

MODELAREA MATEMATICĂ A HIDRODINAMICII ŞI DISPERSIEI POLUANŢILOR CHIMICI ÎN RÎURI

Victor BEŞLIU¹, Călin CIUFUDEAN², Constantin FILOTE², Galina MARUSIC¹, Vasile MORARU¹,
Beatrice ŞTEFĂNESCU²

¹Universitatea Tehnică a Moldovei, ²Universitatea „Ştefan cel Mare”, Suceava,
vbesliu@yahoo.com, calin@eed.usv.ro, filote@eed.usv.ro, galinamarusic@yahoo.com, moraru@mail.utm.md,
beatrice.stefanescu@ssi-bucovina.ro

Rezumat - În lucrare se propun modelul numeric al curgerii apei și cel al dispersiei poluanților chimici pe un sector al râului Prut. Pentru modelare se utilizează ecuațiile lui Navier-Stokes în forma diferențială sub forma Reynolds, ecuația de continuitate și ecuația de transport a poluanților. Se folosesc rezultatele analizelor de laborator ale nitriților N-NO₂ și ale produselor petroliere, care au fost prelevate în luna iulie 2011.

Cuvinte cheie - mișcare turbulentă, ecuațiile lui Navier-Stokes, ecuația de continuitate, dispersia bidimensională a poluanților, câmpul de viteze, câmpul de concentrații.

1. INTRODUCERE

În majoritatea domeniilor mișcării fluidelor pentru a modela diferite procese sunt folosite ecuațiile Navier-Stokes [1,2,3]. Aceste ecuații sunt fundamentale în hidrodinamică și permit elaborarea unui model matematic excelent pentru curgerea laminară și turbulentă. La baza acestor ecuații se află a doua lege a lui Newton, aplicată la mișcarea fluidelor, împreună cu ipoteza că tensiunea fluidului este proporțională cu gradientul vitezei, la care se adaugă gradientul presiunii [2]. O soluție a ecuațiilor Navier-Stokes este câmpul de viteze. Fiind cunoscut câmpul de viteze, se poate calcula evoluția câmpului de concentrații.

În acest articol se propune modelarea matematică a curgerii apei și determinarea dispersiei bidimensionale a poluanților cu ajutorul pachetului de programe *Surface-water Modeling System (SMS)*, care calculează o soluție a sistemului de ecuații Navier-Stokes sub forma Reynolds.

2. SPECTRUL HIDRODINAMIC ÎN RÎURI

Mișcarea fluidelor poate fi descrisă cantitativ prin expresii matematice, care au la bază 3 dintre legile fizice fundamentale: legea conservării masei, cu ajutorul căreia obținem ecuația de continuitate, legea a doua a lui Newton, cu ajutorul căreia obținem ecuația de echilibru dinamic, care poartă numele de ecuația lui Navier-Stokes, și legea conservării și transformării energiei, din care obținem ecuația bilanțului de energie [1].

Transformările care au loc într-un sistem acvifer pot fi descrise cu ajutorul sistemului de ecuații, care este compus din ecuațiile de mișcare a lichidelor incompresibile ale lui Navier-Stokes, împreună cu ecuația de continuitate, forma vectorială a căreia este următoarea:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = -(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} + \nu \Delta \vec{v} - \frac{1}{\rho} \nabla p + \vec{f} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (2)$$

unde ∇ - operatorul Hamilton, Δ - operatorul Laplace, t - timpul, ν - coeficientul de viscozitate, ρ - densitatea, p - presiunea, $\vec{v} = (v^1, \dots, v^n)$ - câmpul vectorial de viteze, \vec{f} - câmpul vectorial al forțelor de masă.

Mișcarea apei în râuri este un fenomen complex, asupra cărora influențează un număr mare de parametri. Pentru a caracteriza acest fenomen este necesară cunoașterea distribuției vitezelor, presiunii și temperaturii în masa de apă. Parametrii enumerați depind de forma și dimensiunile spațiului de curgere, debitul apei, câmpul de forțe care acționează asupra apei. Traectoria particulelor apei este neregulată, iar vitezele locale ale particulelor variază în orice moment în direcție și valoare. Liniile de curent se intersectează. Curgerea cu proprietățile enumerate se numește turbulentă. Existența și caracteristicile regimului de curgere turbulent al fluidelor au fost stabilite pe baza experimentelor fizicianului O. Reynolds, care a propus că la sistemul de ecuații al lui Navier-Stokes să fie adăugați termenii suplimentari care reprezintă tensiuni unitare suplimentare datorate turbulenței [2]. Sistemul de ecuații al lui Navier-Stokes sub forma Reynolds (3) și (4) împreună cu ecuația de continuitate (5) descriu complet dinamica apei în râuri în regim turbulent. Acest sistem a fost folosit pentru modelarea curgerii apei pe un sector al râului Prut studiat:

