



<http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2021-19-3-66-74>

Оригинальная статья
Original paper

УДК 004.94: 004.9.032.26

ВЕРИФИКАЦИЯ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ, РАЗРАБОТАННЫХ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ МИГРАЦИИ РАДИОНУКЛИДОВ В ПРИРОДНЫХ ДИСПЕРСНЫХ СРЕДАХ

П.К. ШАЛЬКЕВИЧ¹, С.П. КУНДАС

¹Международный государственный экологический институт имени А.Д. Сахарова
Белорусского государственного университета (г. Минск, Республика Беларусь)

Поступила в редакцию 3 марта 2021

© Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 2021

Аннотация. Возможность моделирования вертикальной миграции радионуклидов успешно реализована в первых версиях программного комплекса (ПК) SPS (Simulation of Processes in Soil) и основывается на численном решении математической модели взаимосвязанного тепло-влажноперевода в одномерной постановке. Однако для решения задачи комплексной оценки состояния биосферы в условиях ее радиационного загрязнения и лучшего приближения результатов моделирования к реальным процессам был разработан ПК SPS v2.0, в одном из программных модулей которого авторами реализована новая математическая модель, описывающая пространственную миграцию радионуклидов в почве (3D-модель). Численное решение этой математической модели основано на применении метода конечных элементов (МКЭ) и выполнении аналитической аппроксимации коэффициентов теплопроводности и давления жидкости, что обеспечивает возможность применения при моделировании технологий параллельных вычислений. Математическая модель, используемая в ПК SPS v2.0, а также численные методы ее решения требуют верификации, которая и проводится в представленной статье. Верификация разработанных численных методов проводилась с использованием математического ПК Comsol Multiphysics и программного модуля в составе ПК SPS v2.0 с последующим сравнением результатов расчетов. Различие в результатах расчетов, полученных с помощью перечисленных программных средств, составляет менее 5 %. Следовательно, численные методы программно реализованы корректно и обладают точностью решения, сравнимой с численными методами, применяемыми в современных программных пакетах для математического моделирования. Проведена также экспериментальная верификация математической модели, для которой использовались результаты экспериментальных измерений метеорологических условий, распределения влаги и температуры в почве. Эти данные сравнивались с результатами моделирования, полученными в ПК SPS v2.0. Установлено, что погрешность расчета анализируемых параметров не превышает 5 %, что позволяет применять разработанную модель для решения практических задач в рассматриваемой предметной области.

Ключевые слова: математическое моделирование, миграция радионуклидов, численные методы, метод конечных элементов, верификация.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Для цитирования. Шалькевич П.К., Кундас С.П. Верификация численных методов и математической модели, разработанных для моделирования миграции радионуклидов в природных дисперсных средах. Доклады БГУИР. 2021; 19(3): 66-74.

VERIFICATION OF NUMERICAL METHODS AND MATHEMATICAL MODEL DEVELOPED FOR SIMULATION OF RADIONUCLIDES MIGRATION IN NATURAL DISPERSE ENVIRONMENTS

PAVEL K. SHALKEVICH¹, SEMJON P. KUNDAS

¹*International Sakharov Environmental Institute of Belarusian State University (Minsk, Belarus)*

Submitted 3 March 2021

© Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 2021

Abstract. Simulation of radionuclides vertical migration was successfully implemented in the first versions of SPS (Simulation of Processes in Soil) software and was based on a numerical solution of the mathematical model of interconnected heat and moisture transfer in one dimension. But in order to solve problems of a comprehensive assessment of the state of the biosphere under radionuclides pollution and better approximation of simulation results to real processes, authors developed SPS v2.0 software. One of the modules of SPS v2.0 uses new mathematical model that describes the spatial migration of radionuclides in soil (3D-model). The numerical solution of this mathematical model is based on the application of the finite element method and the analytical approximation of thermal conductivity and liquid pressure coefficients. Such approach makes possible to use parallel computing technologies for simulation. The mathematical model used in SPS v2.0, as well as numerical methods for solving it, require verification, which is carried out in this article. Verification of the developed numerical methods was carried out using Comsol Multiphysics software and SPS v2.0 module with the following comparison of the calculation results. The difference in the calculation results obtained using the listed software is less than 5 %, therefore, the numerical methods are correctly implemented in SPS v2.0 and have a solution accuracy comparable to the numerical methods used in modern software. For the mathematical model verification were used the results of experimental measurements of meteorological conditions, distribution of moisture and temperature in soil, which were compared with the simulation results obtained in SPS v2.0. The comparison shows that the error in the calculation of the analyzed parameters does not exceed 5 %, which allows the developed model to be used for solvation of practical problems in the subject area.

Keywords: mathematical modeling, radionuclide migration, numerical methods, finite element method, heat and moisture transfer.

Conflict of interests. The authors declare no conflict of interests.

