

УДК 519.6

В. О. Богасько, канд. техн. наук

Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова НАН України, м. Київ

МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ ЗАСОЛЕНОСТІ НА ДИНАМІКУ ГЕОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ

У роботі розглядається математична модель дифузійних та хімічних процесів у ґрунті, яка враховує вплив концентрації солей у фільтраті на міграцію речовин. Наведені результати обчислювальних експериментів, які показують суттєвий вплив врахування цих факторів на моделювання процесів міграції забруднень. Пропонується розвинути паралельного алгоритму розв'язання задач щодо цієї моделі.

Ключові слова: *геохімічні процеси, математичне моделювання, міграція забруднень, паралельні алгоритми.*

Вступ. Моделювання фільтраційних процесів в ґрунтах важливе при розв'язанні задач екологічної проблематики. Речовини, що зберігаються у розчинній формі в поверхневих накопичувачах фільтрують в ґрунт, забруднюючи власне його, а також підземні води, річки, водогони. У випадку хімічно активних речовин таких, як луги та кислоти, їх міграція супроводжується реакціями, які можуть призвести до зміни хімічного складу ґрунту, що, в свою чергу, впливає на подальший міграційний процес. На нього також впливає й концентрація речовин у фільтраті. Врахування цих процесів сприяє побудові більш точних математичних моделей.

Окрім цього в статті розглядається також питання ефективного використання обчислювальних ресурсів при паралельній реалізації алгоритмів розв'язання задач щодо даного типу математичних моделей на кластерних системах.

Математична модель дифузійних та хімічних процесів. Будемо розглядати математичну модель [1, 2] дифузійних та хімічних процесів у пористих середовищах, яка побудована за таких припущень:

1. Швидкість хімічних реакцій, які протікають в ґрунті, пропорційна концентраціям реагентів у рідкому (наприклад, кислоти чи луґу) та у твердому стані (наприклад, солі чи оксиду).
2. Одночасно з хімічною реакцією відбувається адсорбція розчинних речовин твердою фазою, рівняння кінетики якої записується у вигляді [3]:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \beta(\sigma C - \alpha N),$$

де C , N — концентрація речовини відповідно в рідкій та твердій фазах, α , β — кінетичні коефіцієнти, σ — активна пористість середовища.

3. Реакції, що відбуваються у ґрунті під дією кислого розчину, є багаточисельними і модель повинна описувати їх довільну кількість.

4. При реакції кислого розчину з компонентами ґрунту можуть утворюватись як розчинні так і нерозчинні речовини.

Розширимо досліджувану математичну модель враховуючи такі фактори:

1) залежність швидкості гетерогенної реакції від площі поверхні речовини у твердій фазі [4];

2) залежність коефіцієнта дифузії речовин від швидкості фільтрації [5];

3) залежність коефіцієнта фільтрації розчину речовини в ґрунті від концентрації цієї речовини в розчині та хімічного складу ґрунту, який може змінюватись внаслідок забруднення [6].

Система рівнянь такої моделі матиме вигляд:

$$\sigma \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial H}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial H}{\partial y} \right), \quad v_x = -k \frac{\partial H}{\partial x}, \quad v_y = -k \frac{\partial H}{\partial y}, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \sigma \frac{\partial C_1}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial x} \left(D_1 \frac{\partial C_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_1 \frac{\partial C_1}{\partial y} \right) - v_x \frac{\partial C_1}{\partial x} - \\ & - v_y \frac{\partial C_1}{\partial y} - \sum_{i=1}^{N_s + N_{ns}} \mu_{1i} C_{mi}^p C_1 + F, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\frac{\partial C_{mi}}{\partial t} = -\beta_i \sigma C_{mi}^p C_1, \quad i = \overline{1..N_s + N_{ns}}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial N_{0i}}{\partial t} = \beta'_i \sigma C_{m,i+N_s}^p C_1, \quad i = \overline{1..N_{ns}}, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \sigma \frac{\partial C_{2i}}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{2i} \frac{\partial C_{2i}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{2i} \frac{\partial C_{2i}}{\partial y} \right) - \\ & - v_x \frac{\partial C_{2i}}{\partial x} - v_y \frac{\partial C_{2i}}{\partial y} + \mu_{2i} C_{mi}^p C_1 - \frac{\partial N_i}{\partial t}, \quad i = \overline{1..N_s}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = \beta_{*i} (\sigma C_{2i} - \alpha_{*i} N_i), \quad i = \overline{1..N_s}. \quad (6)$$