$$h \frac{\partial u}{\partial t} + hu \frac{\partial u}{\partial x} + hv \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{h}{\rho} \left(E_{xx} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + E_{xy} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + gh \left(\frac{\partial H}{\partial x} + \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{g u n^2}{(h^{1/6})^2} \times (u^2 + v^2)^{1/2} - \zeta V_a^2 \sin \psi + 2h \omega v \sin \phi = 0 \quad (3)$$

$$h \frac{\partial v}{\partial t} + hu \frac{\partial v}{\partial x} + hv \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{h}{\rho} \left(E_{yx} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + E_{yy} \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + gh \left(\frac{\partial H}{\partial y} + \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{g v n^2}{(h^{1/6})^2} \times (u^2 + v^2)^{1/2} - \zeta V_a^2 \sin \omega + 2h \omega u \sin \phi = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} + h \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + u \frac{\partial h}{\partial x} + v \frac{\partial h}{\partial y} = 0 \quad (5)$$

unde:

h - adâncimea apei (m);
 u - viteza locală în direcția x (m/s);
 v - viteza locală în direcția y (m/s);
 t - timpul (s);
 ρ - densitatea apei (kg/m^3);
 E - coeficientul de viscozitate turbulentă (Pa.s sau $\text{kg/m}^2\text{s}$);
 g - accelerația gravitațională (m/s^2);
 H - cota geodezică a patului albiei (m);
 n - coeficientul Manning al rugozității;
 ζ - coeficientul empiric referitor la frecarea cu aerul;
 V_a - viteza vântului (m/s);
 ψ - direcția vântului;
 ω - viteza unghiulară de rotație a Pământului (rad/s);
 φ - latitudinea locului. [7].

Datorită complexității fenomenului descris rezolvarea analitică a problemelor de curgere turbulentă este foarte complicată. Pentru determinarea soluțiilor se apelează la îmbinarea metodelor teoretice cu determinările experimentale.

3. FENOMENUL DE DISPERSIE A POLUANȚILOR

Fenomenul datorită căruia apare mișcarea și împrăștierea poluantului poartă numele de *dispersie*. Mecanismul dispersiei este complicat. Dispersia este rezultatul acțiunii simultane a unui fenomen de difuzie moleculară a substanței poluante cu un fenomen de convecție - advecție, datorat existenței unui câmp de viteze în domeniul în care are loc poluarea. Concentrația poluantului în apă este influențată de natura mediului poros, de regimul de curgere (prin câmpul vitezelor) și de natura poluantului [4].

Pentru a calcula câmpul de concentrații, s-a considerat un model matematic bidimensional, bazat pe ecuația fundamentală de advecție-dispersie (ADE). ADE este o ecuație cu derivate parțiale obținută prin aplicarea bilanțului de masă la o unitate de volum de masă din râu [5]. Modelul de dispersie a poluanților elaborat în cadrul acestei lucrări se bazează pe forma bidimensională a ADE, aplicată la curgerea în regim turbulent [5,8]:

$$h \left(\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} D_x \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} D_y \frac{\partial c}{\partial y} - \sigma + kc + \frac{R(c)}{h} \right) = 0 \quad (6)$$

unde:

h - este adâncimea apei (m);
 c - concentrația de poluant (mg/l);
 t - timpul (s);
 u - viteza în direcția x (m/s);
 v - viteza în direcția y (m/s);
 D_x - coeficientul de difuzie turbulentă în direcția x (m^2/s);
 D_y - coeficientul de difuzie turbulentă în direcția y (m^2/s);

k - constanta de degradare (s^{-1});
 σ - termenul sursă locală de poluant (unitatea de măsură a concentrației/s);
 $R(c)$ - precipitații/evaporație (unitatea de măsură a concentrației \times m/s).
 I-ul termen al ecuației reprezintă variația locală a concentrației;
 al II-lea - termen advection în direcția x ;
 al III-lea - termen advection în direcția y ;
 al IV - lea - termen de dispersie în direcția x ;
 al V-lea - termen de dispersie în direcția y ;
 al VI - lea - sursa locală de poluant;
 al VII - lea modelează degradarea exponențială a poluantului;
 al VIII - lea ia în considerație efectul precipitațiilor/evaporației [8].

