КОМПЬЮТЕРНАЯ МАТЕМАТИКА

Математическое моделирование

УДК 681.3:574.5

А.А. КАЛЕНЧУК-ПОРХАНОВА, Н.В. БАСОК

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ В ПОДЗЕМНЫХ ВОДОНОСНЫХ ГОРИЗОНТАХ

Рассматривается проблема создания системы имитационного моделирования состояний водных объектов на примере одной из ее подсистем.

Введение. Проводимые в Институте кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины работы по созданию имитационных систем моделирования состояний природных объектов в условиях техногенных нагрузок направлены на разработку проблемно-ориентированных подсистем моделирования для получения комплексной оценки экологического состояния конкретных экообъектов. Получение комплексной оценки состояний того или иного экообъекта требует системного подхода и разработки новых методов математического и имитационного моделирования с использованием аппаратно-программных комплексов автоматизации этих исследований [1, 2]. На основе этих работ в институте впервые создана система имитационного моделирования водных объектов (СИМВО), в состав которой входят такие проблемно-ориентированные подсистемы:

– моделирования изменений кислородного режима в водотоках WODA;

– моделирования переноса загрязнений в водотоках STREAM;

– моделирования процессов в подземных водоносных горизонтах FEFLOW;

– моделирования стационарных стоково-ветровых течений в водоемах «мелкой» воды на отдельных глубинных горизонтах POTOK;

– интеллектуализированного способа обработки, сжатия и восстановления с гарантированной точностью массивов числовых данных с использованием аппарата наилучшей чебышевской аппроксимации (APPROXIMATION) [3, 4].

Следует заметить, что получение комплексных оценок состояний водных объектов в СИМВО обеспечивается взаимным использованием результатов моделирования подсистем, например, подсистем WODA и STREAM, STREAM и POTOK. Кроме этого, подсистема APPROXIMATION является инвариантной составляющей во всех подсистемах и используется для предварительной обработки числовых массивов исходных данных.

Наряду с СИМВО в Институте кибернетики также выполнялись работы по определению и уточнению структур и оценок параметров численных реализаций отдельных моделей внутриводоемных процессов при наличии соответствующей исходной информации по методу группового учета аргументов (МГУА) [5, 6].

Особенностью всех моделей гидродинамических состояний водных объектов является то, что они должны быть ориентированы только на конкретные водные объекты и не пригодны для использования на других объектах. Поэтому, все известные на то время аналогичные модели других авторов не могли быть использованы в Украине, так как они были ориентированы только на некоторые водные объекты вне Украины.

Эффективность, новизна и актуальность СИМВО обосновывается тем, что разработанные в Институте кибернетики модели были впервые реализованы и использованы для исследования состояний водоемов и водотоков Украины.

Система моделирования является «открытой» для включения новых моделей и объектов.

Описания проблемно-ориентированных подсистем в составе СИМВО было начато публикацией подсистемы WODA в [7].

В данной статье приводится описание подсистемы FEFLOW как продолжение публикаций подсистем в составе СИМВО.

В дальнейшем будут опубликованы описания остальных перечисленных подсистем.

Описание подсистемы FEFLOW. Решение проблем загрязнения подземных вод и массопереноса в подземных водоносных горизонтах является всегда актуальным. Комплекс FEFLOW используется для прогнозирования движения химических веществ в потоке подземных вод для того, чтобы:

– описать пространственно-временное распределение концентрации веществ;

– оценить продолжительность и время перемещения загрязнителя;

– планировать и разрабатывать стратегию борьбы с загрязнителем;

– создать систему эффективного мониторинга.

Для этого разработан основанный на методе конечных элементов комплекс программ FEFLOW, где рассчитывается двумерный поток и массо- (тепло) перенос в подземном водоносном горизонте. Пользователь имеет возможность выбирать между комбинированным и раздельным моделированием в условиях установившихся, неустановившихся и полностью транзитных процессов, при этом учитываются процессы распада и сорбции вещества.

Информационное обеспечение системы включает кроме прикладных подсистем также справочную и методическую информацию на основе которых создана информационно-справочная система, которая является неотъемлемой частью системы моделирования водных объектов.

В статье приводится описание проблемно-ориентированной подсистемы FEFLOW, основой которой является двумерная плановая модель миграции загрязнений в подземных водоносных горизонтах. Задача миграции решается совместно с задачей фильтрации. При этом в случае нестационарной фильтрации обе эти задачи решаются многократно с некоторым временным шагом с учетом процессов распада и сорбции вещества. Численно модель реализована как конечно-элементная на нерегулярных четырех- и восьмиугольных сетках, которые строятся автоматически после задания координат угловых граничных узлов.