Тут N_s — кількість реакцій з утворенням розчинних речовин, N_{ns} — кількість реакцій з утворенням нерозчинних речовин, C_{mi} — концентрації активних компонентів реакцій у твердій фазі, C_1 — концентрація реагенту в рідкій фазі, N_{0i} — концентрація нерозчин-

них речовин-результатів реакцій, C_{2i} — концентрація розчинних речовин-результатів реакцій в рідкій фазі, N_i — концентрація адсорбованих речовин у твердій фазі, H — напір, μ_i , μ_{2i} , β_i , β'_i — константи швидкості хімічних реакцій, σ — пористість середовища; $\vec{v} = \{v_x, v_y\}$ — вектор швидкості фільтрації; D_1 , D_{2i} — коефіцієнти конвективної дифузії для реагенту та активних компонентів відповідно; β_{*i} — коефіцієнти швидкості адсорбції; α_{*i} — коефіцієнти рівноважного адсорбційного розподілу [3].

Коефіцієнт фільтрації сольового розчину залежить як від хімічного складу ґрунту, який може змінюватись у випадку потрапляння у ґрунт кислот, так і від концентрації солі у розчині. Ці залежності враховані у моделі шляхом задання коефіцієнта фільтрації k у вигляді

$$k(N_0, C_2) = k_0 + a_0 N_0 + a_1 N_0^2 + a_2 N_0^3 + a_3 N_0^4 + b_0 C_2 + b_1 C_2^2 + b_2 C_2^3 + b_3 C_2^4,$$

де N_0 — концентрація нерозчинних солей, що утворились в результаті хімічних реакцій, а C_2 — концентрація розчинних солей — результату реакції у фільтраті.

Окрім цього будемо враховувати залежність коефіцієнтів дифузії речовин від швидкості фільтрації у формі $D = D_0 + \alpha_0 \|\vec{v}\|$.

Кінетику реакцій опишемо відштовхуючись від *shrinking core model* [4], згідно якої частинки реагенту у твердій фазі вважаються ідеально сферичними. Радіус цих сфер зменшується в процесі вимивання речовини. Коефіцієнт швидкості реакції при цьому залежить від концентрації рідкого реагенту та площі поверхні частинок твердого реагенту:

$$\beta = \beta_0 S = \frac{4}{3} \beta_0 \pi n r^2,$$

$$C_{m0} = \frac{4\pi n \rho}{m} r^3 \Rightarrow r = \sqrt[3]{\frac{m C_{m0}}{4\pi n \rho}} \Rightarrow$$

$$\beta = \frac{4}{3} \beta_0 \pi n \left(\frac{m C_{m0}}{4\pi n \rho} \right)^{\frac{2}{3}} = \beta'_0 C_{m0}^{\frac{2}{3}}.$$

Тобто, для врахування такої залежності у вищеописаній моделі коефіцієнт ρ має дорівнювати $2/3$.

Результати обчислювальних експериментів. Виконана серія обчислювальних експериментів щодо з'ясування впливу цих уточнень на результати моделювання. Розглядалась задача моделювання міграції слабого розчину сірчаної кислоти з водовідстійника до нескінченного водозабору (рис. 1). Вважалось, що при цьому відбуваються дві хімічних

реакції: кислоти з карбонатом кальцію, що призводить до утворення слабкорозчинного гіпсу (1) — сульфату кальцію, та реакції вимивання кислотою з ґрунту оксиду міді, результатом якої є добре розчинний сульфат міді (2). Для чисельного розв'язання рівняння (1)-(6) дискретизувались за локально-одновимірною схемою.