Coeficienții de difuzie turbulentă pot fi măsurați experimental, dar din cauza că secțiunea transversală a fluxului este rareori de adâncime uniformă, această măsurare adesea este complicată. Deseori coeficienții sunt determinați prin intermediul formulelor empirice[5]:

$$D_x = 5,93hu_* \quad (7)$$

unde h este adâncimea apei,

$$u_* = \sqrt{\frac{\tau_0}{\rho}} \quad \text{- viteza de frecare} \quad (8)$$

τ_0 - efortul tangențial mediu la perete;

ρ - densitatea apei.

$$D_y = \alpha hu_* \quad (9)$$

unde α - un coeficient (după Fischer, 1979, $\alpha = 0,6$; după Elder, 1959, $\alpha = 0,2$) [5].

4. PARTEA EXPERIMENTALĂ

Modelele numerice au fost elaborate cu ajutorul programului *Surface-water Modeling System (SMS)* v.10.1.11, care a fost conceput de specialiști din USA ai companiei *Aquaveo*. SMS este un pachet de programe pentru gestionarea eficientă a întregului proces de modelare a apelor de suprafață: de la importul de date topografice și hidrodinamice pînă la vizualizarea și analiza soluțiilor. Acesta conține o gamă largă de modele numerice pentru aplicații care includ hidrodinamica râurilor, inundațiile din mediul rural și urban, modelarea valurilor, urmărirea dinamicii și proprietăților fizice a particulelor apei, determinarea și analiza dispersiei poluanților [6].

În lucrarea dată calculul dispersiei poluanților a fost realizat în două etape. La prima etapă a fost generat modelul numeric al curgerii apei în zona modelată prin intermediul unui modul din SMS sub denumirea RMA2.

La etapa a doua la hidrodinamica rezultată din RMA2 a fost aplicat modulul RMA4 cu ajutorul căruia s-a determinat evoluția câmpului de concentrații.

4.1 PRELEVAREA ȘI ANALIZAREA PROBELOR

În vederea elaborării modelului matematic s-a lucrat cu probele determinate în laborator, care au fost prelevate în luna iulie 2011 din 3 puncte ale sectorului de râu analizat (tabelul 1).

TABELUL 1. REZULTATELE ANALIZELOR LA PROBELE PRELEVATE

Indicatorul	Concentrația (mg/l)
Produse petroliere	0.07
Nitriți N - NO ₂	0.022
Produse petroliere	0.013
Nitriți N - NO ₂	0.024
Produse petroliere	0.06
Nitriți N - NO ₂	0.027

4.2 DEFINIREA GEOMETRIEI DOMENIULUI MODELAT

De pe site-ul www.wikimapia.org a fost importată în SMS imaginea digitală a râului Prut din localitatea Costeşti în vederea modelării curgerii apei și a dispersiei poluanților. Imaginea a fost digitizată direct în SMS prin crearea manuală a obiectelor cu parametri, cum ar fi: puncte, arce și poligoane. Pe fiecare arc au fost create segmente egale prin redistribuirea punctelor la o distanță egală. Pentru a defini zonele specifice de material din arcele create au fost construite poligoane (figura 1).

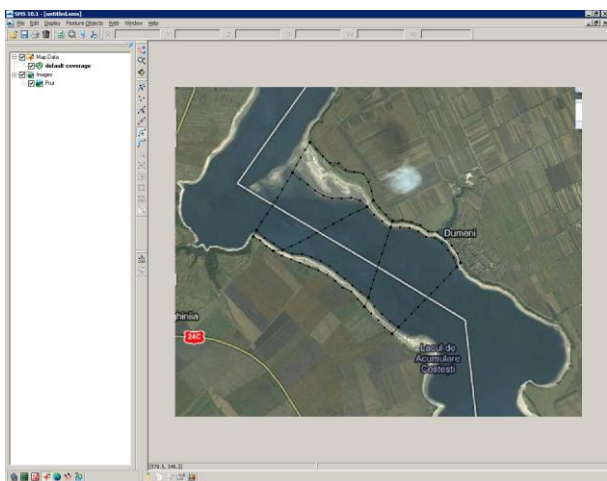


Fig 1. Reprezentarea geometriei domeniului în 2D

Au fost determinate 3 zone specifice: râul, malul stîng și malul drept. Din obiectele geometrice create a fost generată o rețea de elemente finite, care formează un strat de acoperire (figura 2).

