зменшення концентрації радіонуклідів на поверхні дна. Проведені розрахунки показали, що лагранжеве моделювання є найбільш ефективне на ранніх етапах розповсюдження забруднень та може бути використане в системах підтримки прийняття рішень при ядерних та хімічних аваріях.

АНОТАЦІЯ

Бровченко І.О. Чисельні лагранжеві методи в задачах прибережної гідродинаміки. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.02.05 "Механіка рідини, газу та плазми". – Інститут Гідромеханіки НАН України, Київ, 2017.

Розроблено новий алгоритм побудови чисельних схем з незміщеними моментами розподілу для розв'язання рівняння переносу та дифузії методом частинок в неоднорідному полі течій та коефіцієнту дифузії. Отримано нові аналітичні розв'язки для параметрів розподілу частинок для окремих випадків одновимірного руху.

Застосовано стохастичні методи до моделювання ймовірності зміну стану речовини. Розроблений метод оцінки точності при моделюванні таких процесів методами частинок. Одержано нові аналітичні розв'язки для процесів розпаду та адсорбції-десорбції радіонуклідів на багатофракційних намулах. Розроблений новий алгоритм моделювання граничних умов у методах частинок через розрахунок ймовірності зміни стану частинки в околі границі розрахункової області.

Вдосконалені гідродинамічні моделі прибережних процесів, що дозволяють описувати взаємодію хвиль та течій, негідростатичні гравітаційні та струменеві течії.

Розроблена нова лагранжева модель переносу багатофракційних намулів, включаючи суміш зв'язних та незв'язних намулів, міграцію намулів у донних шарах та зміну гранулометричного стану та пористості в шарах донних намулів

Розроблена нова лагранжева модель розповсюдження нафтопродуктів в прибережних зонах, що враховує вплив обертання Землі за рахунок утворення пограничного шару Екмана під поверхневою плівкою нафти, дозволяє моделювати взаємодію з нафтовими бонами та вплив дисперсантів на розповсюдження нафтового забруднення. Отримано нові автомодельні розв'язки для розтікання одновимірних та осесиметричних плям у гравітаційно-в'язкому та гравітаційно-в'язко-обертальному режимах. Розроблена модель застосована до моделювання наслідків нафтових аварій.

Розроблена нова лагранжева модель розповсюдження радіонуклідів в прибережних зонах, що включає радіоактивний розпад, адсорбцію-десорбцію на багатофракційних намулах, міграцію радіонуклідів у шарах донних намулів та у поровій воді. Модель застосовано до моделювання наслідків аварії на AEC Фукусіма.

Ключові слова: Чисельні лагранжеві методи, обчислювальна гідродинаміка.
Abstract

Brovchenko I.O. Numerical lagrangian methods in the coastal hydrodynamics problems. – Qualifying scientific manuscript.

Dissertation for a Doctor degree of physical and mathematical sciences by speciality 01.02.05 "Mechanics of fluid, gas and plasma". – Institute of Hydromechanics, National Academy of sciences of Ukraine, Kyiv, 2017

A new algorithm for constructing of numerical schemes for unbiased distribution of particles for solving the advection-diffusion transport equation by particles method in inhomogeneous field of currents and diffusion coefficient. New analytical solutions for particle distribution parameters for individual cases of one-dimensional motion were obtained.

Stochastic modeling techniques for the simulating of the probability of changing states of matter was applied. The method for estimation of accuracy of calculation for particle methods was developed. New analytical solutions for processes of decay and adsorption-desorption of radionuclides in multifractional sediments were obtained. A new algorithm for setting up the boundary conditions in particle method by calculation of the probability of the particle settling was developed.

Hydrodynamic models of the coastal processes were improved to allow to describe the interaction of waves and currents, nonhydrostatic gravity and jet currents.

A new Lagrangian model of multifractional sediment transport, including a mixture of cohesive and noncohesive sediments, sediment migration in the bottom

layers and change of grain sizes distribution and porosity in the layers of bottom sediments was developed.

A new Lagrangian model for oil spreading in coastal areas, that takes into account the effect of the Earth's rotation due to the formation Ekman boundary layer near the surface film of oil to simulate the interaction with oil booms and impact of using of dispersants on oil pollution was developed. A new self-similar solutions for one-dimensional and axially symmetric spills in gravity-viscous and viscous-gravity-rotational regimes were obtained. The model was used for modeling of the effects of oil accidents.

A new Lagrangian models of transport of radionuclides in coastal areas, including radioactive decay, adsorption-desorption on multifractional sediments, migration of radionuclides in bottom sediment layers and in the pore water was developed. The model was applied to the simulation of the accident at the Fukushima NPP.

Key words: Lagrangian numerical methods, computational fluid dynamics.

Розділ 8

ДОДАТКИ

8.1 Алгоритм швидкого сортування частинок

В даному розділі описується алгоритм швидкого сортування частинок, необхідність якого виникає під час розрахунку сил взаємодії частинок. У всіх задачах, де виникають подібні сили (гравітаційні, кулонівські, тиск в рідинах), для розрахунку сил взаємодії на кожному часовому кроці моделі необхідно розрахувати відстані між частинками. В обчислювальній гідродинаміці широко використовується метод SPH [222, 24] (гідродинаміка згладжених частинок), в якому суцільне середовище моделюється методом взаємодіючих частинок. При загальній кількості частинок N для розрахунку відстаней між усіма частинками буде потрібно N^2 операцій. У більшості застосувань сили взаємодії є короткодіючими і їх можна не враховувати починаючи з деякої відстані, яку будемо називати ефективним радіусом взаємодії R_f . Але для того щоб з'ясувати, чи потрібно враховувати будь-яку частку, треба спочатку визначити відстань до неї, що, в свою чергу, дає кількість операцій близько N^2 . Виникає задача про сортування частинок по координатам таким чином, щоб обчислювати відстані лише для деякої підмножини N_n загальної кількості частинок *N*. Для цього для двовимірної задачі, слідуючи [48], вводиться

ланцюжкова сітка - решітка розмірністю $M_x \times M_y$, що покриває розрахункову область з розміром комірки, рівним R_f . Тоді в силу, що діє на частинку, що знаходиться в комірці, надаватимуть ненульовий внесок тільки ті частинки, які знаходяться або в цій же комірці, або в дев'яти сусідніх. Для визначення, які саме частинки знаходяться в сусідніх комірках, потрібно провести попереднє сортування частинок. Попередня адресна сортування проводиться згідно з алгоритмом, описаним [48], в такий спосіб. Спочатку потрібно ввести два допоміжних сортувальних масива: масив заголовків H розмірністю $M_x \times M_y$ і ланцюжковий масив LL розмірністю N. Перед початком сортування ці масиви слід обнулити і для кожної частинки i виконати дії:

1. Визначити номер комірки ланцюжкової сітки *q*, в якій знаходиться частинка.

2. Добавити частинку *i* в заголовок списку для комірки *q*:

$$LL(i) = H(q), \quad H(q) = i.$$

Після проведеного сортування номер першої частки, що знаходиться в комірці q, можна визначити як i = H(q), а всі наступні частинки можна перебрати, використовуючи співвідношення i = LL(i) доти, поки отриманий номер частинки не стане рівним нулю. Таким чином можна визначити всі частинки, що знаходяться в комірці q. Після пересування частинок (на наступному часовому кроці) необхідно знову обнулити сортувальні масиви і повторити процедуру сортування. Якщо припустити, що частинки рівномірно розташовуються по всій розрахунковій області, то повне число перевірок приблизно дорівнює $9N^2/M_xM_y$, що дає значне зменшення числа операцій при малих радіусах взаємодії по відношенню до лінійних розмірів розрахункової області. Детальніше алгоритм сортування викладений в [13].

8.2 Алгоритм швидкого пошуку частинок в комірках

Розглянемо тепер задачу, в якій сили, що діють на частинки, задані в вузлах нерухомою сітки. У цьому випадку необхідна інтерполяція даних з вузлів сітки в точки розташування частинки. Для того щоб застосувати будь-який з методів інтерполяції спочатку необхідно визначити найближчі до частинки вузли сітки або комірку сітки, в якій знаходиться частинка. У разі прямокутних рівномірних сіток розташування частинки знаходиться в дві операції:

$$i = [(x - x_o)/dx] + 1,$$

 $j = [(y - y_0)/dy] + 1.$

Тут (i, j) – номер комірки прямокутної сітки, (x, y) – координати частинки, (x_0, y_0) – координати лівого нижнього кута прямокутної сітки, (dx, dy) – роздільна здатність сітки. Тут і надалі операція [] означає взяття цілої частини числа.

У разі нерівномірних, криволінійних або неструктурованих сіток задача пошуку номеру комірки стає складнішою і проблема вибору оптимального алгоритму пошуку більш важливою, так як шуканий алгоритм повинен застосовуватися на кожному часовому кроці моделі. Розглянемо загальний випадок сітки, що складається з трикутних елементів. Так як будь-яку сітку з елементів складної форми можна перетворити в сітку з трикутних елементів методами тріангуляції, то викладений нижче алгоритм придатний для будь-яких випадків. Введемо позначення: i_e - номер трикутного елемента, (x_i, y_i) , $i = \overline{1,3}$ - координати цих вузлів. Припускаємо, що вузли кожного трикутного елемента розташовані по порядку проти годинникової стрілки. Тоді критерієм потрапляння частинки в даний елемент можна вважати по-

зитивний знак векторного добутку:

$$(x_i - x, y_i - y) \times (x_{i+1} - x, y_{i+1} - y) > 0, \quad \forall i = \overline{1, 3}.$$
 (8.1)

Для того щоб прискорити знаходження необхідного елемента, введемо нову рівномірну прямокутну сітку з розміром комірки, рівним максимальному розміру всіх елементів сітки з трикутних елементів. Позначимо роздільну здатність допоміжної прямокутної сітки (D_{XS}, D_{YS}) і попередньо проведемо сортування всіх трикутних елементів по комірках цієї сітки. Для цього модифікуємо алгоритм ланцюжкового сортування, що описаний в розділі 8.1. Модифікація алгоритму необхідна, так як кожен трикутний елемент може перебувати більше ніж в одній комірці ланцюжкової сітки. Максимально кожен трикутник може перебувати одночасно в чотирьох комірках ланцюжкової сітки. Визначимо для кожного трикутника максимальні і мінімальні координати:

$$x_{e\min} = \min(x_i), y_{e\min} = \min(y_i), i = 1, 3,$$
$$x_{e\max} = \max(x_i), y_{e\max} = \max(y_i), i = \overline{1, 3}.$$

Для сортування трикутних елементів введемо масив заголовків $H(D_{XS} * D_{YS}, 4)$ та ланцюжковий масив $LL(N_e, 4)$. Для кожного з N_e трикутників проведемо наступні операції:

1. Визначимо номера комірок q_j , $j = \overline{1,4}$, в які можуть попасти частини трикутного елементу i_e :

$$q_{1} = \left([x_{e\min}/DXS] + 1, [y_{e\min}/D_{YS}] + 1 \right),$$

$$q_{2} = \left([x_{e\max}/D_{XS}] + 1, [y_{e\min}/D_{YS}] + 1 \right),$$

$$q_{3} = \left([x_{e\max}/D_{XS}] + 1, [y_{e\max}/D_{YS}] + 1 \right),$$

$$q_{4} = \left([x_{e\min}/D_{XS}] + 1, [y_{e\max}/D_{YS}] + 1 \right).$$

2. Для кожної комірки q_j :

$$LL(i_e, j) = H(q_j, j),$$

 $H(q_j, j) = i_e.$

Слід зазначити, що описана вище процедура попереднього сортування проводиться один раз перед основним часовим циклом і більше не повторюється. Алгоритм пошуку трикутного елемента, в якому знаходиться частинка на кожному часовому кроці, буде виглядати так:

1. Перевірити елемент, в якому знаходилася частинка на попередньому часовому кроці за критерієм 8.1.

