

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ MATHEMATICAL MODELLING



УДК 519.6

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-7-4-39-46>

Научная статья



## Математическая модель процесса распространения нефтяных загрязнений в прибрежных морских системах

В.В. Сидорякина<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Донской государственный технический университет, г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация<sup>2</sup>Таганрогский институт имени А.П. Чехова (филиал) РГЭУ (РИНХ), г. Таганрог, Российская Федерация✉ [cvv9@mail.ru](mailto:cvv9@mail.ru)

### Аннотация

**Введение.** Негативные последствия, которые могут возникнуть по причине аварийного разлива нефти, носят, как правило, трудно учитываемый характер, поскольку нарушают многие естественные процессы и взаимосвязи внутри экосистемы водоёма. После разлива нефти на водной поверхности довольно быстро образуется плотный слой нефтяной пленки, препятствующий доступу воздуха и света (после разлива одной тонны нефти через 10 минут на поверхности водоёма образуется нефтяное пятно толщиной около 10 мм). Вследствие этого страдает животный и растительный мир водоёма. Если авария произошла в прибрежной зоне неподалеку от населенного пункта, то токсический эффект усиливается, потому что нефть/нефтепродукты в сочетании с различными загрязнителями человеческого происхождения могут образовывать опасные соединения. Для территорий повышенного риска (основных маршрутов транспортировки нефтепродуктов, мест их бункеровки и выгрузки и др.) необходимо прогнозировать различные сценарии распространения и трансформации нефтяных загрязнений с учетом их многофракционного состава, турбулентной диффузии и адвективного переноса, деструкции под воздействием природных факторов и т. д. Целью работы является построение линеаризованной нестационарной пространственно-неоднородной математической модели транспорта и трансформации нефтяных загрязнений с учетом перечисленных выше факторов.

**Материалы и методы.** Попавшая в водную среду нефть представляется в виде поверхностной и взвешенной в водной толще субстанции. Нефть подвержена множеству трансформационных процессов: адвекции, гравитационному растеканию, эмульгированию, диспергированию, растворению, биodeградации и др. Исследование данных процессов и их прогнозирование, как правило, требует разработки математического и программного обеспечения. Как показывает мировой опыт и объективный анализ физической картины процессов, при математическом и численном моделировании следует отталкиваться от системы уравнений Навье-Стокса и уравнений неразрывности, а также вводить дополнительные физические допуски геометрии потока, приемлемые и обоснованные в каждом конкретном случае. С учетом данных соображений выполнено математическое моделирование процесса распространения нефти в прибрежных морских системах.

**Результаты исследования.** Создана математическая модель процесса распространения нефти, учитывающая её многофракционный состав. Предполагается, что фракции нефти могут находиться в воде в растворенном или нерастворенном состояниях. При моделировании учитываются такие физические характеристики частиц как плотность, ускорение свободного падения, молярная масса и др. После линеаризации рассматриваемой задачи были построены разностные схемы, использующие расширенные равномерные сетки.

**Обсуждение и заключение.** Загрязнение, вызванное разливом нефти в водной среде, происходит очень быстро и нередко является весьма разрушительным. В данной ситуации важным фактором будет оперативное реагирование, играющее решающую роль для минимизации его негативных последствий. Моделирование процесса разлива нефти может быть полезным для определения местоположения и состояния нефти в море, проведения риск-анализа распространения субстанции и разработке мер по локализации и ликвидации загрязнения.