For citation. Shalkevich P.K., Kundas S.P. Verification of numerical methods and mathematical model developed for simulation of radionuclides migration in natural disperse environments. Doklady BGUIR. 2021; 19(3): 66-74.

Введение

Программный комплекс (ПК) SPS (Simulation of Processes in Soil) [1] был разработан для моделирования миграции радионуклидов в природных дисперсных средах. В первых версиях ПК SPS была возможность моделирования только вертикальной миграции радионуклидов в почве, которая реализовывалась путем численного решения в одномерной постановке математической модели, предложенной в [1], представляющей собой систему уравнений переноса тепла и влагопереноса, решаемую относительно температуры и давления жидкости, и систему уравнений конвективной диффузии и кинетики сорбции.

Однако для приближения результатов моделирования к реальным процессам [2] и с целью решения задачи комплексной оценки состояния биосферы [3] авторами был разработан ПК SPS v2.0, в одном из программных модулей которого реализована математическая модель, описывающая процесс распространения тепла, влаги и растворимых в ней загрязняющих веществ в природных дисперсных средах, разработанная для моделирования пространственной миграции радионуклидов в почве [3]. Численное решение этой математической модели основано на применении метода конечных элементов (МКЭ), который

позволяет выполнить аналитическую аппроксимацию коэффициентов теплопроводности и давления жидкости, что, в свою очередь, обеспечивает возможность применения при моделировании технологий параллельных вычислений [2]. Верификации примененных численных методов, а также самой математической модели и посвящена представленная статья.

Верификация численных методов, примененных для компьютерной реализации разработанной математической модели

Отличительной особенностью предложенного авторами метода численного решения задачи переноса влаги и растворимых в ней веществ в природных дисперсных средах является применение аналитической аппроксимации коэффициентов теплопроводности и давления жидкости в трехмерной постановке на основе МКЭ [2, 3] с предварительным расщеплением общей задачи миграции загрязняющих веществ на физические процессы.

Таким образом, учитывая, что целесообразность и перспективность применения МКЭ для численного решения уравнений взаимосвязанного тепловлагопереноса не вызывает сомнений [1, 4–6], была проведена верификация применяемых численных методов для решения системы уравнений конвективной диффузии и кинетики сорбции путем решения системы дифференциальных уравнений [3, 7, 8]:

$$\begin{cases} C \frac{\partial \theta_{liq}}{\partial t} = \nabla \cdot (\theta_{liq} \mathbf{D} \nabla C - \mathbf{u} C) - \theta_{liq} \lambda C - \rho_b \frac{\partial a}{\partial t}, \\ \rho_b \frac{\partial a}{\partial t} = \rho_b \beta (K_d C - a) \end{cases}, \quad (1)$$

где C – концентрация вещества в растворе, $\text{кг}/\text{м}^3$; θ_{liq} – объемное влагосодержание, $\text{м}^3/\text{м}^3$; \mathbf{D} – тензор гидродинамической дисперсии, $\text{м}^2/\text{с}$; t – время, с ; \mathbf{u} – вектор скорости переноса вещества в почве потоком жидкости, $\text{м}/\text{с}$; λ – постоянная распада, определяющая изменение концентрации за счет радиоактивного распада: $\partial C/\partial t$; ρ_b – плотность твердой фазы, $\text{кг}/\text{м}^3$; a – концентрация вещества в адсорбированном состоянии, $\text{кг}/\text{м}^3$; β – скорость сорбции, с^{-1} ; K_d – коэффициент распределения между веществом, растворимым в жидкости, и твердой фазой, $\text{м}^3/\text{кг}$.

Верификация проводилась с использованием математического ПК COMSOL Multiphysics [5] и созданных программных средств (на базе SPS v2.0) и последующим сравнением результатов расчета. Для этого были построены две трехмерные области: область № 1, размеры которой $0,5 \times 0,5 \times 0,5$ м, и область № 2, размеры которой $1,5 \times 1,5 \times 1,0$ м. При этом область № 1 расположена внутри области № 2, соприкасаясь с ней пятью гранями (рис. 1). В области № 1 концентрация загрязняющего вещества в начальный момент времени ($t = 0$) задавалась равной 100 %, в области № 2 концентрация загрязняющего вещества в этот момент равнялась нулю. Тип почвы в областях № 1 и 2 одинаковый. Следовательно, распределение концентрации растворимых и адсорбированных веществ будет иметь следующий вид: для области № 1: $C(x, y, z, 0) = 1$, $a(x, y, z, 0) = K_d C$; для области № 2: $C(x, y, z, 0) = 0$, $a(x, y, z, 0) = K_d C$.