2. Визначити комірку ланцюжкової сітки, в якій знаходиться частинка:

$$q = ([x/D_{XS}] + 1, [y/D_{YS}] + 1).$$

3. Перебрати всі трикутні елементи, які повністю, або частково знаходяться в комірці q. Для цього потрібно зробити наступні дії в циклі $j = \overline{1, 4}$:

– визначити номер першого трикутника $i_e = H\left(q, j\right);$

– повторювати доти, доки $i_e \neq 0$:

у випадку, якщо задовольняється умова 8.1 для трикутника *i_e* вийти з усіх циклів;

$$i_e = LL(i_e, j).$$

4. Запам'ятати номер трикутника i_e для пошуку на наступному часовому кроці.

Після знаходження номера трикутного елемента можна використовувати будь-який з відомих методів інтерполяції, використовуючи значення змінних у вузлах складових елемента, а також значення в вузлах навколишніх елементів. Детальніше алгоритм швидкого пошуку викладений в [13].

8.3 Алгоритм взаємодії нафтових крапель з берегом та бонами

Кожна частинка при чисельному розв'язку рівнянь руху переміщується до тих пір, поки не перетне сегмент берегової лінії або нафтового бону і не виявиться в гіпотетичній точці на землі або за боном. Якщо частинка перетинає берегову лінію, то вона вважається приклеєною до берега у точці, де вона перетнула берегову лінію. Подібна модель взаємодії з береговою лінією була запропонована в [322], однак тут пропонується більш простий, на нашу думку, алгоритм її реалізації.

Нехай берегова ліній складається з прямолінійних відрізків. Розташування *i*-го сегменту задається координатами кінців відрізку:

$$i: (x_i, y_i) \to (x_{i+1}, y_{i+1}), \qquad i = \overline{1, N_{sh}}$$

$$(8.2)$$

де N_{sh} – кількість берегових сегментів. Для того, щоб дізнатися, чи перетнула частинка берегову лінію, необхідно перевірити умову перетину кожного берегового сегменту окремо. Позначимо координати частинки на *n*-му та n + 1-му часовому шарі як (x_n, y_n) та (x_{n+1}, y_{n+1}) , відповідно. Запишемо рівняння прямих, на яких лежить береговий сегмент та відрізок траєкторії частинки:

$$\begin{cases} A_1 x + B_1 y = C_1 \\ A_2 x + B_2 y = C_2 \end{cases}$$
(8.3)

де $A_1 = y_{i+1} - y_i$, $B_1 = x_i - x_{i+1}$, $C_1 = x_i A_1 + y_i B_1$ и $A_2 = y_{n+1} - y_n$, $B_2 = x_n - x_{n+1}$, $C_2 = x_n A_2 + y_n B_2$. Знайдемо відстань від кінців відрізку траєкторії частинки до прямої, що задає сегмент берегової лінії:

$$d_1 = \frac{x_n A_1 + y_n B_1 - C_1}{\sqrt{A_1^2 + B_1^2}}, \quad d_2 = \frac{x_{n+1} A_1 + y_{n+1} B_1 - C_1}{\sqrt{A_1^2 + B_1^2}}$$
(8.4)

Очевидно, що відрізок траєкторії частинки перетинає лінію, на якої лежить береговий сегмент, якщо d_1 і d_2 мають різні знаки, або одне з цих чисел дорівнює нулю, тобто якщо

$$d_1 d_2 \le 0 \tag{8.5}$$

Для того, щоб частинка перетнула береговий сегмент необхідно, щоб разом із умовою (8.5) виконувались умови:

$$(x_c - x_i)(x_c - x_{i+1}) \le 0, \qquad (y_c - y_i)(y_c - y_{i+1}) \le 0$$
(8.6)

де x_c, y_c – координати точки перетину прямих (8.3), які обчислюються за формулами:

$$x_c = \frac{C_1 B_2 - B_1 C_2}{A_1 B_2 - B_1 A_2}, \qquad y_c = \frac{A_1 C_2 - C_1 A_2}{A_1 B_2 - B_1 A_2}$$
(8.7)

Слід зазначити, що при такому підході знаменник в формулах (8.7) ніколи не обернеться в нуль. Нагадаємо, що звернення знаменника в нуль означає, що прямі (8.3) або паралельні, або збігаються. Паралельними вони бути не можуть, інакше не виконувалася б умова (8.5), яку ми перевіряємо до обчислення координат перетину (8.7). Збігаються вони теж не можуть, так як це означало б, що частинка перетнула даний сегмент на попередньому часовому кроці, і на поточному часовому кроці ці обчислення не проводилися б.

Таким чином, частинка, для якої виконалися послідовно умови (8.5,8.7) вважається прилипшою до берега в точці з координатами (x_c, y_c) . Така частинка знаходиться в точці "прилипання" і не бере участі в загальних розрахунках до тих пір, поки вона не буде "змита" назад в воду. Частинка нафти, що потрапила на берег може залишитися там назавжди, а може бути змита в воду в залежності від типу берегової лінії і зовнішніх умов. Якщо перший крок частинки, яка відкріплюється від берега переносить її знову на землю, то така частинка залишається прилипшою до берега в тій же точці до наступної спроби бути змитою в воду. Якщо ж частинка в результаті першого кроку потрапляє в воду, то вона переміщується в обчислену точку і далі починає себе вести як звичайна плаваюча частинка нафти.

В алгоритмі "змивання" використовуємо напівемпіричну модель [322]. Згідно [322], для визначення часу знаходження частинки на береговій лінії вводиться поняття часу напіввиведення (*half life*) нафти. Позначивши за s(t)кількість частинок на якій-небудь ділянці берега і прийнявши деяку початкову умова $s(0) = s_0$ можемо записати, що

$$s(t) = s_0 \left(\frac{1}{2}\right)^{t/\tau_{ht}} \tag{8.8}$$

де τ_{ht} називається часом напівжиття, тобто через час τ_{ht} половина нафти буде "змита" у воду, а половина залишиться на березі. В роботі [322] наводяться наступні характерні значення часу для різних типів берегу. каменистый, скалистый берег $\tau_{ht} \approx 3600 \text{ c} (1 \text{ час})$ песчаный берег $\tau_{ht} \approx 86400 \text{ c} (1 \text{ день})$ заросшие, болотистые $\tau_{ht} \approx 31536000 \text{ c} (1 \text{ год})$

Тоді нескладно обрахувати, що після одного часового кроку Δt , кількість частинок, що має бути "змита" за чей час, буде дорівнювати:

$$s(t) - s(t + \Delta t) = s(t) \left(1 - \left(\frac{1}{2}\right)^{\Delta t/\tau_{ht}} \right)$$
(8.9)

Для кожного берегового сегмента в кожен момент часу спочатку підраховується скільки частинок там знаходиться. Потім, за формулою (8.9) розраховується скільки частинок має бути видалено з цього сегмента. Для того, щоб визначити які саме частинки повинні бути обрані для "змивання" існує кілька способів. Наприклад, частинки можуть змиватися в порядку їх потрапляння на цей сегмент, або за порядковим номером частинок, або вибирати їх випадковим чином. У нашій моделі для зручності чисельних розрахунків частки були пронумеровані для кожного сегмента окремо і відбиралися за цими порядковими номерами. Так як кількість частинок, що розраховується за формулою (8.9) буде нецілим, то авторами [322] було запропоновано округлювати це число до цілого, а залишок накопичувати для наступних часових кроків. У нашій моделі ми так само обчислювали цілу частину від кількості частинок s_{int} і залишок s_{res} . А далі, використовуючи генератор рівномірно розподілених на (0, 1) випадкових чисел, додавали ще одну частинку з ймовірністю s_{res}. Тобто додаткова частинка може бути відібрана, а можливо ні. Така ймовірність тим більше, чим більше залишок від округлення s_{res} . Такий підхід дає однакові результати при досить великій кількості часових кроків, і, на нашу думку, дозволяє дещо спростити чисельну реалізацію алгоритму.

Бібліоґрафія

- [1] Баренблатт Г.И. Подобие, автомодельность, промежуточная ассимптотика.– Л.: Гидрометеоиздат, 1978.– 208 с.
- [2] Беженар Р.В., Бровченко И.А., Железняк М.И., Кошебуцкий В.И., Мадерич В.С. Моделирование радиоактивного загрязнения морской среды при аварии на АЭС Фукусима // Збірник наукових праць СНУЯЕтаП.– 2012.– 4(44).– С. 82–91.
- [3] Бровченко И.А., Мадерич В.С. Численный лагранжевый метод моделирования распространения поверхностных пятен нефти // Прикладная гидромеханика.- 2002.- 4(4).- С. 23-31.
- [4] Бровченко И. Модель образования спектра нефтяных капель в приповерхностном слое океана // Прикладная гидромеханика. – 2004. – 6 N2. – С. 20-26.
- [5] Бровченко И.А. Численное моделирование распространения нефтепродуктов в прибрежных зонах морей и внутренних водоёмах.– дис. канд. физ.-мат. наук, ИПММС: Киев, 2005.– 154 с.
- [6] Бровченко И. А., Мадерич В.С. Двумерная лагранжева модель переноса многофракционных наносов // Прикладная гидромеханика. 2006. -81(2). - С. 9-17.
- [7] Бровченко И., Канарская Ю., Мадерич В., Терлецкая Е. Трехмерное негидростатическое моделирование воздействия струй судовых движителей на дно и берега // Збірник праць конференції "Моделювання 2006".-2006, - С. 137-141.

- [8] Бровченко И.А., Мадерич В.С. Трехмерная лагранжева модель переноса многофракционных наносов и ее применение к описанию гравитационных течений // Прикладная гидромеханика. – 2008. – 83(2). – С. 3–12.
- [9] Бровченко И.А., Городецкая Н.С., Мадерич В.С., Никишов В.И., Терлецкая Е.В. Взаимодействие внутренних уединенных волн большой амплитуды с препятствием // Прикладная гидромеханика.- 2007.- 9(81).-С. 3-7.
- [10] Бровченко И. Применение методов частиц в задачах с нестуктурированными сетками // Мат. машины и системы. – 2010. – **3**. – С. 111–115.
- [11] Бровченко И.А, Мадерич В.С. Исследование роли подводных каньонов в выносе наносов из береговой зоны восточного побережья Черного моря // International Journal of Civil and Structural Engineering.- 2011.- 7(2).-C. 39-46.
- [12] Бровченко И.А, Мадерич В.С., Терлецкая К.В. Численное моделирование трехмерной структуры течений в районе глубоководных каньонов восточного побережья Черного моря // International Journal of Civil and Structural Engineering.- 2011.- 7(2).- С. 47-53.
- [13] Бровченко И.А., Мадерич В.С., Никишов В.И., Терлецкая Е.В. Численное моделирование взаимодействия внутренних волн с подводным прямоугольным препятствием // Збірник праць конференції "Моделювання 2010".- 2010, - С. 222-229.
- [14] Бровченко І.О., Мадерич В.С., Терлецька К.В., Беженар Р.В., Кошебуцький В.І. Різномасштабне чисельне моделювання циркуляції в Чорному морі та Дніпро-Бузькому лимані // Збірник праць конференції "Моделювання 2012".– 2012, – С. 121–124.
- [15] Бровченко І., Мадерич В., Jung К.Т. Вплив сили Коріоліса на розтікання нафти при неперервному та миттєвому розливі // Збірник праць конференції "Моделювання 2013".– 2013, – С. 69–72.