**Ключевые слова:** прибрежные морские системы, аварийный разлив нефти, нефтяной slick, многофракционный состав нефти, концентрация частиц нефти, математическое моделирование, аппроксимация непрерывной модели

**Финансирование.** Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-21-00509. <https://rscf.ru/project/23-21-00509>

**Для цитирования.** Сидорякина В.В. Математическая модель процесса распространения нефтяных загрязнений в прибрежных морских системах. *Computational Mathematics and Information Technologies*. 2023;7(4):39–46. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-7-4-39-46>

Original article

## Mathematical Model of Spreading Oil Pollution in Coastal Marine Systems

Valentina V. Sidoryakina<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Don State Technical University, Rostov-on-Don, Russian Federation

<sup>2</sup>Taganrog Institute named after A.P. Chekhov (branch) of RSUE, Taganrog, Russian Federation

✉ [cvv9@mail.ru](mailto:cvv9@mail.ru)

### Abstract

**Introduction.** The negative consequences that may arise due to an accidental oil spill are difficult to account for, since they disrupt many natural processes and relationships within the ecosystem of the reservoir. After an oil spill, a dense layer of oil film forms on the water surface quite quickly, preventing access to air and light (after a spill of one ton of oil, an oil slick about 10 mm thick forms on the surface of the reservoir after 10 minutes). As a result, the fauna and flora of the reservoir suffer. If the accident occurred in the coastal zone near a populated area, then the toxic effect is enhanced, because petroleum products in combination with various pollutants of human origin can form dangerous compounds. For high-risk areas (the main routes of transportation of petroleum products, places of their bunkering and unloading, etc.), it is necessary to predict various scenarios for the spread and transformation of oil pollution, taking into account their multifractional composition, turbulent diffusion and advective transport, destruction under the influence of natural factors. The aim of the work is to build a linearized non-stationary spatially heterogeneous mathematical model of transport and transformation of oil pollution, taking into account the above factors.

**Materials and Methods.** The oil that has entered the aquatic environment is represented as a surface and suspended substance in the water column. Oil is subject to a variety of transformation processes: advection, gravitational spreading, emulsification, dispersion, dissolution, biodegradation, etc. The study of these processes and their forecasting, as a rule, requires the development of mathematical and software. In mathematical and numerical modeling, one should start from the system of Navier-Stokes equations and continuity equations, as well as introduce additional physical tolerances of the flow geometry, acceptable and justified in each case, as shown by world experience and objective analysis of the physical picture of processes. Mathematical modeling of the oil distribution process in coastal marine systems has been performed.

**Results.** Mathematical oil distribution model has been created, taking into account its multifractional composition. It is assumed that oil fractions can be in water in dissolved or undissolved states. The modeling takes into account such physical characteristics of particles as density, acceleration of gravity, molar mass, etc. After the linearization of the problem under consideration, difference schemes using extended uniform grids were constructed.

**Discussion and Conclusion.** Pollution caused by an oil spill in the aquatic environment occurs very quickly and is often very destructive. An important factor will be prompt response, which plays a crucial role in minimizing its negative consequences. Modeling of the oil spill process can be useful for determining the location and condition of oil at sea, conducting a risk analysis of the spread of the substance and developing measures to localize and eliminate pollution.

**Keywords:** coastal marine systems, emergency oil spill, oil slick, multi-fraction composition of oil, concentration of oil particles, mathematical modelling, continuous model approximation

**Funding information.** The study was supported by the Russian Science Foundation grant no. 23-21-00509. <https://rscf.ru/project/23-21-00509>

**For citation.** Sidoryakina V.V. Mathematical model of spreading oil pollution in coastal marine systems. *Computational Mathematics and Information Technologies*. 2023;7(4):39–46. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-7-4-39-46>

**Введение.** В последнее время во всем мире наблюдается рост объемов торговли нефтью и нефтепродуктами, причем значительную долю в их транспортировке занимает морское судоходство. Для обеспечения экологической безопасности водных путей и находящейся вблизи инфраструктуры на протяжении всей перевозки товара соблюдаются определенные ограничения и меры. Несмотря на это, за последние 50 лет в мире зафиксировано 5,86 миллиона тонн нефти, разлитой в море. Причем около 80% этой нефти разлито на расстоянии не более 10 морских миль от берега [1]. Негативные последствия нефтяного загрязнения водоемов могут быть существенно уменьшены при своевременной локализации и ликвидации загрязнения. Для этих целей необходим разработанный комплекс мер для использования их службами быстрого реагирования. Данный комплекс мер, среди прочего, должен содержать некоторый аппарат, позволяющий осуществлять прогноз распределения нефтяных загрязнений. Эти прогнозы требуют привлечения методов математического и численного моделирования [2–4].