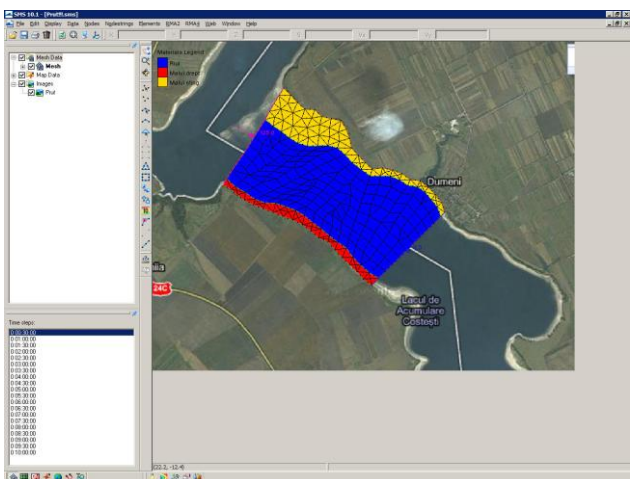


Fig.2. Profil 2D obținut în SMS
4.3. MODELAREA MATEMATICĂ A HIDRODINAMICII

Modelul matematic numeric al curgerii apei a fost elaborat cu ajutorul programului RMA2. Utilizînd acest modul, se pot rezolva probleme de dinamică și statică: calculul nivelurilor apei și a distribuției vitezelor în jurul unor insule, curgerea pe sectoare de râu cu zone umede, niveluri și spectre hidrodinamice ale mișcării în râuri, lacuri, delte, estuare etc. Este un model bidimensional în plan orizontal [7].

Programul RMA2 folosește sistemul de ecuații al lui Navier-Stokes sub forma Reynolds după coordonatele carteziene x și y (3, 4) împreună cu ecuația de continuitate (5) pentru fluide incompresibile în mișcare turbulentă cu suprafață liberă. Pentru a rezolva sistemul de ecuații a fost utilizată metoda elementelor finite. Funcțiile de interpolare sunt pătratice pentru viteze și liniare pentru adâncimi [7].

Valorile pentru coeficienții de frecare și de difuzie turbulentă se atribuie automat. Efectele turbulenței se iau în calcul prin utilizarea coeficienților de viscozitate turbulentă, ce reprezintă și un mijloc de asigurare a stabilității numerice a soluției.

Programul realizează modelul matematic al mișcării apei – determină câmpul de viteze locale mediate pe verticală u și v , precum și adâncimea h .

În vederea simulării numerice a curgerii apei în zona studiată s-au abordat 2 ipoteze de calcul.

Pentru **prima ipoteză** au fost stabilite următoarele condiții la limită: debit $Q = 135 \text{ m}^3/\text{s}$ și nivel $H = 3 \text{ m}$.

Pentru **a doua ipoteză**: condițiile la limită – debit $Q = 134 \text{ m}^3/\text{s}$ și nivel $H = 3 \text{ m}$.

Pentru modelare au fost folosite:

- simulări pe secțiunea reală a râului de lungime 2.4 km și lățime 1,2 km;
- densitatea constantă a apei (1.000 kg/m³);
- numărul Peclet egal cu 20. Valorile recomandate pentru Pe sunt cuprinse între 15 – 40;
- coeficienții de viscozitate turbulentă. Se calculează automat utilizînd numărul Peclet:

$$Pe = \frac{\rho U dx}{E}, \tag{10}$$

unde :

U - viteza rezultantă medie:

$$U = \sqrt{u^2 + v^2} \tag{11}$$

dx – element de lungime în direcția fluxului.

Pentru fiecare ipoteză în toate elementele finite ale geometriei domeniului s-au determinat adâncimile h și vitezele locale în direcțiile x și y (inclusiv viteza rezultantă U). În figurile 3, 4, 5 și 6 sunt prezentate datele corespunzătoare ipotezei 1.

Din figura 3 observăm o scară reprezentată prin diferite culori, care indică valorile adâncimii punctelor finite în sectorul de râu studiat. Aceste valori variază de la 2.998 m pînă la 3.0079 m. La mijlocul sectorului studiat adâncimea este de 3.0024 m.

Analizînd datele din figurile 4 și 5 s-a constatat că viteza particulelor apei în direcția x este mai mare decît în direcția y .

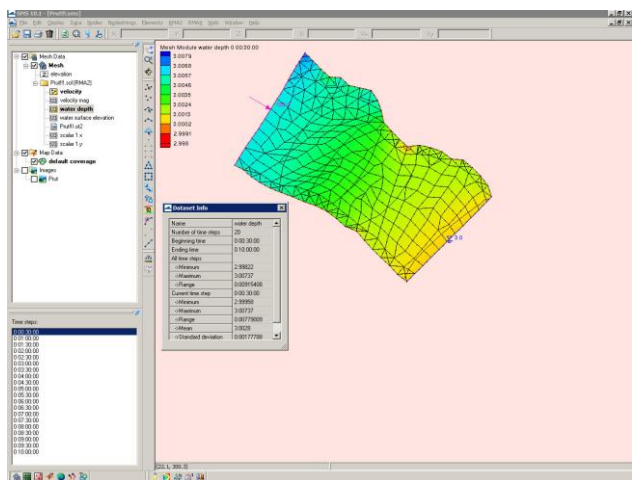


Fig 3. Variația adâncimilor pe sectorul studiat

Fig 5. Câmpul vitezelor locale în direcția y
Câmpul vitezelor rezultante este prezentat în figura 6.