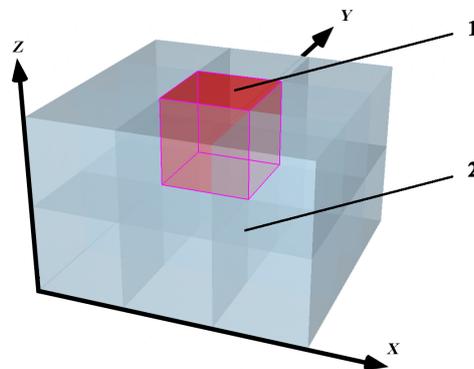


Рис. 1. Трехмерные области: 1 – область № 1, 2 – область № 2
Fig. 1. Three-dimensional areas: 1 – area № 1, 2 – area № 2

Граничные условия на поверхностях, разделяющих области № 1 и 2, определим следующим выражением [3]:

$$-(\theta_{liq} \mathbf{D} \nabla C - \mathbf{u} C) = 0. \quad (2)$$

Перенос растворимых веществ моделировался до момента времени $t = 365$ дней, при этом расчетная область разбивалась на ≈ 4000 конечных элементов, а параметры системы уравнений конвективной диффузии и кинетики сорбции (1) имели следующие значения: $\theta_{liq} = 0,4 \text{ м}^3/\text{м}^3$; $\mathbf{u} = 2 \cdot 10^{-8} \text{ м/с}$; $\mathbf{D} = 5 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$; $\tau = 0,7$; $a_x = 0,002 \text{ м}$; $\rho_b = 1200 \text{ кг/м}^3$; $K_d = 0,001 \text{ м}^3/\text{кг}$; $\beta = 10^{-6} \text{ с}^{-1}$ [3].

Результаты решения системы уравнений конвективной диффузии и кинетики сорбции показаны на рис. 2, 3.

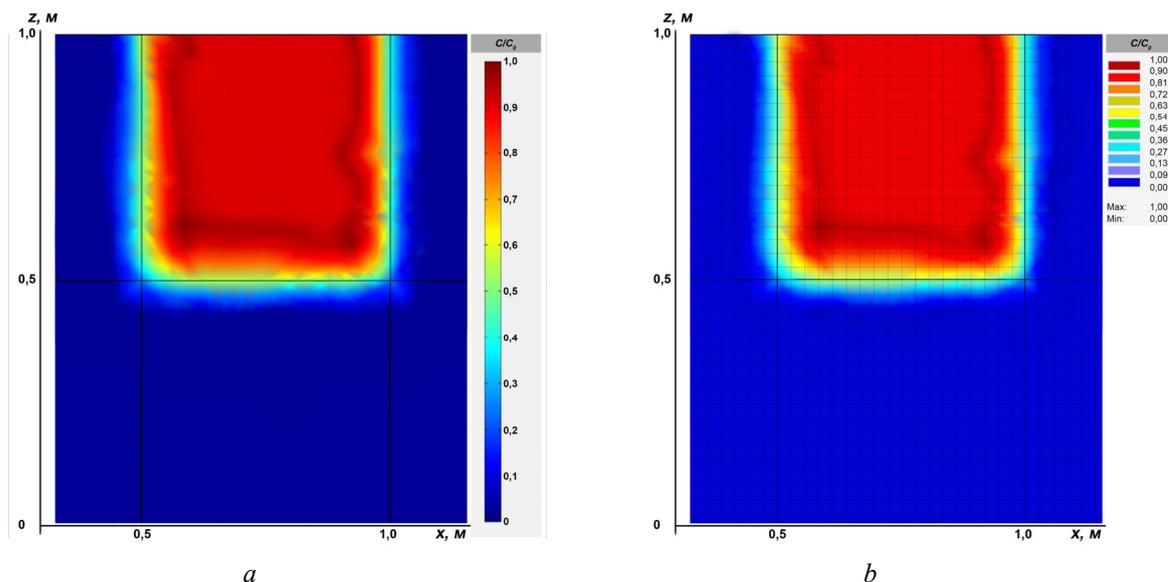


Рис. 2. Результаты моделирования переноса растворимых веществ в плоскости ZX:
a – полученные с помощью ПК COMSOL Multiphysics; *b* – полученные с помощью ПК SPS v2.0
Fig. 2. The results of modeling the migration of contaminants in the ZX plane:
a – obtained using COMSOL Multiphysics; *b* – obtained using SPS v2.0