В России и за рубежом исследования в этой области проводятся такими научными центрами как институт океанологии им. П.П. Ширшова РАН (Россия), институт водных проблем РАН (Россия), Государственный гидрологический институт (Россия), Китайский нефтяной университет и Институт океанологии Китайской Академии наук в Циндао (Китай), университеты Тасмании и Маккуори (Австралия), мемориальный университет Ньюфаундленда (Канада) и др. [5–9]. Накопление новых знаний и экспериментальных данных побуждает к получению новых результатов по интересующей нас проблеме.

В настоящей работе представлена математическая модель распределения нефтяных загрязнений, учитывающая следующие физические параметры и процессы: многофракционный состав нефти, турбулентную диффузию и адвективный перенос, испарение, деструкцию под воздействием микроорганизмов и др. Данная математическая модель скомплексирована с гидродинамической моделью, описанной, например, в работах [10, 11]. Для начально-краевой задачи, моделирующей рассматриваемые процессы, построены разностные схемы на сетках, имеющих неравномерные шаги в приграничных ячейках (вблизи границы).

### Материалы и методы

**Постановка задачи.** Будем использовать прямоугольную декартову систему координат  $Oxyz$ . Пусть  $\Omega \subset R^3$  — расчетная область,  $\Omega = \{0 < x < L_x, 0 < y < L_y, 0 < z < L_z\}$ . Рассматриваем случай выброса нефти в течение короткого временного промежутка (одномоментный выброс) в рассматриваемую область. Поступившая в область  $\Omega$  нефть на свободной поверхности  $\Omega_0$  образует пятно. Область покрытия первоначальным неразорванным нефтяным пятном обозначим  $\sigma$ .

Заметим, что в начально-краевой задаче, моделирующей распространение нефтяного загрязнения, ряд процессов рассматривается на поверхности водоема и потому здесь используется двумерная постановка. Процесс распространения и трансформации нефти в прибрежной зоне опишем следующими уравнениями [12]:

– уравнения для концентрации фракции номера  $\alpha$  нефти, находящейся в поверхностном слое:

$$\frac{\partial c_\alpha}{\partial t} + u \frac{\partial c_\alpha}{\partial x} + v \frac{\partial c_\alpha}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_h^* \frac{\partial c_\alpha}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_h^* \frac{\partial c_\alpha}{\partial y} \right) - \left( \frac{K_E P_\alpha}{R\theta} + K_D S_\alpha \right) X_\alpha m_\alpha - \frac{\omega_\alpha c_\alpha}{q(c_\alpha + K_s)} M, \quad (1)$$

$$c_\alpha|_{t=0} = \begin{cases} 0, & (x, y) \notin \sigma, \\ c_{\alpha 0}, & (x, y) \in \sigma; \end{cases} \quad \frac{\partial c_\alpha}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (x, y) \in \gamma; \quad (2)$$

– уравнения для концентрации микроорганизмов — деструкторов нефти:

$$\frac{\partial M}{\partial t} + u \frac{\partial M}{\partial x} + v \frac{\partial M}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_h \frac{\partial M}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_h \frac{\partial M}{\partial y} \right) + \frac{\omega_\alpha c_\alpha}{c_\alpha + K_s} M - \lambda M, \quad (3)$$

$$M|_{t=0} = M_0, \quad \frac{\partial M}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (x, y) \in \gamma; \quad (4)$$

– уравнения для концентрации фракции номера  $\alpha$  нефти, находящейся в растворенном состоянии:

$$\frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial t} + u \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x} + v \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial y} + w \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_h \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_h \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_v \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial z} \right), \quad (5)$$

$$\frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial z} = K_D S_\alpha X_\alpha m_\alpha, \quad (x, y, z) \in \Omega_0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (x, y, z) \in \Omega \setminus \Omega_0. \quad (7)$$