Краткое описание алгоритмов. При описании алгоритмов учитываются особенности некоторых процессов, протекающих в подземных водоносных горизонтах, а именно, непосредственно потока жидкости, массопереноса, образования взвешенного остатка и значений изопараметрических элементов. Далее приводятся описания названных процессов.

Уравнение потока в двумерном (горизонтальном) подземном водоносном горизонте имеет вид

$$S\frac{dh}{dt}-\frac{d}{dx_i}\left(T_{ij}\frac{dh}{dx_j}\right)=Q_h, \tag{1}$$

где $h=h\left(x_i,t\right)$.

Параметры уравнения:

- коэффициент аккумулирования запасов подземных вод

$$S=v+S_sM, \tag{2}$$

- тензор проводимости

$$T_{ij}=K_{ij}M, \tag{3}$$

или для изотропных условий

$$T_{ij}=T\Delta_{ij}=KM\Delta_{ij}. \tag{4}$$

Обозначения: h – гидравлический напор; v – коэффициент пористости; S_s – коэффициент удельной емкости; M – мощность подземного водоносного горизонта; Q_h – функция стока/источника; $T(T_{ij})$ – проводимость; $K(K_{ij})$ – гидравлическая проводимость; $\Delta_{ij}=\begin{cases}1, & \text{для } i=j\\ 0 & \text{для } i\neq j\end{cases}$ – тензор Кронеккера; x_i – координата; $i,j=1,2$ – суммирующие индексы.

Начальное условие: $h\left(x_i,0\right)=h_0\left(x_i,0\right)$.

Граничные условия:

$$h\left(x_i,t\right)=h_1R \quad \text{на } G1 \text{ (первый тип)},$$

$$y_h=y_hR=-T_{ij}\frac{dh}{dx_{ij}}l_i \quad \text{на } G2 \text{ (второй тип)},$$

$$y_h=-L_h\left(h_2R-h\right) \quad \text{на } G3 \text{ (третий тип)}, \tag{5}$$

где h_0 – заданное исходное значение гидравлического напора; h_1R – граничное значение гидравлического напора типа Дирихле; y_h – объемный поток Дарси; y_hR – граничное значение объемного потока типа Неймана; l_i – направляющие косинусы; h_2R – граничное значение гидравлического напора по типу Коши; L_h – коэффициент кольматации (переноса), описывающий взаимодействие между подземным водоносным горизонтом и поверхностными водами.

Поток y_h положительный, если поток жидкости направлен извне и отрицательный, если поток жидкости направлен вовнутрь на границе G_2. Параметр L_h вводится таким образом, что моделируемый приток вдоль границы $G3$ $(h_2R-h)>0$.

Таким образом, для определения гидравлического напора h из уравнения (1) необходимо знать четыре параметра $T, S, Q_h, L_h,$ исходное (h_0) и граничные $(h_1R,\ y_hR,\ h_2R)$ условия.

Уравнение массопереноса, описывающее движение растворенных химических веществ в потоке подземных вод имеет вид

$$MR\frac{dC}{dt}+\frac{d}{dx_i}\left(y_iC\right)-\frac{d}{dx_i}\left(D_{ij}\frac{dC}{dx_j}\right)+MRL_aC=MnQ_c. \tag{6}$$

Необходимо определить решение $C=C(x_i,t)$ с помощью удельного потока Дарси

$$y_i=-T_{ij}\frac{dh}{dx_j} \tag{7}$$

известного из решения уравнения (1).

Параметры уравнения:

- коэффициент запаздывания

$$R=n+\left(1+n\right)k, \tag{8}$$

- тензор дисперсии, для изотопных условий

$$D_{ij}=\left(nD_dM+LLV_y\right)\Delta_{ij}+\left(L-LL\right)\frac{y_iy_j}{V_y}. \tag{9}$$

Обозначения: C – концентрация химических веществ; n – кинематическая пористость; k – коэффициент молекулярной диффузии; D_d – коэффициент молекулярной диффузии; L, LL – коэффициенты соответственно продольной и поперечной дисперсии; $V_y=\left(y_iy_i\right)$ – абсолютный удельный поток; l_a – скорость снижения концентрации; Q_c – функция источника/стока.