- [16] Бровченко І. Багатофраційна модель переносу суміші зв'язних і незв'язних намулів в Жовтому морі // Збірник праць конференції "Моделювання 2014". – 2014, – С. 41–52.
- [17] *Бровченко І.О.* Модель міграції радіонулідів у донному шарі // Прикладна гідромеханіка.– 2016.– **18(90)**.– С. 11–16.
- [18] Бровченко І., Мадерич В. Багатофазна лагранжева модель дисперсії радіонуклідів у водному середовищі // Збірник праць конференції "Моделювання 2016".– 2016, – С. 99–102.
- [19] Вентцель А. Д. Курс теории случайных процессов. М.: Наука, 1996. 400 с.
- [20] Головизнин В.М., Кондратенко П.С., Матвеев Л. В. под. ред. чл.-кор. РАН Л. А. Большова Аномальная диффузия радионуклидов в сильнонеоднородных геологических формациях.– М.: Наука, 2010.– 342 с.
- [21] Гуржій О.А., Кривда О.В. Моделювання наслідків техногенноприродних катастроф у прибрежній зоні світового океану // в кн. "Інформаційне забеспечення вирішення еколого-енергетичних проблем сталого розвитку суспільства" (під ред. Лук'яненко С.О., Караєвої Н.В.). – Київ: Тамподек XXI.– 2012, – С. 186-206.
- [22] Ермаков С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы.– М.: ФИЗМА-ТЛИТ, 1975.– 472 с.
- [23] Зализняк В.Е. Основы вычислительной физики. Ч. 2: Введение в методы частиц.– Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2006.– 156 с.
- [24] Каліон В.А., Бровченко І.О., Кущан А.О. Використання методу гідромеханіки згладжених часток для розв'язання задач гідродинаміки довкілля // Вісник Київського університету. – (Серія "Фізико-математичні науки").– 2007.– 4.– С. 77–83.
- [25] Канарская Ю.В., Мадерич В.С. Численная негидростатическая модель стратифицированных течений // Прикладная гидромеханика. 2002.-76(3).- С. 12-21.

- [26] Колмогоров А.Н. Об аналитических методах в теории вероятностей // УМН.– 1938.– **5(5)**.– С. 5–41.
- [27] Кочин Н.Е., Кибель И.А., Розе Н.В. Теоретическая гидромеханика, в 2-х томах.– Москва: Физматгиз, 1963.– 1311 с.
- [28] Лойцянский Л. Механика жидкости и газа.- Москва: Физматгиз, 1959.-784 с.
- [29] *Мадерич В.С., Бровченко И. А.* Влияние обрушения ветровых волн на структуру приповерхностного слоя турбулентного слоя // Прикл. гидромеханика.– 2003.– **77**, N 3.– C. 51–57.
- [30] Мадерич В., Беженар Р., Бровченко И. Трехмерное моделирование взаимодействия волн и течений // Прикладна гідромеханіка.– 2010.– 12(84).– С. 38–46.
- [31] *Мадерич В.С., Терлецкая К.В., Бровченко И.А.* Структура и динамика гравитационных течений на склоне: поток трансформированных под ледником Ронне-Фильхнера вод в море Уэддела // Украинский Антарктический Журнал.– 2010.– **9**.– С. 263–270.
- [32] *Мадерич В.С., Терлецкая Е.В., Бровченко И.А.* Неполная автомодельность внутренних волн второй моды в слое раздела // Прикладна гідромеханіка.– 2014.– **15(88)**, №2.– С. 15–22.
- [33] Мадерич В.С., Терлецкая Е.В., Бровченко И.А. Фронтальное столкновение внутренних волн большой амплитуды // Фундаментальная и прикладная гидрофизика.- 2015.- 8(3).- С. 44-53.
- [34] *Матвеев Н.М.* Методы интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений (3-е изд.).– М.: Высшая школа, 1967.– 546 с.
- [35] *Монин А.С., Яглом А.М.* Статистическая гидромеханика.– М.: Наука, 1965.– 640 с.
- [36] *Озмидов Р. В.* Диффузия примесей в океане. Л.: Гидрометеоиздат, 1986. 280 с.

- [37] Приходъко А. А. Компьютерные технологии в аэрогидродинамике и тепломассообмене.– Киев: Наукова думка, 2003.– 382 с.
- [38] Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1977. 656 с.
- [39] Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Численные методы решения задач конвекции-диффузии.– М.: Эдиториал УРСС, 1999.– 248 с.
- [40] Терлецкая Е.В., Мадерич В.С., Бровченко И.А. Трансформация уединенных внутренних волн большой амплитуды над ступенькой на дне // Прикладна гідромеханіка. – 2009. – 11(83). – С. 65–76.
- [41] Терлецкая К.В., Мадерич В.С., Бровченко И.А. Сильно-нелинейные внутренние сейши в удлинненных стратифицированных озерах и феномен «озерных монстров» // Прикладна гідромеханіка.– 2011.– 13(85), №1.– С. 51–55.
- [42] *Терлецкая К.В., Мадерич В.С., Бровченко И.А.* Взаимодействие уединенных внутренних волн при их фронтальном взаимодействии // Прикладна гідромеханіка.– 2011.– **13(85)**, №4.– С. 41–45.
- [43] Терлецкая Е.В., Семин С.С., Степанянц Ю.А., Бровченко И.А. Мадерич В.С. Моделирование трансформации волновых пакетов поверхностных волн в водоеме с резким изменением глубины // Прикладна гідромеханіка.- 2015.- 17(89),№1.- С. 3-9.
- [44] Терлецкая Е.В., В. Семин, Талипова Т.Смирнов Д. Бровченко И. Трансформация внутренних уединенных волн понижения над донной ступенькой в трехслойной стратифицированной жидкости // Прикладна гідромеханіка.- 2015.- 17(89),№2.- С. 56-63.
- [45] Терлецкая Е.В., Мадерич В.С., Бровченко И.А. Численное исследование взаимодействия внутренних уединенных волн второй бароклинной моды при их фронтальном столкновении // Прикладна гідромеханіка.– 2015.– 17(89),№3.– С. 44–55.
- [46] Фихтенгольц Г.М. Курс дифференциального и интегрального исчисления, т.3.– М.: Физматгиз, 1960.– 656 с.

- [47] *Флетчер К.* Вычислительные методы в динамике жидкостей, т.1.– М.: Мир, 1991.– 504 с.
- [48] Р. Хокни, Джс. Иствуд. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987. – 638 с.
- [49] Abril J.M., Fraga E. Some physical and chemical features of the variability of k_d distribution coefficients of radionuclides // Journal of Environmental Radioactivity.- 1996.- **30**.- P. 253-270.
- [50] Ali A., Thiem Ø., Berntsen J.. Numerical simulation of flow and aquaculture organic waste dispersion in a curved channel // Ocean Dynamics.- 2013.- 63(9).- P. 1073-1082.
- [51] Aldridge J.N., Kershaw P., Brown J., McCubbin D., Leonard K.S., Young E.F. Transport of plutonium (Pu-239/240) and caesium (Cs-137) in the Irish Sea: comparison between observations and results from sediment and contaminant transport modelling // Continental Shelf Research.- 2003.-23(9).- P. 869-899.
- [52] Ambe D., Kaeriyama H., Shigenobu Y., Fujimoto K., Ono T., Sawada H., Saito H., Miki S., Setou T., Morita T., Watanabe T. A high-resolved spatial distribution of radiocesium in sea sediment derived from Fukushima Dai-ichi Nuclear Power Plant // Journal of Environmental Radioactivity.- 2014.-133.- P. 264-275.
- [53] Aoyama M., Hirose K., Nemoto K., Takatsuki Y., Tsumune, D. Water Masses Labeled with Global Fallout ¹³⁷Cs Formed by Subduction in the North Pacific. // Geophysical Research Letters.- 2008.- 35(1).- P. L01604.
- [54] Aoyama M., Fukasawa M., Hirose K., Hamajima Y., Kawano T., et al. Cross Equator Transport of ¹³⁷Cs from North Pacific Ocean to South Pacific Ocean (Beagle2003 Cruises) // Progress In Oceanography.- 2011.- 89(1-4).-P. 7-16.
- [55] Aoyama M., Hamajima Y., Hult M., Uematsu M., Oka E., et al. ¹³⁴Cs and ¹³⁷Cs in the North Pacific Ocean Derived from the March 2011 Tepco Fukushima Dai-Ichi Nuclear Power Plant Accident, Japan. Part One: Surface

Pathway and Vertical Distributions. // ournal of oceanography.- 2015.- 72.-P. 53-65.

- [56] Ashgriz N., Poo J.Y. FLAIR: Flux line-segment model for advection and interface reconstruction // Journal of Computational Physics.- 1991.-93(2).- P. 449-468.
- [57] Ardhuin F., Rascle N., Belibassakis K. A. Explicit wave-averaged primitive equations using a generalized Lagrangian mean // Ocean Modelling.- 2008.-20(1).- P. 35-60.
- [58] Ardhuin F., Marié L., Rascle N., Forget P., Roland A. Observation and Estimation of Lagrangian, Stokes, and Eulerian Currents Induced by Wind and Waves at the Sea Surface // Journal of Physical Oceanography.- 2009.-39(11).- P. 2820-2838.
- [59] Ardhuin F., et al. Semiempirical Dissipation Source Functions for Ocean Waves. Part I: Definition, Calibration, and Validation // Physical Oceanography.- 2010.- 40(9).- P. 1917-1941.
- [60] Ariathurai R., Krone R. B. Finite element model for cohesive sediment transport // J. Hydr. Div.ASCE.- 1976.- 104.- P. 323-328.
- [61] Ariathurai C.R., Arulanandan K. Erosion rates of cohesive soils // Journal of Hydraulics Division.- 1978.- 104(2).- P. 279-282.
- [62] ASCE Task Committee on Modelling of Oil Spills of the Water Resources Engineering Division State of art review of modeling transport and fate of oil spills. // J. Hydraulic Eng.- 1996.- 122 N 11.- P. 594-609.
- [63] Ata R., Soulaïmani A. A stabilized SPH method for inviscid shallow water flows. // International journal for numerical methods in fluids.- 2004.-47(2).- P. 139-159.
- [64] Babanin A. V., Hsu T.-W., Roland A., Ou S.-H., Doong D.-J., Kao C. C. Spectral wave modelling of Typhoon Krosa // Nat. Hazards Earth Syst. Sci..-2011.- 11).- P. 501-511.