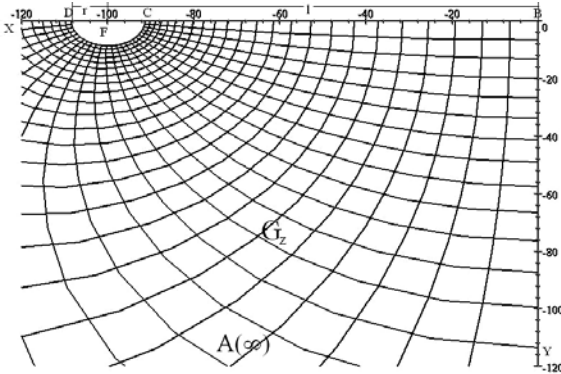


Рис. 1. Область фільтрації

Значення коефіцієнтів моделі були взяті такими: $k = 0.05$ м / доба — коефіцієнт фільтрації води у супесі; $\sigma = 0.4$ — коефіцієнт пористості супесі; $D_1 = 0.0177$ м² / доба — коефіцієнт дифузії слабого розчину сірчаної кислоти; $D_2 = 0.00039$ м² / доба — коефіцієнт дифузії розчину сульфату міді; $\mu_{10} = 0.00492$ — коефіцієнт швидкості реакції (2) для витрати кислоти; $\mu_{11} = 0.01$ — коефіцієнт швидкості реакції (1) для витрати кислоти; $\mu_2 = 0.00804$ — коефіцієнт швидкості реакції (2) для утворення сульфату міді; $\beta'_0 = 0.02$ — коефіцієнт швидкості реакції (1) для утворення сульфату кальцію; $\beta_0 = 0.01$ — коефіцієнт швидкості реакції (2) для витрати оксиду міді; $\beta_1 = 0.02$ — коефіцієнт швидкості реакції (1) для витрати карбонату кальцію; $\alpha_* = 0.25$, $\beta_* = 0.1$ — коефіцієнти адсорбції-десорбції сульфату міді; $a_0 = -0.15$, $b_0 = -0.05$ — коефіцієнти лінійної залежності коефіцієнта фільтрації від концентрації солей; $\alpha_0 = 0.2$ — коефіцієнт залежності коефіцієнту дифузії від швидкості фільтрації; $\bar{C}_{m0} = 0.5$ — відносна початкова концентрація карбонату кальцію; $\bar{C}_{m1} = 0.25$ — відносна початкова концентрація оксиду міді.

Насамперед обраховувався процес міграції кислоти без врахування зміни коефіцієнта фільтрації під впливом збільшення в ґрунті та у роз-

чині концентрації солей. Аналізувався вплив на розв'язок залежності коефіцієнтів дифузії від швидкості фільтрації та використання *shrinking core model* при моделюванні кінетики хімічних реакцій. Вплив першої залежності виявився таким, що незначним чином пришвидшує розповсюдження кислого розчину, проте суттєво змінює динаміку міграції сульфату міді у розчині (рис. 3-4). Вплив же *shrinking core model* проявився у загальному пришвидшенні хімічних процесів й, відповідно, уповільненні розповсюдження кислого розчину в ґрунті (рис. 2). В динаміці це проявляється зокрема у тому, що кількість речовини, яка утворюється внаслідок реакцій, буде, в порівнянні з обчисленим за вихідною моделлю, більша при наближенні до зони витoku кислого розчину, але буде швидше спадати при віддаленні від нього (рис. 4).

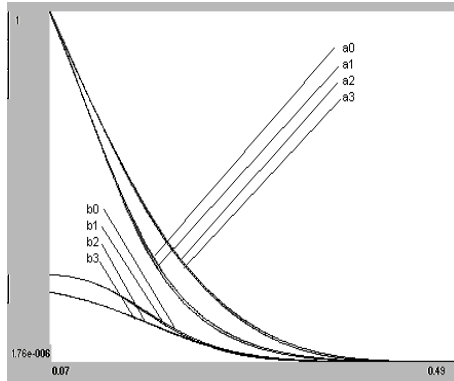


Рис. 2. Концентрації сірчаної кислоти (a_0-3) та сульфату кальцію (b_0-3) при $p = 2/3$, $\alpha_0 = 0.02$ (a_0, b_0); $p = 2/3$, $\alpha_0 = 0$ (a_1, b_1); $p = 1$, $\alpha_0 = 0.02$ (a_2, b_2); $p = 1$, $\alpha_0 = 0$ (a_3, b_3). $T = 100$ діб