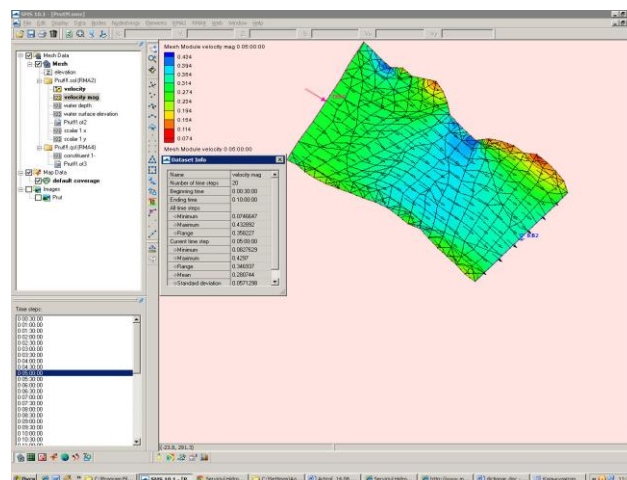


Fig 6. Distribuția vectorilor vitezelor rezultante

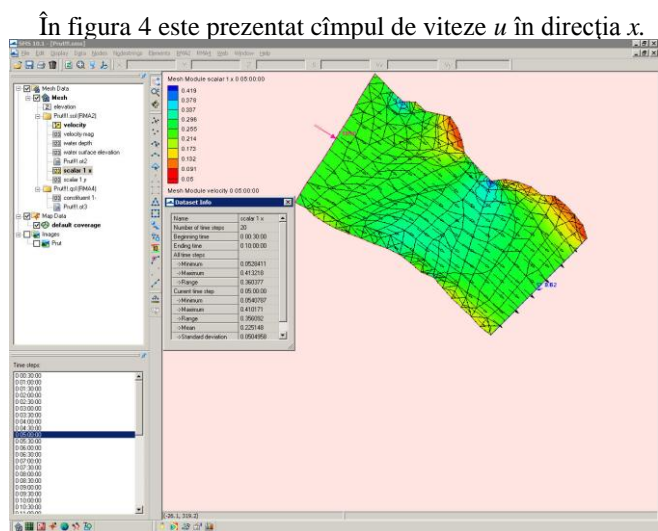
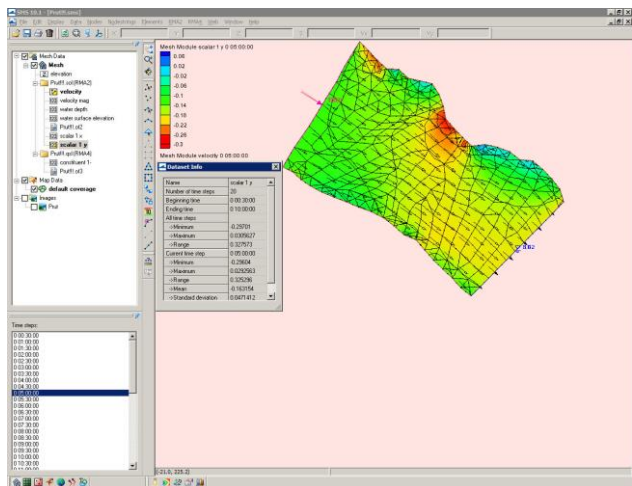


Fig 4. Câmpul vitezelor locale în direcția x

În figura 5 este prezentat câmpul de viteze v în direcția y.



Mărimile caracteristice ale curgerii apei în zona modelată determinate cu RMA2 sunt prezentate în tabelul 2.

TABELUL 2. MĂRIMI CARACTERISTICE ALE CURGERII APEI ÎN ZONA MODELĂTĂ

Ipoieza	U_{min} (m/s)	U_{max} (m/s)	h_{min} (m)	h_{max} (m)
1	0,074	0,434	2,998	3,0079
2	0,083	0,505	2,993	3,0123

4.4. MODELAREA MATEMATICĂ A DISPERSIEI POLUANȚILOR CU PROGRAMUL RMA4

Modelul calității apei, RMA4, este un modul din SMS, care folosește hidrodinamica rezultată din RMA2. Este conceput pentru simularea numerică a proceselor de advecție – difuzie la o adâncime medie într-un sistem acvatic [8].