В уравнениях (1)–(7) используются следующие обозначения:  $u, v, w$  — компоненты вектора скорости движения водной среды;  $c_\alpha$  — концентрация фракции номера  $\alpha$  нефти, находящейся в поверхностном слое,  $\alpha = \overline{1, A'}$ ;  $\mu_h^* = \mu_h + (\rho_\alpha - \rho_w)gh^3/\mu_h$  ( $\mu_h$  — коэффициент горизонтальной диффузии частиц,  $g$  — ускорение свободного падения,  $\rho_\alpha, \rho_w$  — плотности частиц фракции  $\alpha$  и воды соответственно,  $h$  — толщина пленки нефти);  $K_E$  — коэффициент массопереноса для углеводорода,  $K_E = 2,5 \cdot 10^{-3} U^{0,78}$  ( $U$  — скорость ветра относительно воды);  $P_\alpha$  — давление паров частиц фракции  $\alpha$ ;  $R$  — универсальная газовая постоянная,  $R = 8,314$ ;  $\theta$  — температура окружающей среды над поверхностью пятна;  $K_D$  — коэффициент массопереноса растворения;  $S_\alpha$  — растворимость в воде частиц фракции  $\alpha$ ,  $\alpha = A' + 1, A$ ;  $X_\alpha$  — молярная доля частиц фракции  $\alpha$ ;  $m_\alpha$  — значение молярной массы частиц фракции  $\alpha$ ;  $q$  — значение коэффициента пропорциональности между количеством микроорганизмов и поглощенным субстратом;  $M$  — концентрация микроорганизмов;  $\omega_\alpha$  — значение максимальной скорости роста микроорганизмов при питании частицами фракции  $\alpha$ ;  $K_s$  — значение коэффициент насыщения;  $\lambda$  — скорость отмирания микроорганизмов;  $\varphi_\alpha$  — концентрация фракции  $\alpha$  нефти, находящейся в растворенном состоянии,  $\alpha = A' + 1, A$ ;  $\mu_v$  — коэффициент вертикальной диффузии;  $\vec{n}$  — вектор внешней нормали к поверхности, описывающей границу расчетной области;  $\gamma$  — область, описывающая поверхностные слои водоема.

Математическая модель распространения нефтяного загрязнения получается при использовании суперпозиции результатов решения задачи (1)–(7) для каждой фракции.

### Результаты исследования.

**Линеаризация задачи.** На временном отрезке  $0 < t \leq T$  строится равномерная сетка с шагом  $\tau$ :  $\omega_\tau = \{t_n = n\tau, n = 1, \dots, N; N\tau \equiv T\}$ . На временной сетке  $\omega_\tau$  выполнена линеаризация рассматриваемых задач. Линеаризация выполнена таким образом, что в уравнении (1), определяющем концентрацию фракции  $\alpha$  на данном временном слое, использовались концентрации микроорганизмов на предыдущем временном слое.

На каждом шаге времени  $n = 1, 2, \dots, N$ ,  $t_{n-1} < t \leq t_n$  решениями уравнений (1)–(3) пусть будут функции  $\tilde{c}_\alpha^n$ ,  $\tilde{M}^n$ ,  $\tilde{\varphi}_\alpha^n$ ,  $n = 1, 2, \dots, N + 1$  соответственно. В этом случае линеаризованный аналог рассматриваемой задачи для всех интервалов  $t_{n-1} < t \leq t_n$ ,  $n = 1, 2, \dots, N$  запишется в виде:

$$\frac{\partial \tilde{c}_\alpha^n}{\partial t} + u^n \frac{\partial \tilde{c}_\alpha^n}{\partial x} + v^n \frac{\partial \tilde{c}_\alpha^n}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_h^* \frac{\partial \tilde{c}_\alpha^n}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_h^* \frac{\partial \tilde{c}_\alpha^n}{\partial y} \right) - \left( \frac{K_E P_\alpha}{R\theta} + K_D S_\alpha \right) X_\alpha m_\alpha - \frac{\mu_\alpha \tilde{c}_\alpha^n}{q(\tilde{c}_\alpha^n + K_s)} \tilde{M}^{n-1}, \quad (8)$$