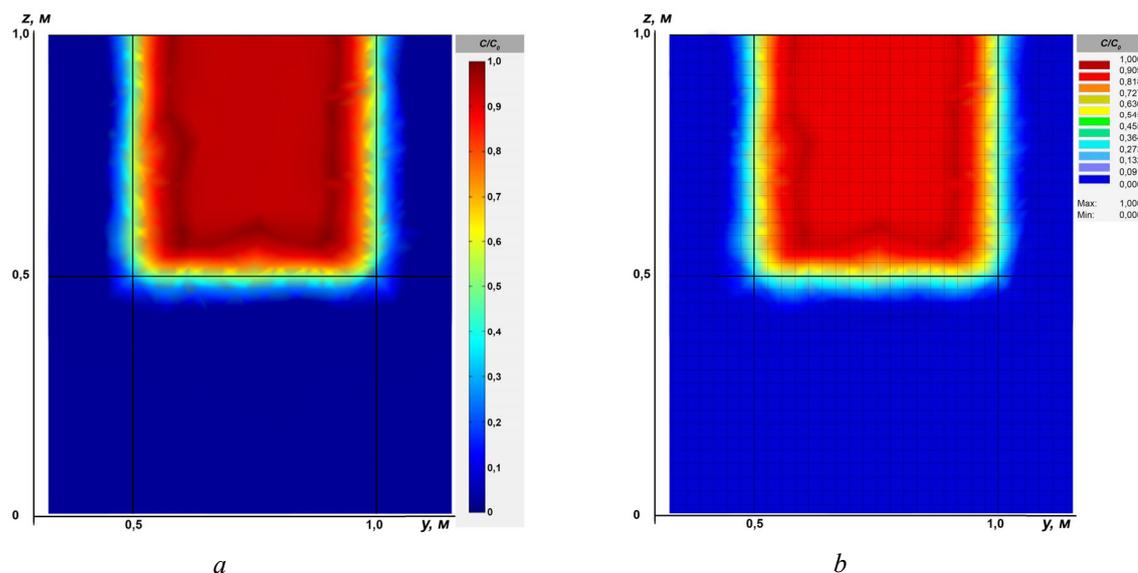


Рис. 3. Результаты моделирования переноса растворимых веществ в плоскости ZY:
a – полученные с помощью ПК COMSOL Multiphysics; *b* – полученные с помощью ПК SPS v2.0
Fig. 3. The results of modeling the migration of contaminants in the ZY plane:
a – obtained using COMSOL Multiphysics; *b* – obtained using SPS v2.0

Таким образом, был получен прогноз распределения концентрации загрязняющего вещества в заданных трехмерных областях. На рис. 4, 5 показано сравнение результатов, полученных с помощью разработанных программных средств и широко апробированного коммерческого программного пакета для моделирования COMSOL Multiphysics. Из указанного сравнения видно, что различие в результатах расчетов составляет менее 5 %.

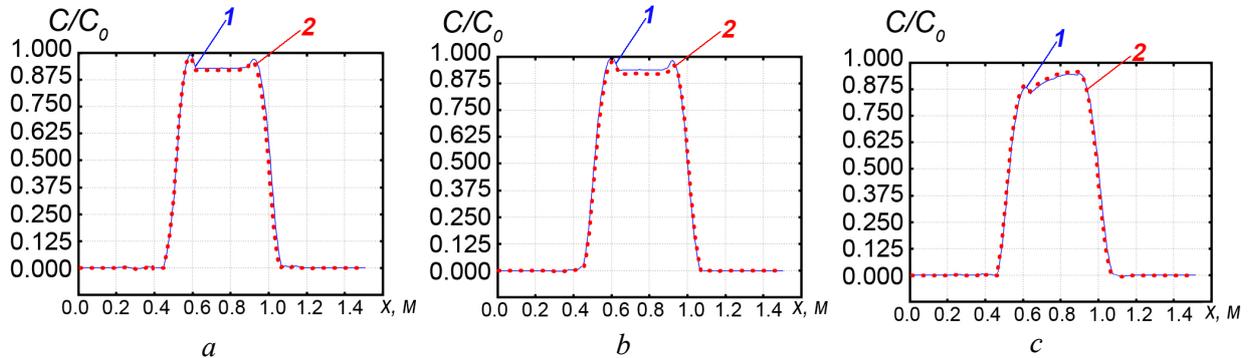


Рис. 4. Результаты расчетов распределения концентрации загрязняющего вещества, полученные с помощью ПК COMSOL Multiphysics (кривые 1) и ПК SPS v2.0 (кривые 2) в плоскости ZX:

a – при $z = 1,0$ м; *b* – при $z = 0,75$ м; *c* – при $z = 0,5$ м

Fig. 4. The results of calculating the contaminant concentration distribution obtained using COMSOL Multiphysics (curves 1) and SPS v2.0 (curves 2) in ZX plane:

a – when $z = 1,0$ m; *b* – when $z = 0,75$ m; *c* – when $z = 0,5$ m

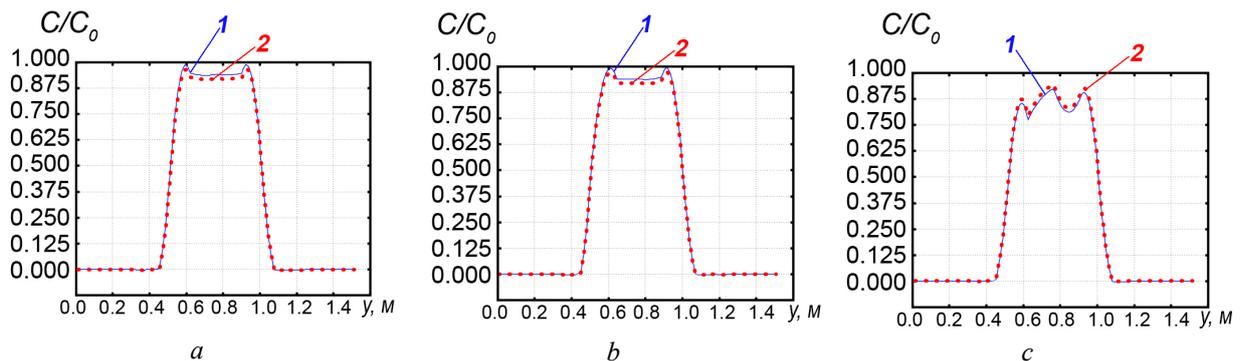


Рис. 5. Результаты расчетов распределения концентрации загрязняющего вещества, полученные с помощью ПК COMSOL Multiphysics (кривые 1) и ПК SPS v2.0 (кривые 2) в плоскости ZY:

a – при $z = 1,0$ м; *b* – при $z = 0,75$ м; *c* – при $z = 0,5$ м

Fig. 5. The results of calculating the contaminant concentration distribution obtained using COMSOL Multiphysics (curves 1) and SPS v2.0 (curves 2) in ZY plane:

a – when $z = 1,0$ m; *b* – when $z = 0,75$ m; *c* – when $z = 0,5$ m

Следовательно, используемые численные методы программно реализованы корректно и обладают точностью решения, сравнимой с численными методами, применяемыми в современных программных пакетах математического моделирования. Необходимо отметить, что на сегодняшний день [1] ПК COMSOL Multiphysics является наиболее эффективной программой для решения систем дифференциальных уравнений численными методами.

Верификация предложенной математической модели взаимосвязанного тепло-влажноперевода

Для проведения верификации математической модели взаимосвязанного тепло-влажноперевода [3] использовались результаты экспериментальных измерений метеорологических условий, распределения влаги и температуры в почве, приведенные в работе [9]. Необходимо также отметить, что согласно метеорологическим наблюдениям на 243 день выпадали дождевые осадки, интенсивностью 0,01 м в день.

Для проверки адекватности разработанной математической модели взаимосвязанного тепло-влажноперевода моделировалось изменение влагосодержания и температуры почвы в течение одиннадцати дней, для которых были известны климатические характеристики. При этом в качестве верхних граничных условий к уравнениям переноса тепла и влаги задавалось изменение температуры и относительной влажности воздуха. На нижней границе моделируемой области – равенство нулю потоков тепла и влаги. В начальный момент времени $t = 234$ день года по профилю почвы задавались распределения температур и влаги в соответствии с экспериментальными данными [9].

В результате моделирования получено изменение температуры и влагосодержания почвы на глубинах 0,01 и 0,02 м в течение одиннадцати дней, показанное на рис. 6, 7 (кривые 2). На рис. 6, 7 видно, что погрешность расчетов моделируемых параметров не превышает 5 %, что позволяет применять разработанную модель для решения практических задач в области охраны окружающей среды.

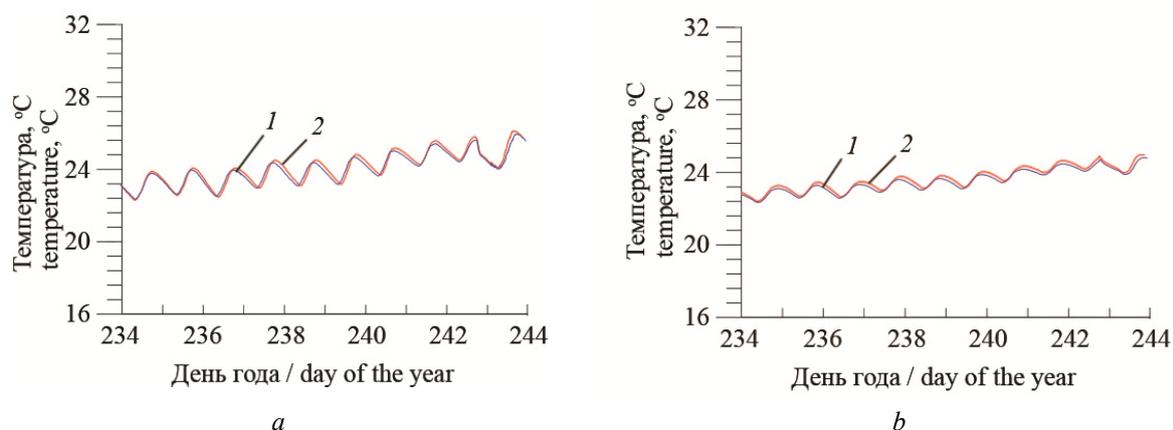


Рис. 6. Изменение температуры почвы в течение одиннадцати дней, измеренное экспериментально (кривые 1) и полученное с помощью предложенной математической модели (кривые 2):
 a – на глубине 0,01 м; b – на глубине 0,02 м