Acesta calculează o soluție a ecuației (6) cu ajutorul metodei elementelor finite. Influența turbulenței în câmpul convectiv este reflectată prin folosirea coeficienților de difuzie turbulentă în direcțiile x și y, precizarea cărora din datele măsurate este adesea dificilă. În RMA4 pentru determinarea acestor coeficienți se folosesc două metode: directă, prin care fiecare element primește valorile respective ale acestor coeficienți, sau automată, utilizând numărul lui Peclet, care este dat de formula:

$$Pe = \frac{Udx}{D}, \quad (12)$$

unde:

- U - viteza rezultantă medie;
- dx – elementul de lungime în direcția fluxului;
- D - coeficientul de difuzie turbulentă.

Condițiile la limită pot fi specificate în mai multe moduri: concentrația poate fi specificată de-a lungul unei linii de frontieră, indiferent de direcția de curgere sau în nodurile de frontieră.

Au fost analizați 2 indicatori chimici: produse petroliere și nitriți N - NO₂.

În tabelul 3 sunt prezentate valorile dispersivității și valorile concentrației ale indicatorilor chimici analizați pentru ambele ipoteze.

TABELUL 3. VALORILE DISPERSIVITĂȚII ȘI ALE CONCENTRAȚIEI

	Valori ale dispersivității	Concentrația produselor petroliere (mg/l)	Concentrația N - NO ₂ (mg/l)
Ipoteza 1	$D_x = 0,063$	0,07	0,022
	$D_y = 0,009$		
Ipoteza 2	$D_x = 0,048$	0,07	0,022
	$D_y = 0,034$		

Analiza transportului de poluant în apă a fost efectuată în regim nepermanent, ceea ce permite estimarea evoluției poluantului la diferite intervale de timp.

Ca un exemplu de simulare numerică, pentru datele corespunzătoare ipotezei 1 în figurile 7,8 și 9 este prezentată dispersia poluantului pe tot sectorul studiat în diferite intervale de timp după confluența cu apa. Pe frontiera de intrare a poluantului a fost introdusă o sursă constantă $C = 0,07$ mg/l. Simularea numerică a fost efectuată pentru 8 ore, timp considerat suficient pentru stabilirea unui regim permanent.

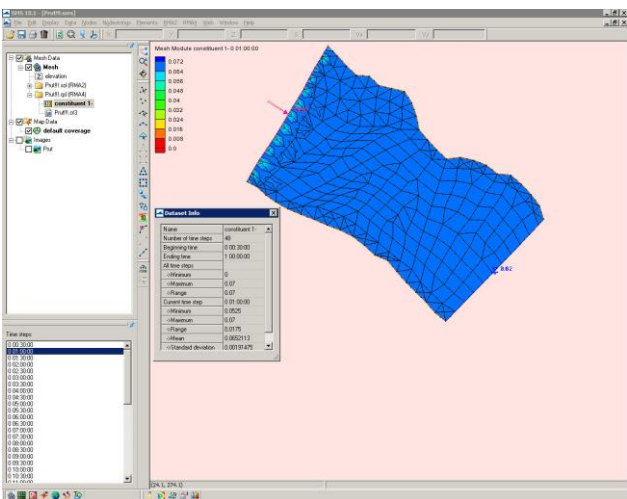


Fig.7. Dispersia poluantului după 1oră

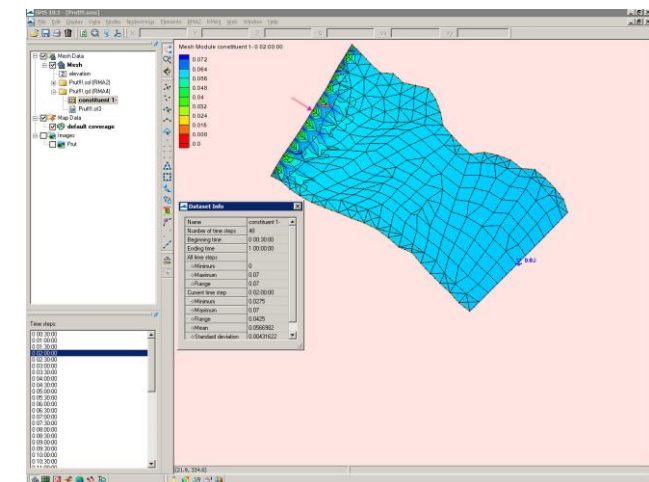


Fig.8. Distribuția câmpului de concentrații a poluantului după 2 ore

După 2 ore concentrația poluantului s-a micșorat, distribuindu-se uniform pe majoritatea sectoarelor domeniului studiat.