- [65] Barta J. Uber die n\u00e4herungsweise L\u00f6sung einiger zweidimensionaler Elastizit\u00e4tsaufgaben // ZAMM.- 1937.- 17(3).- P. 184-185.
- [66] Battjes J. A., J. Janssen Energy loss and set-up due to breaking of random waves // Proceedings of the 16th international conference on coastal engineering.- 1978, - P. 569-587.
- [67] Ben-Naim E., Krapivsky P. L., Redner S. Fundamental Kinetic Processes.-Boston University: , 2008.– 269 p.
- [68] Bennis A.-C., Ardhuin F. Comments on "The Depth-Dependent Current and Wave Interaction Equations: A Revision" // Journal of Physical Oceanography.- 2011.- 41(10).- P. 2008-2012.
- [69] Bian C., Jiang W., Quan Q., Wang T., Greatbatch R.J., Li W. Distributions of suspended sediment concentration in the Yellow Sea and the East China Sea based on field surveys during the four seasons of 2011 // Journal of Marine Systems.- 2013.- 121-122.- P. 24-35.
- [70] Bidlot, J.R., J. H. Damian, A. W. Paul, L. Roop, S.C. Hsuan Intercomparison of the Performance of Operational Ocean Wave Forecasting Systems with Buoy Data // Weather and Forecasting.- 2002.- 17.- P. 87-310.
- [71] Blaauw H.G, van de Kaa E.J Erosion of bottom and sloping banks caused by the screw-race of maneuvering ships // International Harbour Congress, Antwerp, Belgium.- 1978.- 1.- P. 1-16.
- [72] Black E. E., Buesseler K. O. Spatial variability and the fate of cesium in coastal sediments near Fukushima, Japan // Biogeosciences.- 2014.- 11. P. 5123-5137.
- [73] Blumberg A.F., Mellor G. L. A description of a three-dimensional coastal oceanic circulation // N. Heaps.(ed), Washington, D.C. Am. Geoph. Union.-1987.- 1.- P. 1-16.
- [74] Brovchenko I., Kuschan A., Maderich V., Shliakhtun M., Koshebutsky V., Zheleznyak M. Model for oil spill simulation in the Black Sea // Proc 3rd Int Conf Oil Spills, Oil Pollution and Remediation, 16-18 Sept 2003, Bogazici Univ, Istanbul.- 2003, - P. 101-112.

- [75] Brovchenko I., Kuschan A., Maderich V., Shliakhtun M., Yuschenko S., Zheleznyak M. The modelling system for simulation of the oil spills in the Black Sea // Dahlin H, Flemming NC, Nittis K., Petersson SE (eds) Building the European Capacity in Operational Oceanography Proc. Third Int Conf on EuroGOOS, 3-6 December 2002, Athens, Greece. Elsevier Oceanography Series, Elsevier.- 2003.- 69.- P. 586-591.
- [76] Brovchenko I., Maderich V., Kanarska Y., Fenical S., Terletska K., Tirindelli M. Non-hydrostatic Modeling of Bottom and Bank Stability Subjected by Ship Propeller Jets // Proceedings of on 30th International Conference Coastal Engineering (San-Diego, USA 2006).- 2006.- 2.- P. 1222-1233.
- [77] Brovchenko I., Kanarska J., Maderich V., Terletska K. 3D non-hydrostatic modeling of bottom stability under impact of the turbulent ship propeller jet // Acta Geophysica.- 2007.- 55(1).- P. 47-55.
- [78] Brovchenko I., Maderich V. Modelling of the Navigation Channel Impacts on Coastal Zone of the Danube Delta // Proc. of the 9th Int. Conf. on the Mediterranean Coastal Environment, MEDCOAST 09, 2009, .- 2009.- 2.-P. 899-905.
- [79] Buckmaster J. Viscous-gravitational spreading of an oil slick // J. Fluid Mech..- 1973.- 59.- P. 481-491.
- [80] Booij N., Ris R.C., Holthuijsen L.H. A third-generation wave model for coastal regions. Part I. Model description and validation // J. Geoph. Res.-1999.- 104.- P. 7649-7666.
- [81] Børretzen P., Salbu, B. Estimation of apparent rate coefficients for radionuclides interacting with marine sediments from Novaya Zemlya // Journal of Environmental Radioactivity.- 2002.- 61.- P. 1-20.
- [82] Boudreau B.P. Diagenetic models and their implementation.- 1997: Berlin, Heidelberg, New York, Springer.- 414 p.
- [83] Boudreau B.P. Modelling mixing and diagenesis//In Interactions Between Macro- and Microorganisms in Marine Sediments (eds. E. Kristensen, J. E. Kostka and R. R. Haese)American Geophysical Union.-2005.-P. 323-340

- [84] Bourgault D., Kelley D.E., Galbraith P.S. Interfacial solitary wave run-up in the St.Lawrence Estuary // J.Mar.Res.- 2005.- 63(6).- P. 1001--1015.
- [85] Buesseler K., Aoyama M., Fukasawa M. Impacts of the Fukushima Nuclear Power Plants on Marine Radioactivity // Environmental Science & Technology.- 2011.- 45(23).- P. 9931-9935.
- [86] Buesseler K., Jayne S., Fisher N., Rypina I., Baumann H., et al. Fukushima-Derived Radionuclides in the Ocean and Biota Off Japan // Proceedings of the National Academy of Sciences.- 2012.- 109(16).- P. 5984-88.
- [87] Buesseler K., Dai M., Aoyama M., Benitez-Nelson C., Charmasson S., Higley K., Maderich V., Masque P., Morris P. J., Oughton D., Smith J. N. Fukushima Daiichi-derived radionuclides in the Ocean: transport, fate, and impacts. // Annual Reviews of Marine Sciences.- 2017.- 9.- P. 1.1-1.31.
- [88] Burchard H. Applied turbulence modelling in marine waters.- Berlin: Springer, 2001.- 252 p.
- [89] Camp D., Berg J. The spreading of oil on water in the surface-tension regime // J. Fluid Mech..- 1983.- 184.- P. 445--462.
- [90] Carroll J., Harms I.H. Uncertainty analysis of partition coefficients in a radionuclide transport model // Water Research. – 1999. – 33(11). – P. 2617–2626.
- [91] Casulli V, Stelling G Numerical simulation of 3D quasi-hydrostatic freesurface flows // J. Hydraul. Eng. - 1998. - 124. - P. 678--686.
- [92] Cavaleri L., Alves J.H. G. M., Ardhuin F., Babanin A., Banner M., Belibassakis K., Benoit M., Donelan M., Groenweg J., Herbers T. H. C., Hwang P., Janssen P. A. E. M., Janssen T., Lavrenov I. V., Magne R., Monbaliu J., Onorato M., Polnikov V., Resion D., Rogers W. E., Sheremet A., McKee Smith J., Tolman H. L., Van Vledder G., Wolf J., Young I. Wave modelling the state of the art // Progress in Oceanography.- 2007.- 75(4).- P. 603-674.
- [93] Chao S.-Y. Hyperpychal and buoyant plumes from a sediment-laden rivers // J. Geoph. Res.- 1998.- 103.- P. 3067-3081.

- [94] Chartin C., Evrard O., Onda Y., Patin J., Lefèvre I., et al. Tracking the Early Dispersion of Contaminated Sediment Along Rivers Draining the Fukushima Radioactive Pollution Plume. // Anthropocene.- 2013.- 1.-P. 23-34.
- [95] Chebby R. Inertia-gravity spreading of oil on water // Chem. Eng. Sci..-2000.- 55.- P. 4953-4960.
- [96] Chebby R. Viscous-gravity spreading of oil on water // AIChE J.- 2001.-47.- P. 288-294.
- [97] Chebby R., Elrahman S.A, Ahmed H.K. Experimental study of unidurectional viscous-gravity spreading of oil on water // J. Chem. Eng. Japan.- 2002.- 35.- P. 1330-1334.
- [98] Chebby R., Abubakr A.M., Jabbar A.Y.A.A., Al-Qatabri A.M. Experimental study of axisymmetric viscous-gravity spreading of oil on water // J. Chem. Eng. Japan.- 2002.- 35.- P. 304-308.
- [99] Chino Mio, Nakayama H., Nagai H., Terada H., Katata G., Yamazawa H. Preliminary Estimation of Release Amounts of ¹³¹I and ¹³⁷Cs Accidentally Discharged from the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant into the Atmosphere // Journal of Nuclear Science and Technology.- 2011.- 48(7).-P. 1129-1134.
- [100] Choi J.K., Park Y.J., Lee B.R., Eom J., Moon J.E., J.H Application of the Geostationary Ocean Color Imager (GOCI) to mapping the temporal dynamics of coastal water turbidity // Remote Sensing of Environment.-2014.- 146.- P. 24-35.
- [101] Choi B.H., Kim K.O., Yuk J.H., Brovchenko I. Simulation of Tide-Surge-Wave in the Yellow Sea using Integrally Coupled Models.– Tides in the East Asian Marginal Seas, Ed. B.H. Choi: Hanrimwon Publishing Company, 2016.– 208 p.
- [102] Ciffroy P., Garnier J.M., Pham M.K. Kinetics of the adsorption and desorption of radionuclides of Co, Mn, Cs, Fe, Ag and Cd in freshwater

systems: experimental and modelling approaches // Journal of Environmental Radioactivity.- 2001.- 55.- P. 71-91.

- [103] Cohen Y., Mackay D., Shiu W. Mass transfer rates between oil slicks and water // Can. J. Chem. Engrg.- 1980.- 58.- C. 569-574.
- [104] Cooley J.W., Tukey J.W. An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series // Math. Comput. - 1965. - 19. - C. 297-301.
- [105] Craig P. D., Banner M. L. Modeling Wave-Enhanced Turbulence in the Ocean Surface Layer // Journal of Physical Oceanography.- 1994.- 24(16).-P. 2546-2559.
- [106] Csanady G. T. Dispersal by randomly varying currents // Journal of Fluid Mechanics.- 1983.- 132.- P. 375-394.
- [107] Cuomo G., Panizzo A., Dalrymple R. SPH-LES two-phase simulation of wave break-ing and wave-structure interaction // Proc. 30-th International Conference on Coastal Engi-neering (ICCE).- 2006.- .- P. 274-286.
- [108] Cushman-Roisin B., Beckers J. M. Introduction to geophysical fluid dynamics. Physical and Numerical Aspects.- ACADEMIC PRESS: , 2008.-773 p.
- [109] Cushman-Roisin, B., Esenkov, O. E., athias, B. J. A particle-in-cell method for the solution of two-layer shallow-water equations // International Journal for numerical methods in fluids.- 2000.- 32(5).- P. 515-543.
- [110] Daniel P. Operational Forecasting of Oil Spill drift at Météo-France // Spill Science & Technology Bulletin.- 1996.- 3.- P. 53-64.
- [111] Daxi C. Marine Atlas of the Bohai Sea, Yellow Sea and East China Sea: Hydrology.- China: Ocean Press, 1993.- 542 p.
- [112] Delvigne G. A. L., Sweeney C. E. Natural dispersion of oil. // Oil and Chemical Pollution.- 1988.- 4.- P. 261-310.
- [113] DonnellG B.P. Users Guide to SED2D WES Version 4.5.– Engineer Research And Development Center: Experiment Station Coastal and Hydraulics Laboratory, 2001.– 164 p.