Начальные и граничные условия:

н.у. $C(x_i,0)=C_0(x_i,0)$,

г.у. $C(x_i,t)=C_1R$ на $G4$ (первый тип),

$$y_c = y_cR = -D_{ij}\frac{dC}{dx_j}l_i \quad \text{на } G5 \text{ (второй тип)},$$

$$y_c = -L_c(C_2R - C) \quad \text{на } G6 \text{ (третий тип)}, \qquad (10)$$

где C_0 – заданная исходная концентрация вещества; C_1R – заданная граничная концентрация типа Дирихле; –++ NB; y_c – заданный поток нормальной концентрации; y_cR – заданная граничная концентрация типа Неймана; C_2R – заданная граничная концентрация типа Коши; L_c – коэффициент передачи концентрации.

Таким образом, для решения уравнения необходимо знать девять параметров/функций (M, n, k, D_d, L, T, l_a, Q_c, L_c), начальные (C_0) и граничные условия (C_1R, y_cR,C_2R).

Формулы слабого взвешенного остатка для дифференциальных уравнений (1) и (6) имеют следующий вид (см. 2):

$$\iint_A\left(WS\frac{dh}{dt}+T_{ij}\frac{dW}{dx_i}\frac{dh}{dx_j}\right)dA+\int_{G3}WL_hhdG=$$
$$=\iint_A WQ_hdA-\int_{G2}Wy_hRdG+\int_{G3}WL_hH_2RdG, \qquad (11)$$

$$\iint_A\left(W\left(MR\frac{dC}{dt}+y_i\frac{dC}{dx_i}+C\frac{dy_i}{dx_i}\right)+D_{ij}\frac{dW}{dx_i}\frac{dC}{dx_j}+WMRl_aC\right)dA+\int_{G6}WL_cCdG=$$
$$=\iint_A WMNQ_cdA-\int_{G5}Wy_cRdG+\int_{G6}WL_cC_2RdG, \qquad (12)$$

где W – весовая функция, A – область ограниченная границей $G = G1 + G2 + G3 = G4 + G5 + G6$, на которых предусмотрены граничные условия (5) и (10).

При подсчете изопараметрического элемента вся область потока A с ее границей G подразделяется на ряд конечных элементов, при этом неизвестные зависимые переменные h,y_i(i = 1,2) и C аппроксимируются с помощью пробных функций:

$$h(x_i,t)=N_l(x_i)H_l(t),$$
$$y_i(x_i,t)=N_l(x_i)V_{il}(t),$$
$$C(x_i,t)=N_l(x_i)C_l(t). \qquad (13)$$

Суммирование по l ведется по всем узлам элемента, где N_l – функция формы для дискретных точек (узлов).

При компьютерных расчетах предусматривается два типа конечных элементов, а именно:

- линейный четырехузловой изопараметрический элемент (рис. 1);
- параболический восьмиузловой изопараметрический элемент (рис. 2).