Fig. 6. Temperature change during eleven days, measured experimentally (curves 1) and obtained using the proposed mathematical model (curves 2): a – at a depth of 0,01 m; b – at a depth of 0,02 m

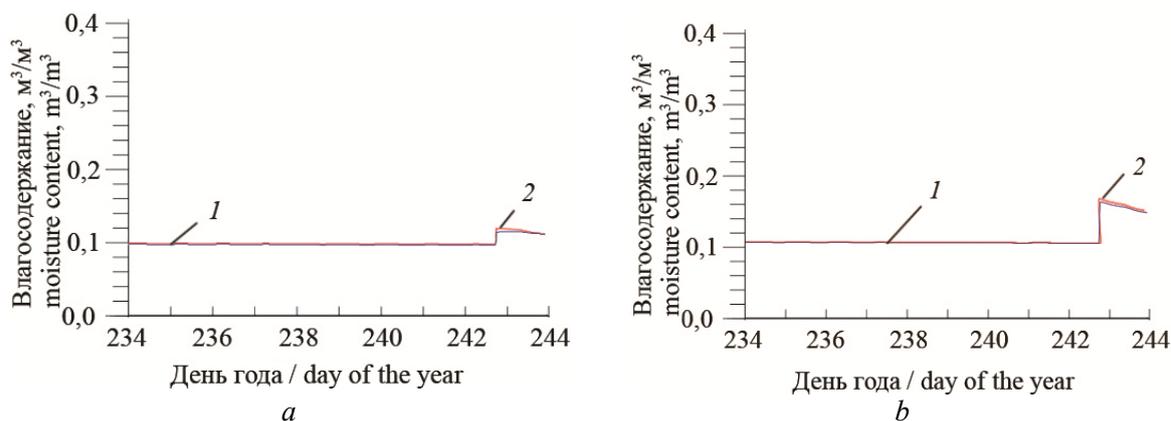


Рис. 7. Изменение объемного влагосодержания почвы в течение одиннадцати дней, измеренное экспериментально (кривые 1) и полученное с помощью предложенной математической модели (кривые 2): a – на глубине 0,01 м; b – на глубине 0,02 м

Fig. 7. Moisture content change during eleven days, measured experimentally (curves 1) and obtained using the proposed mathematical model (curves 2): a – at a depth of 0,01 m; b – at a depth of 0,02 m

Однако, учитывая то, что предложенная математическая модель позволяет решать задачи моделирования в трехмерной постановке с учетом соответствующих граничных условий, была также проведена ее верификация с использованием результатов экспериментальных измерений влагосодержания почвы в эксперименте, описанном в работе [10].

Указанный эксперимент (рис. 8) проводился в 2009 году и заключался в посеве урожая кукурузы с интервалом между рядами, равном 0,6 м, причем для каждого из двух рядов была установлена система орошения на глубине 0,35 м. Посев урожая осуществлялся в промежутке с 110 по 115 день года, а сбор урожая – в промежутке с 263 по 268 день года. Для проверки адекватности разработанной математической модели взаимосвязанного тепловлагоденоса [3] моделировалось изменение влагосодержания почвы в течение 68 дней начиная с 169 дня года. При этом в качестве верхних и нижних граничных условий задавались условия, соответствующие средам, показанным на рис. 8. В начальный момент времени по профилю почвы задавалось распределение влаги в соответствии с экспериментальными данными на 169 день года. Необходимо отметить, что первое орошение проводилось в течение 7,5 часов на 170 день года, а последующие орошения проводились три раза в неделю (понедельник, среда, пятница) в течение 3 часов каждое начиная с 173 дня года.

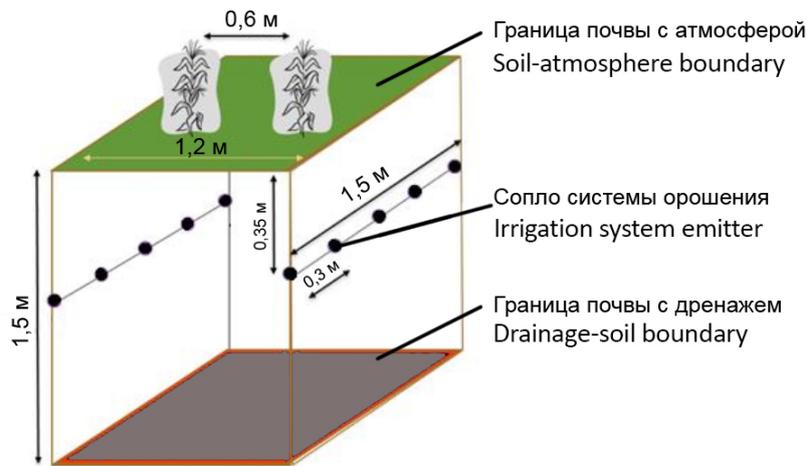


Рис. 8. Схематическое изображение эксперимента, проведенного в работе [9]
Fig. 8. Schematic representation of the experiment carried out in [9]

На рис. 9 приведено сравнение полученных результатов моделирования с экспериментальными данными для 202 и 237 дней года. На рисунке доверительный интервал обозначен кругом серого цвета.