$$\tilde{c}_\alpha^1 \Big|_{t=0} = \begin{cases} 0, & (x, y) \notin \sigma, \\ c_{\alpha 0}, & (x, y) \in \sigma, \end{cases} \quad (9)$$

$$\tilde{c}_\alpha^n(x, y, t_{n-1}) = \tilde{c}_\alpha^{n-1}(x, y, t_{n-1}), \quad n = 2, \dots, N, \quad (x, y) \in \gamma,$$

$$\frac{\partial \tilde{c}_\alpha^n}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (x, y) \in \gamma; \quad (10)$$

$$\frac{\partial \tilde{M}^n}{\partial t} + u^n \frac{\partial \tilde{M}^n}{\partial x} + v^n \frac{\partial \tilde{M}^n}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_h \frac{\partial \tilde{M}^n}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_h \frac{\partial \tilde{M}^n}{\partial y} \right) + \frac{\mu_\alpha \tilde{c}_\alpha^{n-1}}{\tilde{c}_\alpha^{n-1} + K_s} \tilde{M}^n - \lambda \tilde{M}^n, \quad (11)$$

$$\tilde{M}^1 \Big|_{t=0} = M_0, \quad (12)$$

$$\tilde{M}^n(x, y, t_{n-1}) = \tilde{M}^n(x, y, t_{n-1}), \quad n = 2, \dots, N, \quad (x, y) \in \gamma,$$

$$\frac{\partial \tilde{M}^n}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (x, y) \in \gamma; \quad (13)$$

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}_\alpha^n}{\partial t} + u^n \frac{\partial \tilde{\varphi}_\alpha^n}{\partial x} + v^n \frac{\partial \tilde{\varphi}_\alpha^n}{\partial y} + w^n \frac{\partial \tilde{\varphi}_\alpha^n}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_h \frac{\partial \tilde{\varphi}_\alpha^n}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_h \frac{\partial \tilde{\varphi}_\alpha^n}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_v \frac{\partial \tilde{\varphi}_\alpha^n}{\partial z} \right), \quad (14)$$

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}_\alpha^n}{\partial z} = K_D S_\alpha X_\alpha m_\alpha, \quad (x, y, z) \in \Omega_0, \quad (15)$$

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}_\alpha^n}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (x, y, z) \in \Omega \setminus \Omega_0. \quad (16)$$

Если  $n = 1$ , то в качестве  $\tilde{c}_\alpha^1(x, y, 0)$  достаточно взять функции начальных условий из формул (9). Если  $n = 2$ , то из формул (12) берется функция начального условия  $\tilde{M}^1(x, y, 0)$ , подставляется в уравнение (8) и далее проводится решение задач (8)–(10) и (14)–(16) на промежутке  $t_1 < t \leq t_2$ , в ходе чего находятся значения концентраций  $\tilde{c}_\alpha^2(x, y, t_1)$ ,  $\tilde{\varphi}_\alpha^2(x, y, t_1)$ . В свою очередь, уравнение (11), содержащее в правой части функцию  $\tilde{c}_\alpha^1(x, y, 0)$ , имеет решением  $\tilde{M}^2(x, y, t_1)$ . При продолжении этого процесса для случаев  $n = 3, \dots, N$  будем придерживаться описанной логики. Функции  $\tilde{c}_\alpha^n(x, y, t_{n-1}) = \tilde{c}_\alpha^{n-1}(x, y, t_{n-1})$  и  $\tilde{\varphi}_\alpha^n(x, y, z, t_{n-1}) = \tilde{\varphi}_\alpha^{n-1}(x, y, z, t_{n-1})$  определяются при решении задач (8)–(10) и (14)–(16) на промежутке  $t_{n-1} < t \leq t_{n-2}$ ,  $n = 3, \dots, N$  из предположения, что известными являются функции  $\tilde{M}^{n-1}(x, y, t_{n-1})$  для предыдущего временного промежутка  $t_{n-2} < t \leq t_{n-1}$ .