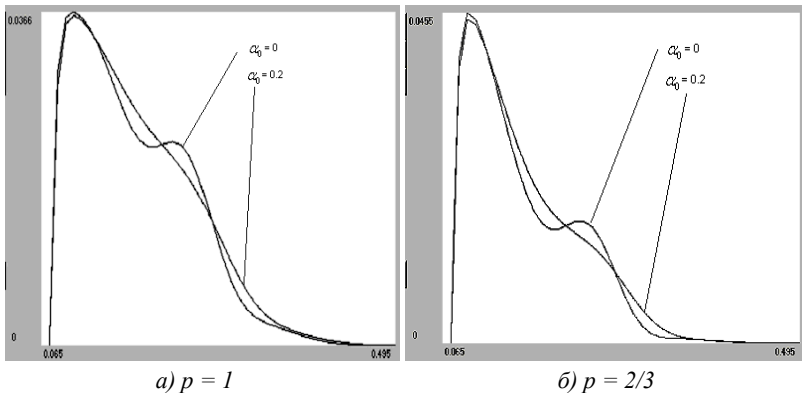


Рис. 3. Концентрація сульфату міді у розчині. $T = 100$ діб

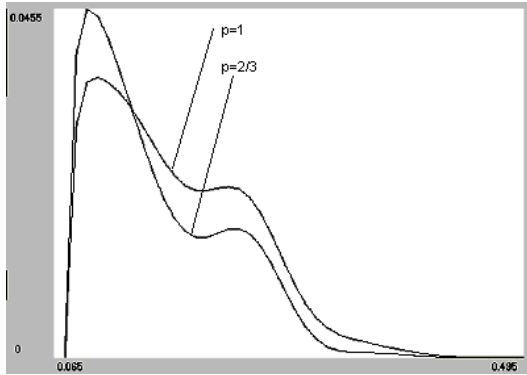
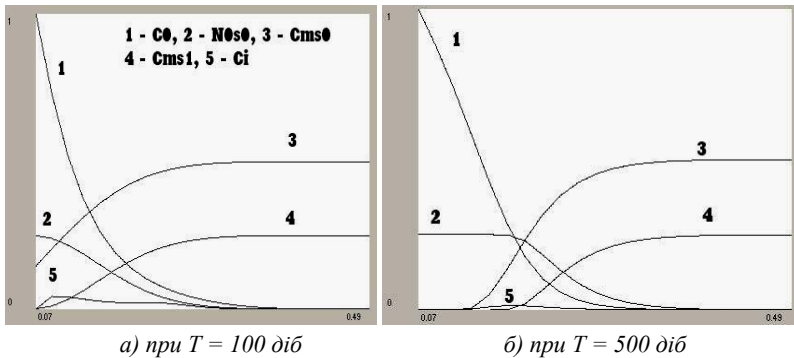


Рис. 4. Концентрація сульфату міді у розчині. $T = 100$ діб

Результати моделювання при врахуванні залежності коефіцієнта фільтрації лише від концентрації сульфату кальцію подані на рис. 5, 6 для моментів часу $t = 100$, $t = 500$ та $t = 2000$ діб відповідно. Для порівняння, на рис. 7 поданий результат розрахунків при постійному коефіцієнті фільтрації для $t = 2000$ діб. На рис 5-7 подані графіки зміни концентрацій кислоти, оксиду міді, карбонату кальцію та сульфату кальцію на перерізі $y = 0$. На рис. 8 подані графіки зміни швидкості фільтрації. Експерименти проводились з врахуванням залежності коефіцієнта дифузії від швидкості фільтрації та *shrinking core* model для опису кінетики реакцій.

Як видно з представлених залежностей, утворення шару з підвищеною концентрацією сульфату кальцію суттєво знижує швидкість фільтрації що гальмує процес розповсюдження кислого розчину й вивимання речовин з ґрунту.



а) при $T = 100$ діб

б) при $T = 500$ діб

Рис. 5. Концентрації сірчаної кислоти (C_0), сульфату кальцію (N_0s_0), карбонату кальцію (C_{ms0}), оксиду міді (C_{ms1})