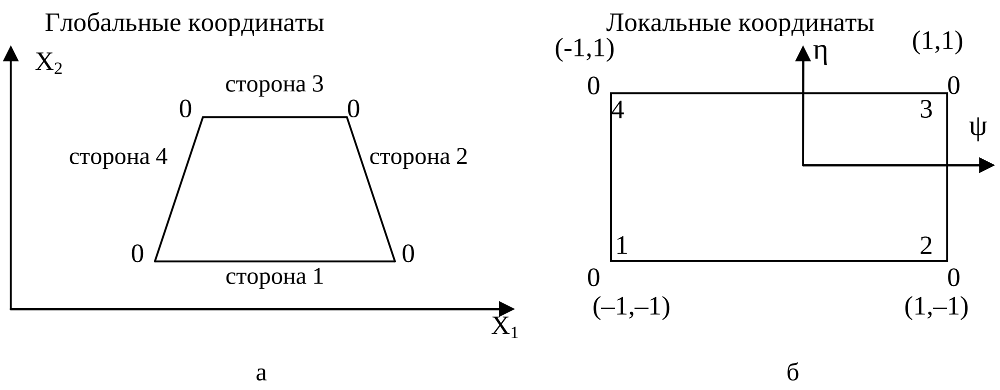

РИС. 1. Линейный четырехузловой элемент

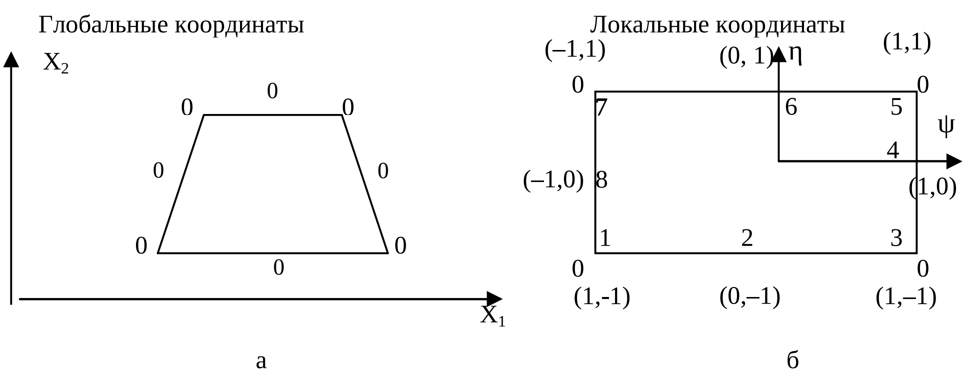

РИС. 2. Параболический восьмиузловой элемент

Функции формы для линейного элемента имеют вид:

$$N_l = 0.25(1+\psi\psi_l)(1+\eta\eta_l), \qquad \text{для } l = 1,2,3,4. \tag{14}$$

Функции формы для параболического элемента:

- угловые для l = 1,3,5,7

$$N_l = 0.25(1+\psi\psi_l)(1+\eta\eta_l)(\psi\psi_l+\eta\eta_l-1),$$

- среднесторонние для l = 2,6

$$N_l = 0.5(1-\psi^2)(1+\eta\eta_l), \tag{15}$$

- среднесторонние для l = 4,8

$$N_l = 0.5(1+\psi\psi_l)(1-\eta^2).$$

Для функциональных производных существуют следующие соотношения:

$$\begin{vmatrix} dN_1/dx_1 \\ dN_1/dx_2 \end{vmatrix} = J^{-1}\begin{vmatrix} dN_1/d\psi \\ dN_1/d\eta \end{vmatrix}, \tag{16}$$

где J – матрица Якоби, определяемая как

$$J = \begin{vmatrix} \dfrac{dx_1}{d\psi} & \dfrac{dx_2}{d\psi} \\ \dfrac{dx_1}{d\eta} & \dfrac{dx_2}{d\eta} \end{vmatrix}. \tag{17}$$

Матрицу J легко оценить в изопараметрическом контексте с помощью

$$x_i = N_l X_{il}, \quad \left(i = 1, 2\right), \tag{18}$$

где X_{il} – соответствует координатам узла l.

Элемент объема приобретает вид

$$dA = dx_1 dx_2 = \det J d\psi d\eta\ , \tag{19}$$

где $\det J = \dfrac{dx_1}{d\psi}\dfrac{dx_2}{d\eta} - \dfrac{dx_1}{d\eta}\dfrac{dx_2}{d\psi}$.

Подобным же образом для поверхностных интегралов элементы длины соответственно

$$dG = \sqrt{\left(dx / d\psi\right)^2 + \left(dx / d\psi\right)^2}\, d\psi \tag{20}$$

– для сторон 1 и 3

$$dG = \left(\frac{dx}{d\eta} + \frac{dx}{d\eta}\right) d\eta, \tag{21}$$

– для сторон 2 и 4.

Используя эти соотношения, уравнения (11) и (12), записанные в глобальных координатах (x_1, x_2), преобразовываются в систему локальных координат (ψ, η) с простыми пределами интегрирования (–1, 1).

При создании элементов следует учесть следующие условия:

– углы в каждом элементе не должны превышать 180°;

– разделение области на элементы не должно допускать пробелов.

В данной модели применяется метод Галеркина, в котором весовые функции W_k и функции формы N_k идентичны и суммирование ведется по всем конечным элементам.

После подстановки (13) в уравнения (11) и (12) получаем системы алгебраических уравнений следующего вида:

$$AH_{t+d\,t} = BH_t + G_{t+d\,t}, \tag{22}$$

$$\mathrm{W}C_{t+d\,t} = EC_t + F_{t+d\,t}, \tag{23}$$

где H и C – векторы, содержащие значения гидравлического напора и концентрации в узлах, а dt – изменяющийся шаг времени. Ищется план взвешенных во времени разностей, при этом коэффициент взвешенного времени равен 1 в случае временных шагов и равен $\dfrac{1}{2}$ для схемы Кранка – Никольсона.