**Разностная схема для линеаризованной задачи.** Члены, описывающие адвективный перенос частиц, из уравнений (8), (11) и (14) имеют вид в симметричной форме [13]:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \left[ u \frac{\partial \tilde{c}_\alpha^n}{\partial x} + v \frac{\partial \tilde{c}_\alpha^n}{\partial y} + \frac{\partial(u \tilde{c}_\alpha^n)}{\partial x} + \frac{\partial(v \tilde{c}_\alpha^n)}{\partial y} \right], \\ & \frac{1}{2} \left[ u \frac{\partial \tilde{M}^{n-1}}{\partial x} + v \frac{\partial \tilde{M}^{n-1}}{\partial y} + \frac{\partial(u \tilde{M}^{n-1})}{\partial x} + \frac{\partial(v \tilde{M}^{n-1})}{\partial y} \right], \\ & \frac{1}{2} \left[ u \frac{\partial \tilde{\varphi}_\alpha^n}{\partial x} + v \frac{\partial \tilde{\varphi}_\alpha^n}{\partial y} + w \frac{\partial \tilde{\varphi}_\alpha^n}{\partial z} + \frac{\partial(u \tilde{\varphi}_\alpha^n)}{\partial x} + \frac{\partial(v \tilde{\varphi}_\alpha^n)}{\partial y} + \frac{\partial(w \tilde{\varphi}_\alpha^n)}{\partial z} \right], \end{aligned}$$

что позволяет в результате дискретизации построить разностный оператор адвективного переноса, обладающий свойством кососимметричности [14, 15].

В области  $\bar{G}$  построим связную сетку  $\bar{\omega}_h$ ,  $\bar{\omega}_h = \bar{\omega}_x \times \bar{\omega}_y \times \bar{\omega}_z$ , где  $\bar{\omega}_x = \{x_i : x_i = ih_x; i = 0, 1, \dots, N_x; N_x h_x \equiv L_x\}$ ,  $\bar{\omega}_y = \{y_j : y_j = jh_y; j = 0, 1, \dots, N_y; N_y h_y \equiv L_y\}$ ,  $\bar{\omega}_z = \{z_k : z_k = kh_z; k = 0, 1, \dots, N_z; N_z h_z \equiv L_z\}$ . Множество внутренних узлов сеток  $\bar{\omega}_h, \bar{\omega}_x, \bar{\omega}_y, \bar{\omega}_z$  будем обозначать, соответственно, как  $\omega_h, \omega_x, \omega_y, \omega_z$ . На пространственно-временной сетке

$\omega_{th} = \omega_\tau \times \omega_h$  аппроксимируем задачу (8)–(16) с заданием в узлах, сдвинутых на половину скоростей шага сетки и по соответствующему координатному направлению.

Далее символ « $\rightarrow$ » сверху над функциями  $c_\alpha^n, c_\alpha^{n-1}, \varphi_\alpha^n, \varphi_\alpha^{n-1}$  и  $M^n, M^{n-1}$  будет означать их принадлежность к классу сеточных функций. Функции  $\tilde{c}_\alpha^n, \tilde{\varphi}_\alpha^n, \tilde{M}^n$  рассматриваются как достаточно гладкие функции непрерывных переменных.