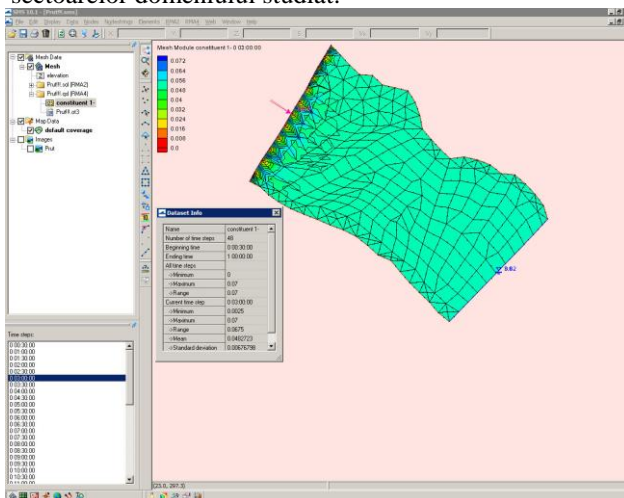


Fig.9. Distribuția câmpului de concentrații a poluantului după 3 ore

Din datele prezentate se observă că după 3 ore concentrația poluantului în zona de confluență și pe tot sectorul studiat s-a redus substanțial.

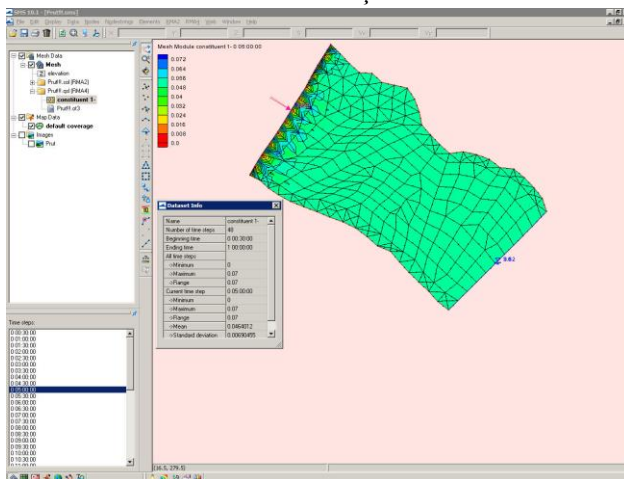


Fig.10. Distribuția câmpului de concentrații a poluantului după 5 ore

Din calcule s-a constatat că după 5 ore transportul de poluant a devenit staționar.

Variația în timp a dispersiei produselor petroliere în zona de confluență este prezentată în figura 11.

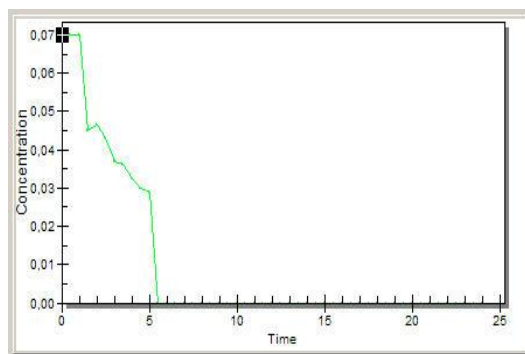


Fig.11. Dispersia produselor petroliere în zona de confluență

În figura 12 este prezentată variația în timp a dispersiei nitriților N - NO₂ în zona de confluență.

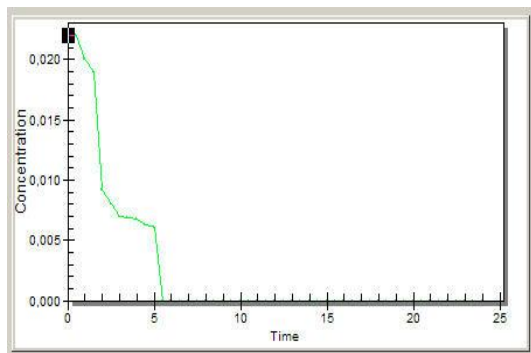


Fig.12. Dispersia nitriților în zona de confluență

Evoluția spațială și temporală a dispersiei poluanților analizați față de zona de confluență este prezentată în figurile 13 și 14.