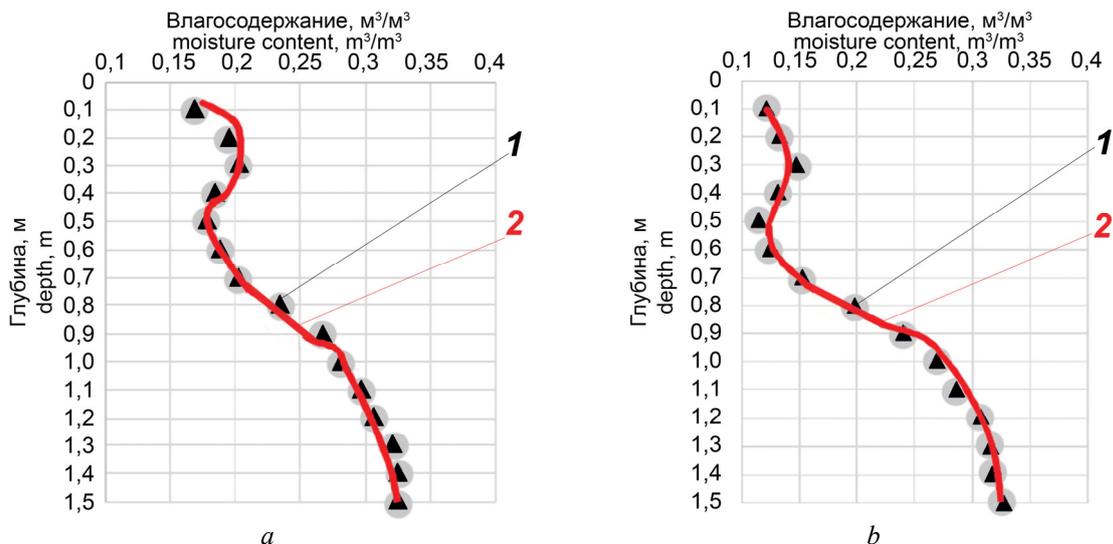


Рис. 9. Значения влагосодержания в почве, измеренные экспериментально (фигуры 1) и полученные с помощью предложенной математической модели (кривые 2): *a* – на 202 день года; *b* – на 237 день года

Fig. 9. Values of moisture content in the soil, measured experimentally (shapes 1) and obtained using the proposed mathematical model (curves 2): *a* – on the 202nd day of the year; *b* – on the 237th day of the year

Примечательно, что влагосодержание почвы на глубинах до 0,8 м на 237 день значительно ниже, чем на 202 день. Это обусловлено сезонным изменением климатических параметров и гидравлическими параметрами почвы [10].

На рис. 9 видно, что погрешность расчетов анализируемых параметров не превышает 5 %, так как смоделированные значения попадают в доверительный интервал, обозначенный серым цветом. Следовательно, разработанная модель адекватна реальным процессам, протекающим в почве.

Заключение

Верификация разработанных численных методов решения уравнений неизоэнтальпического влагопереноса, конвективной диффузии и кинетики сорбции показала, что их точность соответствует лучшим зарубежным разработкам в этой области, реализованным в математическом пакете COMSOL Multiphysics. Экспериментальная верификация разработанной модели неизоэнтальпического переноса влаги и растворимых в ней веществ в природных дисперсных средах свидетельствует о ее адекватности реальному процессу и показывает, что отклонение значений получаемых результатов не превышает 5 %. Это свидетельствует о возможности эффективного практического использования ПК SPS v2.0 для решения задач моделирования миграции радионуклидов в природных дисперсных средах.