После аппроксимации во внутренних узлах сетки  $\bar{\omega}_h$  уравнения (8), (11) и (14) примут вид:

$$\begin{aligned} & \frac{\bar{c}_\alpha^n - \bar{c}_\alpha^{n-1}}{\tau} + \frac{1}{2h_x} \left( u^n(x_i + 0,5h_x, y_j) \bar{c}_\alpha^n(x_i + h_x, y_j) - u^n(x_i - 0,5h_x, y_j) \bar{c}_\alpha^n(x_i - h_x, y_j) \right) + \\ & + \frac{1}{2h_y} \left( v^n(x_i, y_j + 0,5h_y) \bar{c}_\alpha^n(x_i, y_j + h_y) - v^n(x_i, y_j - 0,5h_y) \bar{c}_\alpha^n(x_i, y_j - h_y) \right) = \\ & = \frac{1}{h_x^2} \left( \mu_h^*(x_i + 0,5h_x, y_j) \left( \bar{c}_\alpha^n(x_i + h_x, y_j) - \bar{c}_\alpha^n(x_i, y_j) \right) - \mu_h^*(x_i - 0,5h_x, y_j) \left( \bar{c}_\alpha^n(x_i, y_j) - \bar{c}_\alpha^n(x_i - h_x, y_j) \right) \right) + \\ & + \frac{1}{h_y^2} \left( \mu_h^*(x_i, y_j + 0,5h_y) \left( \bar{c}_\alpha^n(x_i, y_j + h_y) - \bar{c}_\alpha^n(x_i, y_j) \right) - \mu_h^*(x_i, y_j - 0,5h_y) \left( \bar{c}_\alpha^n(x_i, y_j) - \bar{c}_\alpha^n(x_i, y_j - h_y) \right) \right) - \\ & - \left( \frac{K_E P_\alpha}{R\theta} + K_D S_\alpha \right) X_\alpha m_\alpha - \frac{\omega_\alpha \bar{c}_\alpha^n(x_i, y_j)}{q \left( \bar{c}_\alpha^n(x_i, y_j) + K_s \right)} \bar{M}^{n-1}(x_i, y_j); \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\bar{M}^n - \bar{M}^{n-1}}{\tau} + \frac{1}{2h_x} \left( u^n(x_i + 0,5h_x, y_j) \bar{M}^n(x_i + h_x, y_j) - u^n(x_i - 0,5h_x, y_j) \bar{M}^n(x_i - h_x, y_j) \right) + \\ & + \frac{1}{2h_y} \left( v^n(x_i, y_j + 0,5h_y) \bar{M}^n(x_i, y_j + h_y) - v^n(x_i, y_j - 0,5h_y) \bar{M}^n(x_i, y_j - h_y) \right) = \frac{1}{h_x^2} \left( \mu_h^*(x_i + 0,5h_x, y_j) \cdot \right. \\ & \cdot \left( \bar{M}^n(x_i + h_x, y_j) - \bar{M}^n(x_i, y_j) \right) - \mu_h^*(x_i - 0,5h_x, y_j) \left( \bar{M}^n(x_i, y_j) - \bar{M}^n(x_i - h_x, y_j) \right) \right) + \\ & + \frac{1}{h_y^2} \left( \mu_h^*(x_i, y_j + 0,5h_y) \left( \bar{M}^n(x_i, y_j + h_y) - \bar{M}^n(x_i, y_j) \right) - \mu_h^*(x_i, y_j - 0,5h_y) \cdot \right. \\ & \cdot \left. \left( \bar{M}^n(x_i, y_j) - \bar{M}^n(x_i, y_j - h_y) \right) \right) + \frac{\omega_\alpha \bar{c}_\alpha^{n-1}(x_i, y_j)}{\bar{c}_\alpha^{n-1}(x_i, y_j) + K_s} \bar{M}^n(x_i, y_j) - \lambda \bar{M}^n(x_i, y_j); \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\bar{\varphi}_\alpha^n - \bar{\varphi}_\alpha^{n-1}}{\tau} + \frac{1}{2h_x} \left( u^n(x_i + 0,5h_x, y_j, z_k) \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i + h_x, y_j, z_k) - u^n(x_i - 0,5h_x, y_j, z_k) \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i - h_x, y_j, z_k) \right) + \\ & + \frac{1}{2h_y} \left( v^n(x_i, y_j + 0,5h_y, z_k) \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j + h_y, z_k) - v^n(x_i, y_j - 0,5h_y, z_k) \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j - h_y, z_k) \right) + \\ & + \frac{1}{2h_z} \left( w^n(x_i, y_j, z_k + 0,5h_z) \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j, z_k + h_z) - w^n(x_i, y_j, z_k - 0,5h_z) \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j, z_k - h_z) \right) = \\ & = \frac{1}{h_x^2} \left( \mu_h(x_i + 0,5h_x, y_j, z_k) \left( \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i + h_x, y_j, z_k) - \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j, z_k) \right) - \mu_h(x_i - 0,5h_x, y_j, z_k) \cdot \right. \\ & \cdot \left. \left( \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j, z_k) - \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i - h_x, y_j, z_k) \right) \right) + \frac{1}{h_y^2} \left( \mu_h(x_i, y_j + 0,5h_y, z_k) \left( \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j + h_y, z_k) - \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j, z_k) \right) - \right. \\ & \cdot \left. \left( \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j, z_k) - \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j - h_y, z_k) \right) \right) + \frac{1}{h_z^2} \left( \mu_v(x_i, y_j, z_k + 0,5h_z) \left( \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j, z_k + h_z) - \right. \right. \\ & \cdot \left. \left. \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j, z_k) \right) - \mu_v(x_i, y_j, z_k - 0,5h_z) \left( \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j, z_k) - \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j, z_k - h_z) \right) \right). \end{aligned} \quad (19)$$