Интегрирование по каждому элементу осуществляется с помощью квадратуры Гаусса – Лежандра. По этому методу конкретные значения подлежащей интегрированию функции рассчитываются в точках Гаусса. Эти значения взвешиваются надлежащим образом и суммируются, что и дает значение желаемого интеграла. Для обеспечения достаточной точности при использовании линейных элементов требуется две точки Гаусса, при использовании параболических элементов – три точки Гаусса (3).

Из соображений точности отдается предпочтение оценке по точкам Гаусса. В случае расчета поля потока Дарси на основе производной поля H гидравлического напора используется закон Дарси [4].

Следует заметить, что уравнения (22), (23) могут решаться отдельно. В таком случае поле потока Дарси рассчитывается с помощью промежуточных расчетов. В уравнении (22) матрицы потока A и B симметричны, а при этом соответствующие им W и E в уравнении массопереноса (23) – несимметричны.

Для решения уравнений применяется метод профильного решения с прямым исключением (метод конвертов). Технология метода состоит в разложении матриц A и W (матриц жесткости) на произведение нижней и верхней треугольных матриц и использовании метода Краута исключения Гаусса. Матрицы жесткости закладываются в компактную форму с ненулевым профилем, длина которого равна сумме высот столбцов. С учетом того, что при профильном методе решения уравнений количество операций пропорционально сумме квадратов высот столбцов, поэтому для уменьшения вычислительной погрешности необходимо сокращение длины профиля. Для этого проводится исключение уравнений для так называемых пассивных узлов, содержащих граничные условия первого типа (типа Дирихле) и оптимизация узлов проводится на основании алгоритма Катхилла – Макки с обратным знаком.

Когда у матрицы A и у W варьируются входные данные, что возникает при изменении шага времени и весовой функции времени и/или когда коэффициенты зависят от времени при полностью неустановившемся потоке, то в таких случаях используются прогрессивное исключение (триангуляция) и обратные подстановки.

Для обеспечения численной устойчивости следует учитывать, что точность дискретизации пространства зависит от характеристического элемента длины h и типа элемента. Оценка нормы общей погрешности дает точность порядка $O(h^2)$ для линейных элементов и $O(h^2)$ и $O(h^4)$ – для параболических элементов в узлах, расположенных соответственно по углам и по средине сторон. При моделировании процессов при неблагоприятных граничных условиях, создающих резкое граничное расслоение, может возникнуть колебательное поведение раствора (в форме резкого движения из стороны в сторону), если элемент длины h достаточно мал.

Резкие колебания могут возникнуть, если

$$y_h / D > 2 \text{, для линейных элементов} \tag{24}$$

$$y_h / D > 4 \text{, для параболических элементов,} \tag{25}$$

где y и D – соответственно характеристические значения потока и рассеивания.

Однако во многих практических задачах эти пределы можно существенно превышать, и при аппроксимации по методу Галеркина можно достичь хорошей точности.

Иногда приходится применять ограничительные меры для стабилизации растворов, что означает введение искусственного рассеивания для затухания колебаний в направлении течения. Это осуществляется с помощью модификации тензора рассеивания, а именно:

$$D_{ij} = \left(nD_d M + V_y LL\right)\Delta_{ij} + \left(L + num - LL\right)\frac{y_i y_j}{V_j}, \tag{26}$$

где num – дополнительное продольное рассеивание; $num = h/2$, для линейных элементов; $num = h/4$, для параболических элементов.

Этот подход эквивалентен методике Петрова – Галеркина, но более экономичен (5).

Точность временной дискретизации определяется временным шагом и функцией взвешивания σ. При σ = 1 обеспечивается точность первого порядка $O(dt)$ и не налагается ограничений на длину шага по времени. Шумовые эффекты в расчетах вызываются, прежде всего, неожиданным скачком граничного условия, например, исходного времени. В этих случаях расчеты нужно проводить, с σ = 1/2, что обеспечивает точность $O(dt^2)$.

Выводы. По своей структуре комплекс компьютерной численной реализации моделей FEFLOW формально разделяется на две части: модули препроцессора и модули постпроцессора.

Препроцессор обеспечивает ввод входной информации и управляющих данных, включая проверку и обработку информации, генерирование узловых элементов и оптимизацию упорядочивания узлов.