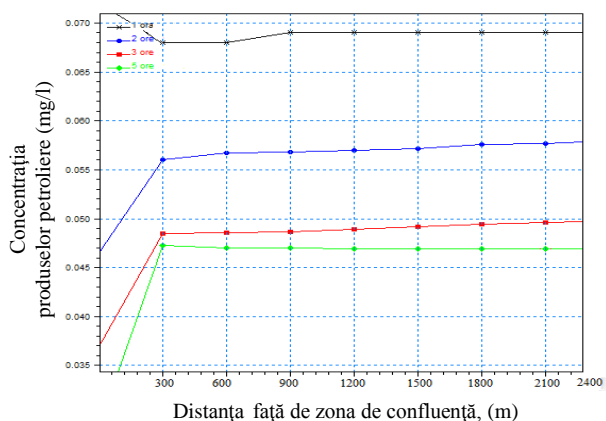


Fig.13. Dispersia produselor petroliere față de zona de confluență, (m)

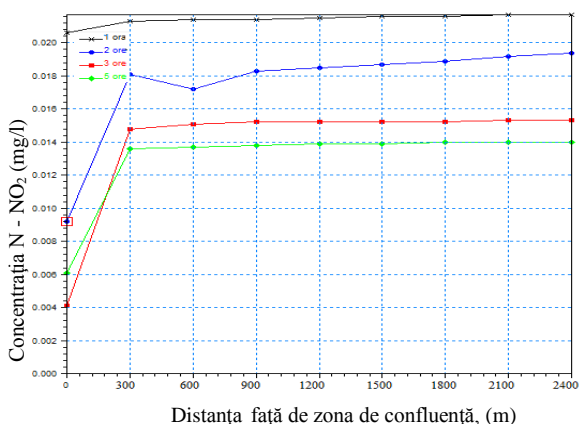


Fig.14. Dispersia N - NO₂ față de zona de confluență, (m)

Conform caracteristicilor prezentate se constată că după 5 ore din momentul confluenței cu apa dispersia

produselor petroliere devine constantă, iar dispersia nitriților N - NO₂ devine staționară după 3 ore.

Variația concentrației poluanților este cea mai înaltă pînă la distanța de 300 de metri față de zona de confluență. La distanțe mai mari decît 300 de metri variația nu este semnificativă.

5. CONCLUZII

A fost elaborat modelul conceptual al problemei, compus din atributele geometrice ale domeniului studiat, forțele care acționează în domeniu și caracteristicile fizice. Din modelul conceptual au fost generate 2 modele numerice.

Simularea numerică a fost efectuată în regim dinamic, ceea ce permite analiza evoluției cîmpului de viteze și cîmpului de concentrații la diferite intervale de timp. Rezultatele simulării numerice sunt utile pentru evaluarea evoluției calității apei rîului Prut.

Modelul numeric realizat la prima etapă determină complet hidrodinamica sectorului de rîu studiat. Folosind cîmpul de viteze, precum și adîncimile pentru fiecare element finit din rețeaua creată, calculate cu ajutorul modulului RMA2, se determină dispersia poluantului pe tot sectorul de rîu analizat.

Prin analiza cîmpului de concentrații a poluantului putem urmări variația concentrației poluantului în timp și spațiu, în orice element finit în sectorul de rîu studiat (nu numai în cele de efectuare a prelevărilor de probe). Acest lucru va permite prognozarea mai precisă a evoluției calității apei.

Folosind metodele și procedurile utilizate pentru sectorul modelat, se poate genera oricînd un alt model matematic pentru analiza oricărui sector al rîului.

Cunoașterea procesului de dispersie a diferitor poluanți va ajuta la găsirea unor soluții inovative ecologice de epurare.

REFERINȚE BIBLIOGRAFICE

- [1] Gavrilă L., *Fenomene de transfer*. Vol.I, 2000, ISBN 973 – 99487 – 6 – 6.
- [2] Florescu Iu., *Mecanica fluidelor*, Editura Universității Bacău, 2007.
- [3] Charles L.Fefferman, *Existence & smoothness of the Navier-Stokes equation*, Princeton University, Department of Mathematics, Princeton, NJ 08544-1000.
- [4] Marinov, A.M., *Dispersia poluantilor in apele subterane*, Editura PRINTECH, 2005.
- [5] Socolofsky S.A. and Jirka G.H., *Special Topics in Mixing and Transport Processes in the Environment* (5th Ed.), A&M University, College Station, Texas, 2005.
- [6] *** „SMS Tutorials”, SMS v.10.1.11, AquaVeo, 2011
- [7] *** „Surface Water Modeling System - RMA2”, US Army Engineer Research and Development Center.

- [8] *** „*Surface Water Modeling System - RMA4*”,
US Army Engineer Research and Development
Center.