- [114] Duursma E.K., Carroll J. Environmental Compartments.- Berlin: Springer-Verlag, 1996.- 277 p.
- [115] Einstein A. Investigations on the Theory of the Brownian Movement // Courier Corporation.- 1956.- 1.- P. 1-18.
- [116] Einstein A. Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. // Ann. d. Physik..- 1905.- 4(17).- P. 549-560.
- [117] Elliot, A. Shear diffusion and the spread of oil in the surface layer of the north sea // Deutsche Hydrographische Zeitschrift.- 1986.- 393.- P. 113-137.
- [118] Estournel C., Bosc E., Bocquet M., Ulses C., Marsaleix P., Winiarek V., Osvath I., Nguyen C., Duhaut T., Lyard F., Michaud H., Auclair F. Assessment of the Amount of Cesium-137 Released into the Pacific Ocean after the Fukushima Accident and Analysis of Its Dispersion in Japanese Coastal Waters. // Journal of Geophysical Research: Oceans.-2012.- 117(C11014).- P. 1-13.
- [119] Evans M. W., Harlow F. H. The particle-in-cell method for hydrodynamic calculations.- Los Alamos National Laboratory Report: LA- 2139, 1957.-75 p.
- [120] Evrard O., Laceby J., Lepage H., Onda Y., Cerdan O., Ayrault S. Radiocesium Transfer from Hillslopes to the Pacific Ocean after the Fukushima Nuclear Power Plant Accident: A Review. // Journal of Environmental Radioactivity.- 2015.- 148.- P. 92-110.
- [121] Fannelop T. K., Waldman G. D. Dynamics of oil slicks // AIAA Journal.-1972.- 10.- P. 506-510.
- [122] Fay J A The spread of oil slick on a calm sea // Oil on the Sea NY, Plenum.-1969.- .- P. 53-63.
- [123] Fingas M.F. The Evaporation of Oil Splills: Development and Implementation of New Prediction Methodology. // Marine Environmental Modelling Seminar '98.- Lillehammer, Norway, 1998.- P. 20.

- [124] Fingas M. Oil spill science and technology: prevention, response, and clean up.- Gulf Professional Publishing: Oxford UK, 2011.- 1192 p.
- [125] Flather R.A. A tidal model of northwest European continental shelf // Memoires de la Societe Royale des Sciences des Liege.- 1976.- 6.- P. 141-164.
- [126] Foda M., Cox R. The spreading of thin liquid films on a water air interface // J. Fluid Mech..- 1980.- 101.- P. 33-51.
- [127] Fohrmann, H., Backhaus, J. O., Blaume, F., Rumohr, J. Sediments in bottom arrested gravity plumes-numerical case studies // J. Phys. Oceanogr.-1998.- 28.- P. 2250-2274.
- [128] Fries T.P., Matthies H.G. Classification and Overview of Meshless Methods.- Germany: Technical University Braunschweig, 2004.- 122 p.
- [129] Fuehrer M., Pohl H., Roemisch K. Propeller jet erosion and stability criteria for bottom protectins of various constructions // Bulletin of the PIANC..-1987.- 58.- P. 45-56.
- [130] Garrett C., Li M., Farmer D. The connection between Bubble Size Spectra and Energy Dissipation Rates in the Upper Ocean. // J. Phys. Oceanogr.-2000.- 30.- P. 2163-2171.
- [131] Gessler D., Hall, B., Spasojevic M., Holly F., Pourtaheri H., Raphelt N. Application of 3D mobile bed, hydrodynamic model // J. Hyd. Engr.- 1999. 125.- P. 737-749.
- [132] Giddings R. D. Helmit A New Interface Reconstruction Algorithm // Godunov Methods: Theory and Applications, Springer US.– 2001.–.– P. 367– 376.
- [133] Gingold R.A., Monaghan J.J. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non spherical stars // Mon. Not. R. Astron. Soc..- 1977.-181.- P. 375-389.
- [134] Girault V. Theory of a GDM on irregular networks // SIAM J. Num. Anal..-1974.- 11.- P. 260-282.

- [135] Gotoh H., Sakai T. Key issues in the particle method for computation of wave breaking // Coastal Engineering.- 2006.- 53.- P. 171-179.
- [136] Grant W. D., Madsen O. S. Combined Wave and Current Interaction With a Rough Bottom // J. Geophys. Res. - 1979. - 84(C4). - P. 1797-1808.
- [137] Hamill G.A. The scouring action of the propeller jet produced by a slowly manoeuvring ship // Bulletin of the PIANC.- 1988.- 62.- P. 85-110.
- [138] Harlow F. H., Welch J. E. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface // Physics of fluids.- 1965.-8(12).- P. 2182-2189.
- [139] Hasselman K., Barnett T. P., Bouws E., Carlson D. E., Hasselmann P. Measurements of wind-wave growth and swell decay during the Joint North Sea Wave Project (JONSWAP).- Deutsche: Hydrographische Zeitschrift, 1973.- 83 p.
- [140] Hasselmann S., Hasselmann K. Computations and Parameterizations of the Nonlinear Energy Transfer in a Gravity-Wave Spectrum. Part I: A New Method for Efficient Computations of the Exact Nonlinear Transfer Integral // Journal of Physical Oceanography.- 1985.- 15(11).- P. 1369-1377.
- [141] Hinze J.O. Fundamentals of the hydrodynamic mechanism of splitting in dispersion processes. // AICHE J..- 1955.- 41.- P. 289-295.
- [142] Hirt C.W., Nichols B.D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries // Journal of Computational Physics.- 1981.- 39(1). P. 201-225.
- [143] Hjelmfelt, A.T., Lenau, C.W. Nonequilibrium transport of suspended sediment // ASCE Journal of Hydraulic Division.- 1970.- No 7.- P. 1567-1586.
- [144] Hoult D. P. Oil spreading on the sea // Ann. Rev. Fluid Mech.- 1972.- 4.-P. 341-348.

- [145] Huang J., Monastrero F. Review of the state-of-the art of oil spill simulation models.- Final report submitted to the American Petroleum Institute, by Raytheon Ocean Systems Co: 1982
- [146] Hunter J., R., Craig P., D., Phillips H., E. On the use of random walk models with spatially variable diffusivity // J Comput Phys.- 1993.- 106.- P. 366-376.
- [147] Huppert H.E. The propagation of two-dimensional and axisymmetric viscous gravity currents over a rigid horizontal surface // J. Fluid Mech.- 1982.-121.- P. 43-58.
- [148] Huppert H.E. Gravity currents: a personal perspective // J. Fluid Mech.-2006.- 554.- P. 299-322.
- [149] Hwang, K.-N, Mehta A. J. Fine sediment erodibility in Lake Okeechobee.-Report UFL/COEL-89/019: Coastal and Oceanographic Enginnering Dept., University of Florida, Gainsville, 1989.- 120 p.
- [150] IAEA Sediment distribution coefficients and concentration factors for biota in the marine environment.– Technical Reports Series: , 2003.– 422 p.
- [151] IPIECA Dispersants and their role in oil spill response.- IPIECA Report Ser. Vol. 5: London IPIECA, 2001.- 40 p.
- [152] Ivanov, V.V., Shapiro, G.I., Huthnance, J.M., Aleynik, D.L., Golovin, P.N. Dense water cascades around the world ocean // Progress in Oceanography.-2004.- 60.- P. 47-98.
- [153] Janssen P. Reply // Journal of Physical Oceanography. 2001. 31(8). P. 2537-2544.
- [154] Jia Y., Wang S. CCHE2D: a two-dimensional hydrodynamic and sediment transport model for unsteady open channel flows over loose bed.– Technical Report: No. CCHE-TR-97-2.: School of Engineering. The University of Mississippi, 1997.– 38 p.

- [155] Johannessen O.M., Volkov V.A., Pettersson L.M., Maderich V.S., Zheleznyak M.J., Gao Y., Bobylev L.P., Stepanov A.V., Neelov I.A., Tishkov V. Nielsen S.P. Radioactivity and Pollution in the Nordic Seas and Arctic Region. Observations, Modelling and Simulations.- Springer Praxis Books: Springer, 2010.- 408 p.
- [156] Kalion V.A., Brovchenko I.O., Nakvasyuk V.V. Study of a 2D turbulent free-surface flow using SPH // Збірник праць Ін-ту математики НАН України.– 2010.– 7(2).– Р. 65–72.
- [157] Kanarska Y., Maderich V. A non-hydrostatic numerical model for calculating free-surface stratified flows // Ocean Dynamics .- 2003.- 53.- P. 176-185.
- [158] Kanarska Y., Maderich V. Strongly non-linear waves and gravitational currents in rectangular basin // Applied Hydromechanics.- 2004.- 6(78).-P. 75-78.
- [159] Kanarska Y., Shchepetkin A., McWilliams J. Algorithm for nonhydrostatic dynamics in the Regional Oceanic Modeling System // Ocean Modelling.- 2007.- 18.- P. 143-174.
- [160] Kanda, J. Continuing ¹³⁷Cs Release to the Sea from the Fukushima Dai-Ichi Nuclear Power Plant through 2012 // Biogeosciences.- 2012.- 10(9).-P. 6107-6113.
- [161] Katz A. J Meshless methods for computational fluid dynamics.- PhD thesis: Stanford University, 2009.- 147 p.
- [162] Kawamura H., Kobayashi T., Furuno A., In T., Ishikawa Y., Nakayama T., Shima S., Awaji T. Preliminary Numerical Experiments on Oceanic Dispersion of ¹³¹I and ¹³⁷Cs Discharged into the Ocean Because of the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant Disaster // Journal of nuclear science and technology.- 2011.- 48(11).- P. 1349-1356.
- [163] Khelifa A., Stoffyn-Egli P., Hill P.S., Lee K. Characteristic of Oil Droplets Stabilized by Mineral Particles: Effects of Oil Type ant Temperature // Spill Science & Technology Bulletin.- 2002.- 8, N 1.- P. 19-30.

- [164] Kim M.K., Yim U.H., Hong S.H., Jung J.H., Choi H.W., An J.G., Won J.H., Shim W.J. Hebei Spirit oil spill monitored on site by fluorometric detection of residual oil in coastal waters off Taean, Korea // Marine Pollution Bulletin.- 2010.- 60(3).- P. 383-389.
- [165] Kobayashi T., Nagai H., Chino M., Kawamura H. Source Term Estimation of Atmospheric Release Due to the Fukushima Dai-Ichi Nuclear Power Plant Accident by Atmospheric and Oceanic Dispersion Simulations: Fukushima Npp Accident Related // Journal of nuclear science and technology.- 2013.-50(3).- P. 255-64.
- [166] Komen G.J. Dynamics and modelling of ocean waves.- Cambridge: University Press, 1994.- 554 p.
- [167] Konno M., Matsunagi Y., Arai K., Saito S. Simulations model for break-up process in an agitated tanks. // J. Chem. Eng. Jpn.- 1980.- 16.- P. 312-319.
- [168] Koziy L., Maderich V., Margvelashvili N., Zheleznyak M. Threedimensional model of radionuclide dispersion in the estuaries and shelf seas // J. Environmental Modeling and Software.- 1998.- 13(5-6).- P. 413-420.
- [169] Koziy L., Maderich V., Margvelashvili N., Zheleznyak M. Numerical modelling of seasonal dynamics and radionuclide transport in the Kara Sea. -Oceanic fronts and Related Phenomena // Konstantin Fedorov Int. Memorial Symp., IOC Workshop Rep. Series. - 2000. - 159. - P. 296-301.
- [170] Krasnopolskaya T.S., Meleshko V.V. Petroleum patch transport in marine and coastal zones // Dordrecht: Kluwer.- 2003.- 1.- P. 245-248.
- [171] Krestenitis Y. N., Kombiadou K. D., Savvidis Y. G. Modelling the cohesive sediment transport in the marine environment: the case of Thermaikos Gulf. // Ocean Sci.- 2007.- 3.- P. 91-104.
- [172] Krone R. B. Flume Studies of the Transport of Sediment in Estuarial Processes.- Final Report: Hydraulic Engineering Laboratory and Sanitary Engineering Research Laboratory, University of California, Berkeley, 1962.-120 p.