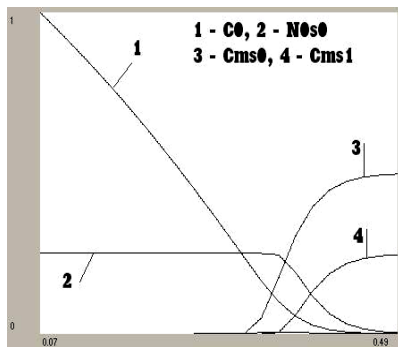


Рис. 6. Концентрації речовин при $T=2000$ діб

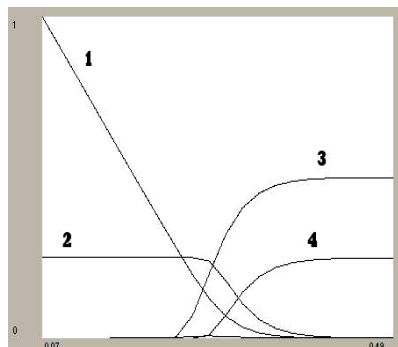


Рис. 7. Концентрації речовин при $T=2000$ діб та постійному коефіцієнті фільтрації

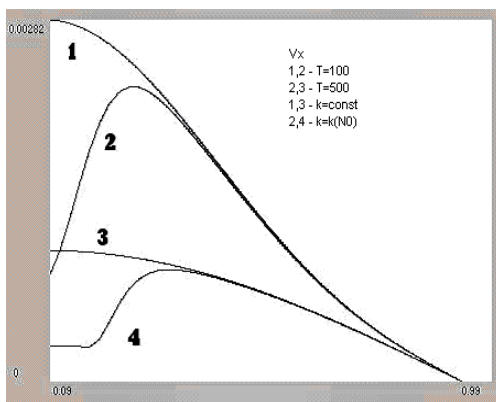


Рис. 8. x -компонент швидкості фільтрації (V_x) при $T = 100$ діб

Врахування залежності коефіцієнта фільтрації від концентрації сульфату міді у фільтраті не призводить до настільки суттєвих змін у результуючих розподілах концентрацій та швидкостей. Оскільки розчинний сульфат міді переноситься фільтраційним потоком, у суттєвих концентраціях він присутній лише в певній зоні навколо області де відбувається реакція, результатом якої він є (рис. 9). Відповідно й його вплив на фільтраційний процес має місце лише у цій зоні.

Графіки зміни концентрації кислоти, оксиду міді, карбонату кальцію та сульфату кальцію на перерізі $y = 0$ для ситуацій $k = k(N_0)$ та $k = k(N_0, C_2)$ подані на рис. 10, 11. Аналогічна залежність для швидкості фільтрації представлена на рис. 12.

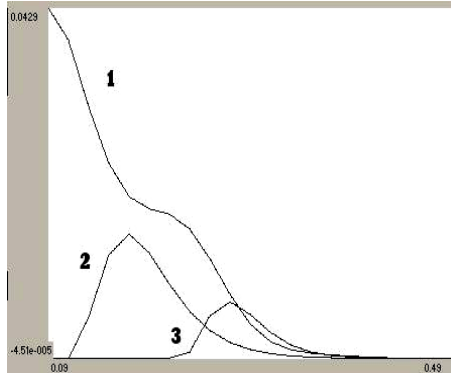
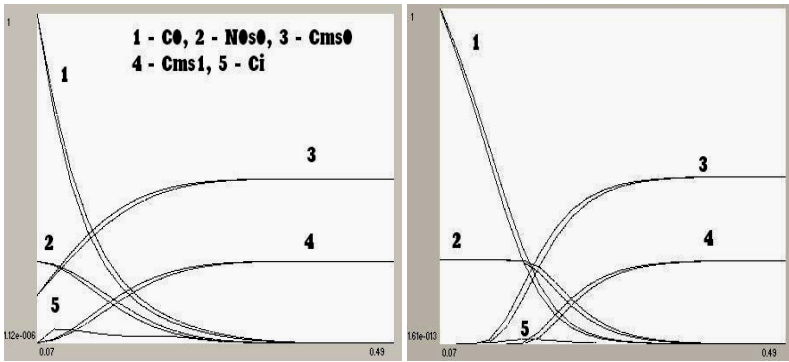


Рис. 9. Концентрація сульфату міді у розчині ($T = 100$ (1), 500 (2) та 2000 (3) діб)