Постпроцессор осуществляет решение задачи по методу конечных элементов и вывод информации.

Инфраструктура комплекса является открытой и создана таким образом, чтобы упростить получение новой текущей информации и обеспечить изменения имеющихся или добавление новых модулей.

В комплексе FEFLOW используется метод динамического распределения памяти для требуемых массивов. Для этого задается одномерный массив, который включает в себя все информационные и рабочие массивы. Максимальная длина массива должна определяться в зависимости от условий каждой конкретной задачи, при этом отсутствуют ограничения на максимальные значения различных параметров – количество узлов, количество элементов и т. д.

Для организации ввода исходной информации предварительно должен быть подготовлен файл, состоящий из нескольких наборов данных, причем каждому такому набору предшествует макрокоманда, определяющая его назначение. Все макрокоманды можно разделить на три вида: макрокоманды классификации задачи, макрокоманды информационного ввода и макрокоманды управляющей информации.

Макрокоманды классификации задачи и их комбинации определяют все случаи, которые возможны при моделировании потока и массо- теплопереноса в подземных водах, а именно: отдельное моделирование массо- теплопереноса и моделирование потока соответственно в условиях установившихся, неустановившихся и полностью транзитных процессов.

За каждой из макрокоманд информационного ввода должны следовать соответствующие наборы данных, а именно: об узловом элементе; об угловых узлах (координаты, граничные условия); о временных и физических характеристиках наборов элементов. Кроме этого, для случаев нерегулярных исходных полей нужны данные об исходных значениях или адрес и номер канала, с которого они будут считываться, а также для случая моделирования отдельно массо- теплопереноса нужны данные о скоростных полях потока Дарси или адрес и номер канала, с которого они будут считываться.

Макрокоманды управляющей информации определяют необходимость использования процедур поглощения колебаний и оптимизации нумерации узлов, определяют вид и объем входных данных, а также обеспечивают обработку и сжатие числовых массивов исходной информации с использованием подсистемы APPROXIMATION.

А.О. Каленчук-Порханова, Н.В. Басок

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ У ПІДЗЕМНИХ ВОДОНОСНИХ ГОРИЗОНТАХ

Розглядається проблема створення системи імітаційного моделювання стану водних об’єктів на прикладі однієї з її підсистем.

A. Kalenchuk-Porkhanova, N. Basok

MODELLING OF THE PROCESSES IN UNDERGROUND WATER-WAY HORIZONS

A problem of creation of simulation system for water objects state is considered on the example of its subsystem.

1. *Каленчук-Порханова А.О.* Система моделювання стану водних об’єктів Північно-Західного Причорномор’я // Збірник доповідей II-го з’їзду гідробіологічного товариства України. Том 2, – К.: 1997. – С. 207 – 208.
2. *Лаврик В.И., Каленчук-Порханова А.А.* Имитационная система моделирования экологического состояния устьев рек, лиманов и озер северо-западного Причерноморья //

Диагноз состояния экосистемы Черного моря и зоны сопряжения суши и моря: Сборник трудов научной конференции. – Севастополь, 1997. – С. 88 – 89.

3. *Каленчук-Порханова А.А.* Аппарат аппроксимации для анализа и синтеза сложных систем // Пр. Міжнар. конф. «50 років Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України», Київ, 2008. – С. 354 – 361.
4. *Каленчук-Порханова А.А., Вакал Л.П.* Об одном способе преобразования экологической информации // Технические и программные средства систем экологического мониторинга. – Киев: Ин-т кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины, 1994. – С. 76 – 80.
5. *Ивахненко А.Г., Пека П.Ю., Востров Н.П.* Комбинированный метод моделирования водных и нефтяных полей. – К.: Наукова думка, 1984. – 148 с.
6. *Ивахненко А.Г., Степашко В.С.* Помехоустойчивость моделирования. – К.: Наукова думка, 1985. – 216 с.
7. *Каленчук-Порханова А.А., Басок Н.В.* Подсистема моделирования изменений кислородного режима в водотоках // Компьютерная математика. Вып. 1. – Киев: Ин-т кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины, 2015. – С. 18 – 25.

Получено 31.08.2015

Об авторах:

Каленчук-Порханова Анжелина Алексеевна,
кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник
Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины,
E-mail: ioanna@public.icyb.kiev.ua

Басок Наталия Васильевна,
главный инженер-программист
Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины.
E-mail: basok_nat@rambler.ru