- [173] Kusakabe M., Oikawa S., Takata H., Misonoo J. Spatiotemporal distributions of Fukushima-derived radionuclides in nearby marine surface sediments // Biogeoscience.- 2013.- 10.- P. 5019-5030.
- [174] Kütz M., Lavalee P. Experimental Evidence and Theoretical Analysis of Anomalous Diffusion during Water Infiltration in Porous Building Materials // J. Phys. D: Applied Phys. - 2001. - 34. - P. 2547-2554.
- [175] Laissaoui A., Abril J.M., Periáñez R., Garcia-Leon M., Garcia-Montano E. Determining kinetic transfer coefficients for radionuclides in estuarine waters: reference values for ¹³³Ba and effects of salinity and suspended load concentrations // Radioanalytical Nuclear Chemistry.- 1998.- 237.- P. 55-61.
- [176] Lamb K. Numerical experiments of internal wave generation by strong tidal flow across a finite amplitude bank edge // J. Geophys Res.- 1994.- 99.-P. 843-864.
- [177] Lane A. Development of a Lagrangian sediment model to reproduce the bathymetric evolution of the Mersey Estuary // Ocean Dynamics.- 2005.-55.- P. 541-548.
- [178] Lancaster P., Salkauskas K. Surfaces generated by moving least squares methods // Math. Comput..- 1981.- 37.- P. 141-158.
- [179] Lasheras J.C., Eastwood C., Martinez-Bazán C., Montañés A review of statistical models for break-up of an immisible fluid immersed into a fully developed turbulent flow. // International Journal of Multiphase Flow .-2002.- 28.- P. 247-278.
- [180] Legg B. J., Raupach M. R. Markov-Chain Simulations of Particle Deposition in Homogeneous Flows: The Mean Drift Velocity Induced by a Gradient in Eule-rian Velocity Variance // Bound.-Layer Meteor.- 1982.- 24.- P. 3-13.
- [181] Leonard K.S., McCubbin D., Blowers P., Taylor B.R. Dissolved plutonium and americium in surface waters of the Irish Sea // Journal of Environmental Radioactivity.- 1999.- 44.- P. 129-158.

- [182] Lesser G.R., Roelvink J.A., van Kester J.A.T.M., Stelling G. Development and validation of a three-dimensional morphological model // Coastal Eng.-2004.- 51.- P. 883-915.
- [183] Li M., Garrett C. The relationship between oil droplet size and upper ocean turbulence. // Marine Pollution Bulletin.- 1998.- 36, N12.- P. 961-970.
- [184] Liu G. R., Liu M. B. Smoothed particle hydrodynamics: a meshfree particle method.- Singapore: World Scientific, 2003.- 450 p.
- [185] Liu G.R., Gu Y.T. An introduction to meshfree methods and their programming.– Springer: Science & Business Media, 2005.– 479 p.
- [186] Liu G. R. Mesh Free Methods. Moving beyond the finite element Method.-USA:: CRC Press, 2009.- 792 p.
- [187] Longuet-Higgins M. S., Stewart R. W. Radiation stress and mass transport in gravity waves, with application to 'surf beats' // Journal of Fluid Mechanics.- 1962.- 13.- P. 481-504.
- [188] Lucy L. Numerical approach to testing the fission hypothesis // Astr. J..-1977.- 82.- P. 1013-1024.
- [189] Lunel T. Disperion: oil drop size measurenet at sea // Proc. 16th Arctic Marine Oil Spill (AMOP).- Ottawa, Canada, Environment Canada, 1993.-P. 1023-1056.
- [190] Mackay D., Buist I., Mascarenhas R., Petersen S. Oil spill processes and models.- Canada: Environmental protection service, 1980.- Report EE-8 p.
- [191] Maderich V., Brovchenko I. Oil Dispersion by breaking waves and currents // Sea Technology.- 2005.- 46(4).- P. 17-22.
- [192] Maderich V., Heling R., Bezhenar R., Brovchenko I., Jenner H., Koshebutskyy A., Kuschan A., Terletska K. Development and application of 3D numerical model THREETOX to the prediction of cooling water transport and mixing in the inland and coastal waters // Hydrological Processes.-2008.- 22.- P. 1000-1013.

- [193] Maderich V., Talipova T., Grimshaw R., Pelinovsky E., Choi B. H., Brovchenko I., Terletska K., Kim D. C. The transformation of an interfacial solitary wave of elevation at a bottom step // Nonlin. Processes Geophys..-2009.- 16.- P. 33-42.
- [194] Maderich V., Fenical S., Brovchenko I., Terletska K., Shepsis V. 3D Modelling System of Bottom and Bank Erosion // Proc. of the 9th Int. Conf. on the Mediterranean Coastal Environment, MEDCOAST 09.- 2009.- 2.-P. 887-898.
- [195] Maderich V., Talipova T., Grimshaw R., Terletska E., Brovchenko I, Pelinovsky E., Choi B. Transformation of the Large Amplitude Interfacial Solitary Waves of depression at the Bottom Step // Physics of Fluids.- 2010.-22.- P. 176-185.
- [196] Maderich V., Brovchenko I., Jung K.T. Oil spreading in instantaneous and continuous spills on rotating earth // Environmental Fluid Mechanics.-2012.- 12(4).- P. 361-378.
- [197] Maderich V., Brovchenko I,, Terletska E., Hutter K. Numerical simulations of the nonhydrostatic transformation of basin-scale internal gravity waves and wave-enhanced meromixis in lakes Nonlinear internal waves in lakes // Springer.- Series: Advances in Geophysical and Environmental Mechanics.-2012.- P. 193-276.
- [198] Maderich V., Jung K.T., Terletska K., Talipova T., Brovchenko I. Incomplete similarity of internal solitary waves with trapped core // Fluid Dynamics Research.- 2015.- 47.- P. 035511.
- [199] Maderich V., Brovchenko I., Dvorzhak A., Ievdin I., Koshebutsky V, Periañ R. Integration of 3D model THREETOX in JRODOS, implementation studies and modelling of Fukushima scenarios. // Radioprotection.- 2016.- 51.-P. 133-135.
- [200] Mahadevan A., Oliger J., Street R. A nonhydrostatic mesoscale ocean model. Part I: Implementation and scaling // J. Phys. Oceanogr..- 1996.-26.- P. 1860--1879.

- [201] Marshall J., Adcroft A., Hill C., Perelman L., Heisey C. Generation of second mode solitary waves by the interaction of a first mode soliton with a sill // J. Geophys. Res. - 1997. - 102. - P. 5753--576.
- [202] Margvelashvili N., Maderich V., Zheleznyak M. THREETOX a computer code to simulate three-dimensional dispersion of radionuclides in stratified water bodies // Radiation Protection Dosimetry.- 1997.- 73(1-4).- P. 177-180.
- [203] Margvelashvili N., Maderich V., Zheleznyak M. Simulation of radionuclide flux from Dnieper-Bug Estuary into the Black sea // J. Environmental Radioactivity.- 1999.- 43.- P. 157-171.
- [204] Margvelashvili N., Maderich V., Yuschenko S., Zheleznyak M. 3D modelling of the mud and radionuclide transport in Chernobyl cooling pond and Dnieper-Boog Estuary. Fine Sediments Dynamics in the Marine Environment // Proceedings of INTERCOH-2000. ed. J.C. Winterwerp and C. Kranenburg, Elsevier.- 2002.- 1.- P. 595-610.
- [205] Martinez-Bazán C., Montañés, Lasheras J.C. On the break-up of an air bubble injected in fully developed turbulent flow. Pt. I. Break-up frequency // J. Fluid Mech. – 1999. – 401. – P. 157–182.
- [206] Martinez-Bazán C., Montañés, Lasheras J.C. On the break-up of an air bubble injected in fully developed turbulent flow. Pt. II. Size pdf of the resulting daughter bubbles // J. Fluid Mech .- 1999.- 401.- P. 183-207.
- [207] Martinsen E.A., Engedahl H. Implementation and testing of a lateral boundary scheme as open boundary condition in a barotropic ocean model // Coastsl Eng..- 1987.- 11.- P. 603-627.
- [208] Maynord S.T. Bottom shear stress from propeller jets // Port' 98., Sponsored by ASCE and U.S. Section of the PIANC, Long Beach , Ca.– 1988.– 1.– P. 1074–1083.
- [209] Maynord S.T. Inflow zone and discharge through propeller jets.– Report for the Upper Mississippi River – Illinois Waterway System Navigation

Study. ENV Report 3: U.S. Army Engineer Research and development Center Coastal and Hydraulics Laboratory, Vicksburg, MS, 2000.– 28 p.

- [210] Mike-21 Modeling System for Estuaries, Coastal Waters and Seas DHI Water & Environment http://www.dhisoftware.com/mike21/Description/index.htm.-2000
- [211] Miyazawa Y., Masumoto Y., Varlamov S., Miyama T., Takigawa M., et al. Inverse Estimation of Source Parameters of Oceanic Radioactivity Dispersion Models Associated with the Fukushima Accident. // Biogeosciences..- 2013.-10(4).- P. 2349-2363.
- [212] Mellor G., Yamada T. Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems // Reviews of Geophysics and Space Physics.-1982.- 20.- P. 851-875.
- [213] Mellor G., Hakkinen S., Ezer T., Patchen R. A generalization of a sigma coordinate ocean model and an intercomparison of model vertical grids // Pinardi N, Woods JD (eds.), Ocean Forecasting: Conceptual Basis and Applications.- Springer, Berlin.- 2002.- P. 55-72.
- [214] Mellor G.L. User's guide for a three-dimensional, primitive equation, numerical ocean model. Program in Atmospheric and Oceanic Sciences.- Princeton NJ: Princeton University, 2003.- 53 p.
- [215] Mellor G. The Three-Dimensional Current and Surface Wave Equations // J. Phys. Oceanogr. - 2003. - 33(9). - P. 978–1989.
- [216] Mellor G. Some consequences of the three-dimensional current and surface wave equations // J. Phys. Oceanogr..- 2005.- 35.- P. 2291-2298.
- [217] Mellor G. The Depth-Dependent Current and Wave Interaction Equations: A Revision // J. Phys. Oceanogr..- 2008.- 38(11).- P. 2587-2596.
- [218] Mellor G. Wave radiation stress // Ocean Dynamics.- 2011.- 61(5).-P. 563-568.

- [219] Meysman F. J.R., Boudreau B. P., Middelburg J. J. Relations between local, nonlocal, discrete and continuous models of bioturbation // Journal of Marine Research.- 2003.- 61(3).- P. 391-410.
- [220] Meysman F. J.R., Malyuga V. S., Boudreau B. P., Middelburg J. J. The influence of porosity gradients on mixing coefficients in sediments // Geochimica et Cosmochimica Acta.- 2007.- 71(4).- P. 961-973.
- [221] Meysman F. J.R., Malyuga V. S., Boudreau B. P., Middelburg J. J. A generalized stochastic approach to particle dispersal in soils and sediments // Geochimica et Cosmochimica Acta.- 2008.- 72(14).- P. 3460-3478.
- [222] Monaghan J.J. An introduction to SPH // Comput. Phys. Commun.-1988.- 48.- P. 89-96.
- [223] Monaghan J. Simulating free surface flows with SPH // Journal of computational physics.- 1994.- 110.- P. 399-406.
- [224] Monaghan J. Smoothed particle hydrodynamics // Reports on progress in physics.- 2005.- 68.- P. 1703-1759.
- [225] Monte L., Brittain J.E., Håkanson L., Heling R., Smith J.T., Zheleznyak M. Review and assessment of models used to predict the fate of radionuclides in lakes // Journal of Environmental Radioactivity.- 2003.- 69.- P. 177--205.
- [226] Monte L., Periáñez R., Boyer P, Smith J.T., Brittain J. E. The role of physical processes controlling the behaviour of radionuclide contaminants in the aquatic environment: a review of state-of-the-art modelling approaches // Journal of Environmental Radioactivity.- 2009.- 100(9).- P. 779-784.
- [227] Montroll E.W., Weiss G.H. Random Walks on Lattices // Journal of Mathematical Physics.- 1965.- 6.- P. 167-181.
- [228] Morino Y., Ohara T., Nishizawa M. Atmospheric behavior, deposition, and budget of radioactive materials from the Fukushima Daiichi nuclear power plant in March 2011 // Geophys. Res. Lett..- 2011.- 38(L00G11).- P. 1-7.
- [229] Mörters P., Yuval P. Brownian motion.- Cambridge University Press: Vol. 30, 2010.- 357 p.