а) при $T = 100$ діб

б) при $T = 500$ діб

Рис. 10. Концентрації речовин

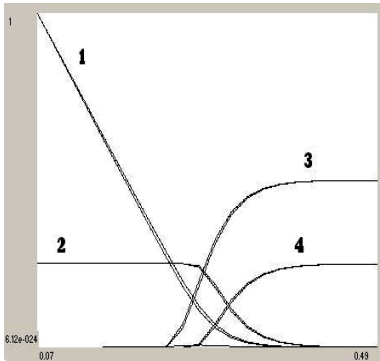


Рис. 11. Концентрації речовин при $T=2000$ діб

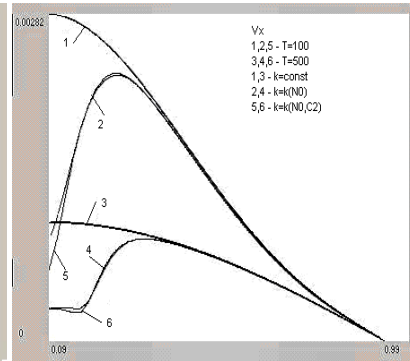


Рис. 12. x -компонент швидкості фільтрації (V_x) при $T=100$ діб

Паралельний алгоритм розв'язання задач. Вищеописані задачі розв'язувались на кластері СКІТ-3 Інституту кібернетики НАНУ за допомогою паралельних алгоритмів для обчислювальних систем з розподіленою пам'яттю, описаних у [2]. Проте, обчислювальна структура локально-одновимірних схем з одного боку, та фізична організація кластерних систем з SMP вузлів з іншого, дозволяє комбінувати паралельні алгоритми для систем з розподіленою пам'яттю та паралельні алгоритми для систем зі спільною пам'яттю. Зокрема, блоки обчислень незалежних одновимірних прогонок можуть виконуватись паралельно декількома потоками одного процесу. У випадку, коли кількість вільних процесорів у SMP вузлах дорівнює кількості запущених потоків й на кожному вузлі виконується лише один процес, при нехтуванні часом, який витрачається на синхронізацію, час роботи алгоритму має зменшуватись лінійно. Схема обчислень та розподілення даних для чотирьох процесів та чотирьох потоків в рамках кожного з процесів показана на рис. 13. Стрілками тут позначені обміни даними між процесами.

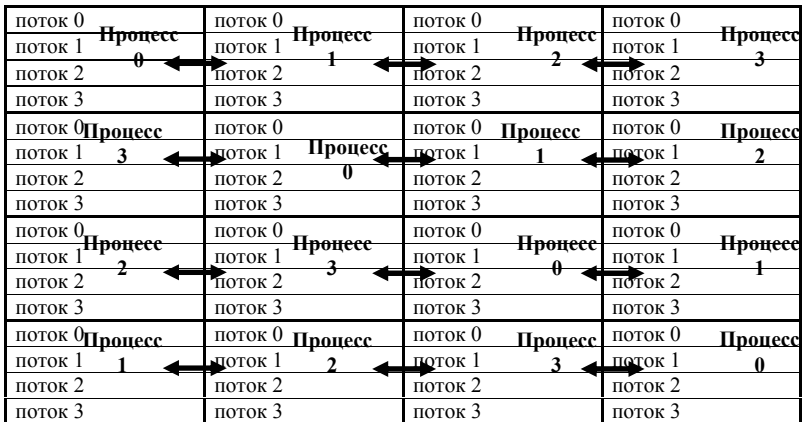


Рис. 13. Організація обчислювального процесу

Ефективність застосування такого підходу тестувалась розв'язанням описаної у попередньому пункті задачі з розмірністю 3000 x 3000 комірок. Отримані дані щодо часу розв'язання подані у табл. 1.

Дані чисельних експериментів показують, що така комбінація обчислювальних схем загалом пришвидшує розв'язання. Використання розпаралелення в межах одного вузла порівняно з розв'язанням послідовним алгоритмом дало близьке до лінійного пришвидшення розрахунків, що узгоджується з теоретичними оцінками. Час роботи при використанні одночасно двох схем розпаралелення порівняно з часом роботи при використанні лише розпаралелення для систем з

розподіленою пам'яттю дає пришвидшення до 24% при невеликій кількості задіяних вузлів, при чому при їх збільшенні ефективність застосування комбінованої схеми падає. Це пояснюється тим, що зменшення часу, який витрачається на обміни, при застосуванні комбінованої схеми компенсується збільшенням часу, що витрачається на синхронізацію процесів.