Список литературы

1. Кундас С.П., Гишкелюк И.А., Коваленко В.И., Хилько О.С. *Компьютерное моделирование миграции загрязняющих веществ в природных дисперсных средах*. Минск: МГЭИ им. А.Д. Сахарова; 2011.
2. Шалькевич П.К., Кундас С.П., Гишкелюк И.А. Технология параллельных вычислений задачи тепло-влажностного переноса в программном комплексе SPS. *Информатика*. 2015; 45.
3. Шалькевич П.К. *Модель и алгоритмы для прогнозирования миграции радионуклидов в природных дисперсных средах с применением технологий параллельных вычислений*. Минск: МГЭИ им. А.Д. Сахарова БГУ; 2019.
4. *ANSYS Theory Manual*. ANSYS Release. SAS IP, Inc. 2001.
5. *COMSOL Multiphysics. User's Guide*. COMSOL AB. 2012.
6. Сегерлинд Л. *Применение метода конечных элементов*. Москва: Мир; 1979.
7. Гринчик Н.Н. *Процессы переноса в пористых средах, электроплитах и мембранах*. Минск: АНК ИТМО АНБ; 1991.
8. Кундас С.П., Гринчик Н.Н., Гишкелюк И.А., Адамович А.Л. *Моделирование процессов термо-влажностного переноса в капиллярно-пористых средах*. Минск: ИТМО НАН Беларуси; 2007.
9. Alvalá R.C.S., Gielow R., Rocha H.R., Freitas H.C., Lopes J.M., Manzi A.O., Randow C., Dias M.A.F.S., Cabral O.M.R., Waterloo M.J. Intradiurnal and seasonal variability of soil temperature, heat flux, soil moisture content, and thermal properties under forest and pasture in Rondônia. *Journal of geophysical research*. 2002;107(20).
10. Honari M., Ashrafzadeh A., Khaledian M., Vazifedoust M., Mailhol J.C. Comparison of HYDRUS-3D soil moisture simulations of subsurface drip irrigation with experimental observations in the South of France. *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*. 2017;143(7).

References

1. Kundas S.P., Gishkelyuk I.A., Kovalenko V.I., Hilko O.S. [Computer simulation of the migration of pollutants in natural dispersed environments]. Minsk: Minsk: MGEI im. A.D. Saharova; 2011.
2. Shalkevich P.K., Kundas S.P., Gishkelyuk I.A. [Parallel computing technology for the heat and moisture transfer problem in the SPS software package]. *Informatica=Informatics*. 2015; 45.
3. Shalkevich P.K. [Model and algorithms for predicting the migration of radionuclides in natural dispersed media using parallel computing technologies]. Minsk: MGEI im. A.D. Saharova BGU; 2019.
4. *ANSYS Theory Manual*. ANSYS Release. SAS IP, Inc. 2001.
5. *COMSOL Multiphysics. User's Guide*. COMSOL AB. 2012.
6. Segerlind L. [Application of the finite element method]. Moscow: Mir, 1979.
7. Grinchik N.N. [Transfer processes in porous environment, electric stoves and membranes]. Minsk: ANK ИТМО АНБ; 1991.

8. Kundas S.P., Grinchik N.N., Gishkelyuk I.A., Adamovich A.L. [*Modeling the processes of thermal and moisture transfer in capillary-porous environment*]. Minsk: ITMO NAN Belarusi; 2007.
9. Alvalá R.C.S., Gielow R., Rocha H.R., Freitas H.C., Lopes J.M., Manzi A.O., Randow C., Dias M.A.F.S., Cabral O.M.R., Waterloo M.J. Intradurnal and seasonal variability of soil temperature, heat flux, soil moisture content, and thermal properties under forest and pasture in Rondônia. *Journal of geophysical research*. 2002;107(20).
10. Honari M., Ashrafzadeh A., Khaledian M., Vazifedoust M., Mailhol J.C. Comparison of HYDRUS-3D soil moisture simulations of subsurface drip irrigation with experimental observations in the South of France. *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*. 2017;143(7).

Вклад авторов

Шалькевич П.К. выполнил верификацию используемых численных методов и разработанной математической модели миграции радионуклидов в природных дисперсных средах, принимал участие в разработке ПК SPS V2.0.

Кундас С.П. определил цель и задачи проведенных исследований, сформулировал введение и заключение, выполнил научное редактирование статьи, руководил разработкой и развитием ПК SPS, ПК SPS V2.0.

Authors' contribution

Shalkevich P.K. performed a verification of the numerical methods and the mathematical model of radionuclides migration in natural disperse environments, took part in development of SPS V2.0 software.

Kundas S.P. defined the purpose and objectives of the research, formulated an introduction and conclusion, edited the article, supervised the development of SPS and SPS V2.0 software.

Сведения об авторах

Шалькевич П.К., к.т.н., доцент кафедры энергоэффективных технологий Международного государственного экологического института имени А.Д. Сахарова Белорусского государственного университета.

Кундас С.П., д.т.н., профессор.

Information about the authors

Shalkevich P.K., PhD, Associate Professor of Energy Efficient Technologies Department of International Sakharov Environmental Institute of Belarusian State University.

Kundas S.P., D.Sci, Professor.

Адрес для корреспонденции

220070, Республика Беларусь,
Минск, ул. Долгобродская, 23,
Международный государственный
экологический институт имени А. Д. Сахарова
Белорусского государственного университета;
тел. +375-17-230-68-97;
e-mail: pavel.shalkevich@gmail.com
Шалькевич Павел Константинович

Address for correspondence

220070, Republic of Belarus,
Minsk, Dolgobrodskaya str., 23,
International Sakharov Environmental Institute
of Belarusian State University;
tel. +375-17-230-68-97;
e-mail: pavel.shalkevich@gmail.com
Shalkevich Pavel Konstantsinovich