- [230] Muzzio F.J., Tjahjadi M., Ottino J.M. Self-similar drop-size distributions produced by break-up in chaotic flows. // Physical Review Letters.- 1991.67 (1).- P. 54-57.
- [231] Nagao S., Kanamori M., Ochiai S., Tomihara S., Fukushi K., Yamamoto M. Export of ¹³⁴Cs and ¹³⁷Cs in the Fukushima River Systems at Heavy Rains by Typhoon Roke in September 2011 // Biogeosciences.- 2013.- 10(10).- P. 6215-6223.
- [232] Nagaoka M., Yokoyama H., Fujita H., Nakano M., Watanabe H., Sumiya S. Spatial Distribution of Radionuclides in Seabed Sediments Off Ibaraki Coast after the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant Accident. // Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry..- 2015.- 303(2).- P. 1305-1308.
- [233] Nelson E. Dynamical Theories of Brownian Motion.- Princeton: Princeton Univ. Press., 1976.- 120 p.
- [234] Nguyen V.P., Rabczuk T., Bordas S., Duflot M, Meshless methods: A review and computer implementation aspects // Mathematics and Computers in Simulation.- 2008.- 79(3).- P. 763-813.
- [235] Nihoul J. A non-linear mathematical model for the transport and spreading of oil slicks // Ecological Modelling.- 1983-1984.- 22.- P. 325-339.
- [236] Noh W.F., Woodward P. SLIC (Simple Line Interface Calculation) // In proceedings of 5th International Conference of Fluid Dynamics, edited by A. I. van de Vooren, P.J. Zandbergen. Lecture Notes in Physics.- 1976.- 59.- P. 330-340.
- [237] Nyffeler U.P., Li Y.H., Santschi, P.H. A kinetic approach to describe trace element distribution between particles and solution in natural aquatic systems // Geochimica Cosmochimica Acta.- 1984.- 48.- P. 1513-1522.
- [238] Onishi Y., Serne J., Arnold E., Cowan C., Thompson F. Review: radionuclide transport, sediment transport, water quality, mathematical modeling and radionuclide adsorption/desorption mechanism.- NUREG/CR-1322, Pacific Northwest Laboratory: Richland, 1981.- 512 p.
- [239] Onishi Y., Dummuller D.C., Trent D.S. Preliminary Testing of Turbulence and Radionuclide Transport Modeling in Deep Ocean Environment // PNL-6853, Pacific Northwest Laboratory, Richland, Washington..- 1989.-. P. .
- [240] Otosaka S., Kato Y. Radiocesium Derived from the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant Accident in Seabed Sediments: Initial Deposition and Inventories // Environmental Science: Processes & Impacts.- 2014.- 16(5).-P. 978-90.
- [241] Otosaka S., Kobayashi T. Sedimentation and remobilization of radiocesium in the coastal area of Ibaraki, 70 km south of the Fukushima Dai-ichi Nuclear Power Plant // Environ. Monit. Assess..- 2013.- 185.- P. 5419-5433.
- [242] Ott S., Mann J. An experimental investigation of the relative diffusion of particle pairs in three-dimensional turbulent flow // Journal of Fluid Mechanics.- 2000.- 422.- P. 207-223.
- [243] Oughton D.H., Børretzen P., Salbu B., Tronstad, E. Mobilisation of ¹³⁷Cs and ⁹⁰Sr from sediments: potential sources to arctic waters // The Science of the Total Environment.- 1997.- 202.- P. 155-165.
- [244] Palma E.D., Matano R. P. On the implementation of open boundary conditions to a general circulation model: The barotropic model // J. Geophys Res..- 1996.- 103.- P. 1319-1341.
- [245] Partheniades E. Erosion and deposition of cohesive soil // J. Hydr. Div.ASCE.- 1965.- 91.- P. 105-139.
- [246] Pavlin V., Perrone N. Finite difference energy rechniques for arbitrary meshes // Comp. Struct. - 1975. - 5. - P. 45–58.
- [247] Peiró J., Spencer S. Finite difference, finite element and finite volume methods for partial differential equations.- Handbook of materials modeling: Springer Netherlands, 2005.- 2415-2446 p.
- [248] Periáñez R. Abril J.M., Garcia-Leon M. Modelling the dispersion of nonconservative radionuclides in tidal waters—Part 1: conceptual and mathematical model // Journal of Environmental Radioactivity.- 1996.- 31(2).-P. 127-141.

- [249] Periáñez R. Elliott A. A particle-trackingmethod for simulating the dispersion of non-conservative radionuclides in coastal waters // Journal of Environmental Radioactivity.- 2002.- 58.- P. 13-33.
- [250] Periáñez R. Testing the behaviour of different kinetic models for uptake/release of radionuclides between water and sediments when implemented in a marine dispersion model // Journal of Environmental Radioactivity.- 2004.- 71.- P. 243-259.
- [251] Periáñez R. The dispersion of ¹³⁷Cs and ^{239,240}Pu in the Rhone River plume: a numerical model // Journal of Environmental Radioactivity.- 2004.-77.- P. 301-324.
- [252] Periáñez R., Kyung-Suk Suh, Byung-Il Min Local scale marine modelling of Fukushima releases. Assessment of water and sediment contamination and sensitivity to water circulation description // Marine Pollution Bulletin.-2012.- 64.- P. 2333-2339.
- [253] Periáñez R., Bezhenar R., Iosjpe M., Maderich V., Nies H., Osvath I., Outola I., de With G. A comparison of marine radionuclide dispersion models for the Baltic Sea in the frame of IAEA MODARIA program // Journal of Environmental Radioactivity.- 2015.- 139.- P. 66-77.
- [254] Periáñez R., Brovchenko I., Duffa C., Jung K.T., Kobayashi T., Lamego F., Maderich V., Min B.I., Nies H., Osvath I., Psaltaki M., Suh K. A new comparison of marine dispersion model performances for Fukushima releases in the frame of IAEA MODARIA program // Journal of Environmental Radioactivity.- 2015.- 150.- P. 247-269.
- [255] Periáñez R., Bezhenar R., Brovchenko I., Duffa C., Iosjpe M., Jung K.T., Kobayashi T., Lamego F., Maderich V., Min B.I., Nies H., Osvath I., Outola I., Psaltaki M., Suh K., G. de With MODARIA Marine transport modelling.– Assessment and prognosis in response to a nuclear or radiological emergency: IAEA Meeting, April 20-24, 2015.–

р.

- [256] Periáñez R., Bezhenar R., Brovchenko I., Duffa C., Iosjpe M., Jung K. T., Kobayashi T., Lamego F., Maderich V., Min, B.-I., Nies H., Osvath I., Outola I., Psaltaki M., Suh K.,G. de With Modelling of marine radionuclide dispersion in IAEA MODARIA program: Lessons learnt from the Baltic Sea and Fukushima scenarios // Science of The Total Environment.- 2016.-569-570.- P. 594-602.
- [257] Periáñez R., Bezhenar R., Brovchenko I., Duffa C., Iosjpe M., Jung K. T., Kobayashi T., Lamego F., Maderich V., Min, B.-I., Nies H., Osvath I., Outola I., Psaltaki M., Suh K.S., G. de With A comparison of radionuclide dispersion model performances for the Baltic Sea and Fukushima releases in the Pacific Ocean // Radioprotection.- 2016.- 51.- P. 149-151.
- [258] Phillips O. M. The Dynamics of the Upper Ocean.- Cambridge: University Press, 1977.- 336 p.
- [259] Phillips W. On the spreading radius of surface tension driven oil on deep water // Applied Scientific Research.- 1997.- 57.- P. 67-80.
- [260] Pinto L., Fortunato A.B., Zhang Y., Oliveira A., Sancho F.E.P. Development and validation of a three-dimensional morphodynamic modelling system for non-cohesive sediments // Ocean Modelling.- 2012.- 57-58.-P. 1-14.
- [261] Povinec P, Hirose K, Aoyama M. Fukushima accident: Radioactivity impact on the environment.- : Elsevier, 2013.- 382 p.
- [262] Putyrskaya V., Klemt E. Modeling ¹³⁷Cs migration processes in lake sediments // Journal of Environmental Radioactivity.- 2007.- 96(1-3).- P. 54-62.
- [263] Putyrskaya V., Klemt E., Rollin S. Migration of ¹³⁷Cs in tributaries, lake water and sediment of Lago Maggiore (Italy, Switzerland) – analysis and comparison with Lago di Lugano and other lakes // Journal of Environmental Radioactivity.- 2009.- 100(1).- P. 35-48.
- [264] Reed M., Johansen O., Brandvik P. J., Daling P., Lewis A., Fiocc R., Mackay D., Prentki R. Oil spill modeling towards the close of the 20th

century: Overview of the state of art. // Spill Science & Technology Bulletin.- 1999.- **5** N 1.- P. 3-16.

- [265] Rodi W. Turbulence Models and their Application in Hydraulics A State of the Art Review.– CRC Press: , 1993.– 106 p.
- [266] Rodriguez-Paz M., Bonet J. A corrected smooth particle hydrodynamics formulation of the shallow-water equations // Computers & structures.-2004.- 83(17).- P. 1396-1410.
- [267] Roland A. Development of WWM II: Spectral wave modeling on unstructured meshes.- Ph.D. thesis, Technische Universität Darmstadt, Institute of Hraulic and Water Resources Engineering: 2009, 61(5).- 212 p.
- [268] Roland A, Zhang Y. J., Wang H. V., Meng Y., Teng Y.C., Maderich V., Brovchenko I., Dutour-Sikiric M., Zanke U. A fully coupled 3D wavecurrent interaction model on unstructured grids // J. Geophys. Res. - 2012.-117(C11).- P. 2156-2202.
- [269] Santschi P.H., Honeyman B.D. Radionuclides in aquatic environments // Radiation Phys. and Chem. - 1989. - 34. - P. 2213-2407.
- [270] Schlichting H. Boundary layer theory.- Graw-Hill: N.Y., 1979.- 817 p.
- [271] Schokking L. Bowthruster induced Demage..– MS thesis: Technical University Delft, 2002.– 143 p.
- [272] Sebatião P., Soares C. G. Modelling the fate of oil spills at sea. // Spill Science & Technology Bulletin.- 1995.- 2(2/3).- P. 121-131.
- [273] Shah S.H.A.M., Heemink A.W., Gräwe U., Deleersnijder E. Adaptive time stepping algorithm for Lagrangian transport models: Theory and idealised test cases // Ocean Modelling.- 2013.- 683.- P. 9-21.
- [274] Shaw D.A. and Hanratty T.J. Turbulent mass transfer rates to a wall for large Schmidt numbers // Amer. Inst. Chem. Eng. J.- 1977.- 23.- P. 28-37.
- [275] Shibata T., Nakajima T., Igarashi Y., Tsuruta H., Ebihara M., Hattori T., Hoshi M., Ishimaru T., Masumoto K., Bailly du Bois P., Bocquet M., Boust

D., Brovchenko I., Choe I., Christoudias T., Didier D., Dietze H., Garreau P., Higashi H., Jung K. T., Kida S., Le Sager P., Lelieveld J., Maderich V., Miyazawa Y., Park S. U., Quélo D., Saito K., Shimbori T., Uchiyama Y., van Velthoven P., Winiarek V., Yoshida S. A review of the model comparison of transportation and deposition of radioactive materials released to the environment as a result of the Tokyo Electric Power Company's Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant accident.– Technical report, Sectional Committee on Nuclear Accident Committee on Comprehensive Synthetic Engineering: Science Council of Japan, 2014.– 111 p.