Таблиця 1

Час розв'язання

Кількість процесів	Кількість задіяних вузлів	Кількість потоків на один процес	Час розрахунків, мс
1	1	1	158620
4	1	1	56420
1	1	4	43220
8	2	1	25620
2	2	4	22840
12	3	1	16820
3	3	4	16170
16	2	1	12640
4	4	4	12620

Висновки. Проведені дослідження показали, що врахування залежностей коефіцієнтів фільтрації та дифузії від концентрації солей у розчині, що фільтрується, та змін у хімічному складі ґрунту, а також уточнення моделі кінетики хімічних реакцій, суттєво впливає на розв'язки задач моделювання фільтраційних та хімічних процесів у ґрунтах, зокрема в плані швидкості протікання цих процесів при віддаленні від джерела потрапляння хімічно активних речовин в ґрунт.

Розглядувані задачі є обчислювально складними, що зумовлює використання паралельних алгоритмів при їх розв'язанні. Було показано, що врахування технічних особливостей обчислювальної системи (кластерної системи СКІТ-3 Інституту кібернетики НАНУ) дозволяє суттєво пришвидшувати процес розв'язання задач.

Список використаних джерел:

1. Богаенко В. А. Программный комплекс моделирования класса процессов миграции загрязнений в грунтах на кластерных системах / В. А. Богаенко // УСиМ. — 2010. — №1. — С. 58–65.
2. Богаенко В. А. Параллельный алгоритм расчета фильтрационно-конвективной диффузии загрязнений из водоносных горизонтов / В. А. Богаенко, В. М. Булавацкий, В. В. Скопецкий // УСиМ. — 2008. — № 5. — С. 18–23.
3. Веригин Н. Н. Диффузия и массообмен при фильтрации жидкостей в пористых средах / Н. Н. Веригин, Б. С. Шержуков // Развитие исследований по теории фильтрации в СССР (1917-1967). — М. : Наука, 1967. — С. 237–313.

4. Sherwood T. R. Mass Transfer / T. R. Sherwood, R. L. Pigford, C. R. Wilke. — New York : McGraw Hill, 1975.
5. Ляшко И. И. Численное решение задач тепло- и массопереноса в пористых средах / И. И. Ляшко, Л. И. Демченко, Г. Е. Мистецкий. — К. : Наук. думка, 1991. — 264 с.
6. Власюк А. П. Математичне моделювання фільтраційної консолідації зростаючого шару ґрунту за наявності солепереносу в неізотермічних умовах / А. П. Власюк, П. М. Мартинюк // Мат. методи та фіз.-мех. поля. — 2006. — 49, №4. — С. 157–166.

Mathematical model of diffusion and chemical processes in soil, which takes in account influence of concentration of salts in filtrate on migration process, has been considered in the paper. Numerical experiments results, which show substantial influence of this factors on pollution migration modelling, have been given. Extension of parallel algorithm of solving problems for this model has been proposed.

Key words: *geochemical processes, mathematical modelling, pollution migration, parallel algorithms.*

Отримано: 14.06.2010

УДК 519.6

А. Я. Бомба, д-р техн. наук, канд. фіз.-мат. наук,
А. В. Тербус, аспірант

Рівненський державний гуманітарний університет, м. Рівне

МЕТОД КВАЗІКОНФОРМНИХ ВІДОБРАЖЕНЬ МОДЕЛЮВАННЯ ІДЕАЛЬНИХ ПОЛІВ ДЛЯ ОДНОГО КЛАСУ ПРОСТОРОВИХ ОБЛАСТЕЙ

Розглядається ідеальний процес у двозв'язній мало просторовій області – криволінійному паралелепіпеді з деякою циліндричною порожниною, обмеженому чотирма поверхнями течії та трьома еквіпотенціальними поверхнями, серед яких – дві протилежні грані та внутрішня поверхня, як носій керуючого потенціалу. Проведено системний аналіз випадків формування течії залежно від потенціалу керування, побудовано алгоритм вибору та наведено алгоритм розв'язання задачі у випадку рівності нулю потоку через внутрішню поверхню.

Ключові слова: *квазіконформне відображення, керуючий потенціал, алгоритм вибору.*

Вступ. У роботах [1], [5]-[7] побудовані просторові аналоги крайових задач на конформні та квазіконформні відображення для областей, обмежених поверхнями течії та еквіпотенціальними поверхнями