- [276] Slater J.C. Electronic Energy Bands in Metals // Phys. Rev. 1934. 45. P. 794-801.
- [277] Smagorinsky J. General circulation experiments with primitive equations.
 1. The basic experiment // Monthly Weather Rev. 1963. 91. P. 99–164.
- [278] Smith J.T., Comans R.N.J., Ireland D.G., Nolan L., Hilton J. Experimental and in situ study of radiocaesium transfer across the sediment-water interface and mobility in lake sediments // Applied Geochemistry.- 2000.-15.- P. 833-848.
- [279] Sohtome T., Wada T, Mizuno T, Nemoto Y., Igarashi S., Nishimune A., Aono T., Ito Y., Kanda J., Ishimaru T. Radiological impact of TEPCO's Fukushima Dai-ichi Nuclear Power Plant accident on invertebrates in the coastal benthic food web. // Journal of Environmental Radioactivity .- 2014.-138.- P. 106-115.
- [280] Spasojevic M., Holly F.M. 2-D bed evolution in natural watercources-new simulation approach // J. Hyd. Eng. - 1990. - 116. - P. 425-444.
- [281] Spivakovskaya D., Heemink A. W., Deleersnijder E. The backward Ito method for the Lagrangian simulation of transport processes with large space variations of the diffusivity // Ocean Sci. - 2007. - 3. - P. 525-535.
- [282] Spivakovskaya D., Heemink A. W., Deleersnijder E. Lagrangian modelling of multi-dimensional advection-diffusion with space-varying diffusivities: theory and idealized test cases // Ocean Sci. - 2007. - 57(3). - P. 189--203.

- [283] Stohl A., Seibert P., Wotawa G., Arnold D., Burkhart J., Eckhardt S., Tapia C., Vargas A., Yasunari T. Xenon-133 and Caesium-137 Releases into the Atmosphere from the Fukushima Dai-Ichi Nuclear Power Plant: Determination of the Source Term, Atmospheric Dispersion, and Deposition. // Atmospheric Chemistry and Physics..- 2012.- 12(5).- P. 2313-2343.
- [284] Sundaram T. Spread of oil slicks on a natural body of water // J. Hydronautics.- 1980.- 14.- P. 124-126.
- [285] Sundaram T. The spread of high-and low viscosity chemical on water // J. Hydronautics.- 1981.- 15.- P. 100--102.
- [286] Talipova T., Terletska K., Maderich V., Brovchenko I., Jung K.T., Pelinovsky E., Grimshaw R. Internal solitary wave transformation over a bottom step: loss of energy // Physics of fluids.- 2013.- 25(032110).- P. 1-14.
- [287] Tan S.K., Yao A.F. Recognition and measurement of dispersed oil droplets in water column // Journal of Hydraulic Research.- 2001.- 39, N 1.- P. 99– 103.
- [288] Terletska K., Jung K.T., Talipova T., Maderich V., Brovchenko I.,Grimshaw R. Internal breather-like wave generation by the second mode solitary wave interaction with a step // Physics of fluids.- 2016.- 28(11).-P. 10.1063/1.4967203.
- [289] Thornton B., Ohnishi S., Ura T., Odano N., Sasaki S, Fujita T., Watanabe T., Nakata K., Ono T., Ambe D. Distribution of local ¹³⁷Cs anomalies on the seafloor near the Fukushima Dai-ichi Nuclear Power Plant // Marine Pollution Bulletin.- 2013.- 74(1).- P. 344-350.
- [290] Tkalich P., Huda K., Gin K. A multiphase oil spill model // J. Hydr. Res.-2003.- 41(2).- P. 1-11.
- [291] Torfs H., Mitchener H., Huysentruit H., Toorman E. Settling and consolidation of mud/sand mixtures // Coastal Eng.- 1996.- 29.- P. 27-45.
- [292] Tsouris C., Tavlarides L. L. Breakage and coa; iscence models for drops in turbulent dispersions // AIChE J.- 1994.- 40.- P. 395-406.

- [293] Turner A., Millward G.E. Partitioning of trace metals in a macrotidal estuary. Implications for contaminant transport models // Estuarine, Coastal and Shelf Science.- 1994.- 39.- P. 45-58.
- [294] Turrell W.R. Modelling the Braer oil spill A retrospective view. // Marine Pollution Bulletin.- 1994.- 28.- P. 211-218.
- [295] Umlauf L., Burchard H. A generic length-scale equation for geophysical turbulence models // J. Marine Res. - 2003. - 61. - P. 235-265.
- [296] van Dop, H., Nieuwstadt, F. T. M., Hunt, J. C. R. Random walk models for particle displacements in inhomogeneous unsteady turbulent flows // Physics of Fluids.- 1985.- 28(6).- P. 1639-1653.
- [297] van Ledden M. A process based sand-mud model., Fine sediment dynamics in the marine environment // Fine sediment dynamics in the marine environment. J.C. Winterwerp and C. Kranenburg eds.- Elsevier, 2002.- P. 577-594.
- [298] van Ledden M Sand-mud segregation in estuaries and tidal basins.- PhD Thesis: Delft University of Technology, Delft, Netherlands, 2003.- 221 p.
- [299] van Leer B. Toward the ultimate conservative difference scheme. V: A second order sequel to Godunov's method // J. Comput. Phys..- 1979.- 32.- P. 101-136.
- [300] van Rijn L.C. Sediment transport, Part I: Bed load transport // J. Hydraul.Engineering.- 1984.- 110.- P. 1431-1456.
- [301] van Rijn L.C. Sediment transport, Part II: Suspended load transport // J. Hydraul.Engineering.- 1984.- 110.- P. 1613-1641.
- [302] van Rijn, L. C. Mathematical modeling of sediment in non-uniform flows // J. Hydr. Eng. ASCE.- 1986.- No 6.- P. 433-455.
- [303] van Vledder G. Ph. The WRT method for the computation of nonlinear four-wave interactions in discrete spectral wave models // Coastal Engineering.- 2006.- 53.- P. 223-242.

- [304] Verhey H.J. The stability of bottom and banks subjected to the velocities in the propeller jet behind ships // Proceedings of the 8 th international Harbour Congress. Publication No 303..- 1983.- 116.- P. 1-11.
- [305] Villa M., López-Gutiérrez J.M., Suh K.S., Min B.I., Periáñez R. The behaviour of ¹²⁹I released from nuclear fuel reprocessing factories in the North Atlantic Ocean and transport to the Arctic assessed from numerical modelling // Mar. Pollut. Bull.- 2015.- 90(1-2).- P. 15-24.
- [306] Violeau D., Issa R. Numerical modeling of com-plex turbulent free surface flows with the SPH Lagrangian method: an overview // Int. J. Num. Meth. Fluids..- 2007.- 53(2).- P. 277-304.
- [307] Visser A., W. Using random walk models to simulate the vertical distribution of particles in a turbulent water column // Mar. Ecol. Prog. Ser..- 1997.- 158.- P. 275-281.
- [308] Visser P. J. A mathematical model of uniform longshore currents and comparison with laboratory data. – Delft University of Technology: Communication on Hydraulics. Report 84-2, 1984. – 151 p.
- [309] Vlasenko V., Hutter K. Generation of second mode solitary waves by the interaction of a first mode soliton with a sill // Nonlin. Processes Geophys..-2002.- 8.- P. 223-239.
- [310] Wada T., Nemoto Y., Shimamura S., Fujita T., Mizuno T., Sohtome T., Kamiyama K., Morita T., Igarashi S. Effects of the nuclear disaster on marine products in Fukushima // J. Environ Radioactivity.- 2013.- 124.- P. 246-254.
- [311] Warner J.C., Sherwood C.R., Signell R.P., Harris C.K., Arango H.G. Development of a three-dimensional, regional, coupled wave, current, and sediment-transport model // Computers and Geosciences.- 2008.- 34.- P. 1284-1306.
- [312] Wax N. Selected papers on noise and stochastic processes. Mineola, NY: Dover, 1954. – 659 p.

- [313] Wentworth C. K. A scale of grade and class terms for clastic sediments // J. Geology.- 1922.- 30.- P. 377-392.
- [314] Wilcox D. C. Reassessment of the Scale-Determining Equation for Advanced Turbulence Models // AIAA Journal.- 1988.- 26(11).- P. 1299-1310.
- [315] Wilson J. D., Sawford B. L. Review of Lagrangian stochastic models for trajectories in the turbulent atmosphere // Bound.-Layer Meteor.- 1996.-78.- P. 191-210.
- [316] Wilson N. R., Shaw R. H. A higher order closure model for canopy flow // Journal of Applied Meteorology.- 1977.- 16(11).- P. 1197-1205.
- [317] Winterwerp J.C. On the dynamics of high-concentrated mud suspensions..– PhD Thesis: Delft University of Technology, Delft, Netherlands, 1999.–204 p.
- [318] Xia H., Xia Z., Zhu L. Vertical variation in radiation stress and waveinduced current // Coastal Engineering. - 2004. - 51(4). - P. 309-321.
- [319] Xie L., Wu K., Pietrafesa L., Zhang C. A numerical study of wave-current interaction through surface and bottom stresses: Wind-driven circulation in the South Atlantic Bight under uniform winds // J. Geophys. Res. - 2001.-106(C8).- P. 16841-16855.
- [320] Yanenko N. N. Simple schemes in fractional steps for the integration of parabolic equations // Springer Berlin Heidelberg.- 1971.- In: The Method of Fractional Steps.- P. 17-41.
- [321] Youngs D.L. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion // Numerical Methods For Fluid Dynamics, Edited By, K. W. Morton and M. J. Baines, Eds., Academic Press, New York, NY, USA.- 1982.- .-P. 273-285.
- [322] Zhang D. F., Easton A. K., Steiner J. M. Simulation of coastal oil spills using the random walk particle method with Gaussian kernel weighting. // Spill Science&Tech. Bull.- 1997.- 4.- P. 71-88.

- [323] Zhang H., Madsen O. S., Sannasiraj S. A., Soon Chan E. Hydrodynamic model with wave-current interaction in coastal regions // Estuarine, Coastal and Shelf Science.- 2004.- 61(2).- P. 317-324.
- [324] Zhang Y., Baptista A.M. SELFE: A semi-implicit Eulerian-Lagrangian finite-element model for cross-scale ocean circulation // Ocean Modelling.-2008.- 21(3-4).- P. 71-96.