К разностным уравнениям (17)–(19) необходимо добавить начальные условия для  $(x, y, z) \in \omega_h$ , а также аппроксимацию граничных условий.

Для задания граничных условий удобно ввести расширенную сетку:

$$\begin{aligned} \bar{\omega}^* = \{ & (x_i, y_j, z_k) | i = -1, 0, \dots, N_x + 1; j = -1, 0, \dots, N_y + 1; k = -1, 0, \dots, N_z + 1; \\ & x_i = ih_x; y_j = jh_y; z_k = kh_z; N_x h_x = L_x; N_y h_y = L_y; N_z h_z = L_z \}. \end{aligned}$$



Будем считать известными значения компонент вектора скоростей водной среды в узлах сетки  $\bar{\omega}^* \setminus \bar{\omega}_h$  с дробными значениями индексов, например,  $u^n(-0,5h_x, y_j, z_k)$ ,  $u^n(L_x + 0,5h_x, y_j, z_k)$ ,  $v^n(x_i, -0,5h_y, z_k)$ ,  $v^n(x_i, L_y + 0,5h_y, z_k)$ ,  $w^n(x_i, y_j, -0,5h_z)$ ,  $w^n(x_i, y_j, L_z + 0,5h_z)$  и т. д.

Аппроксимацию граничных условий проведем на примере условия (15). Аналогично проводятся рассуждения для граничных условий (10), (13) и (16).

Будем предполагать, что  $\bar{\varphi}_\alpha^n(x, y, z) = 0$ , если  $(x, y, z) \in \bar{\omega}^* \setminus \bar{\omega}_h$ . Для тех узлов сетки  $\bar{\omega}^* \setminus \bar{\omega}_h$ , которые находятся вне расчётной области, значение компонент вектора скорости водной среды предполагается равным нулю.

Формально запишем выражение:

$$C_z \left( \bar{\varphi}_\alpha^n \right) \Big|_{z=0} = \frac{1}{2h_z} \left( w^n(x_i, y_j, 0,5h_z) \bar{\varphi}_\alpha^n(x_j, y_j, h_z) - w^n(x_i, y_j, -0,5h_z) \bar{\varphi}_\alpha^n(x_j, y_j, -h_z) \right), \quad (17)$$

которое можно рассматривать как разностную аппроксимацию конвективного члена при  $z = 0$ .

Наряду с (17) можно для граничного условия (15) записать равенство:

$$\frac{\bar{\varphi}_\alpha^n(x_j, y_j, h_z) - \bar{\varphi}_\alpha^n(x_j, y_j, -h_z)}{2h_z} = K_D S_\alpha X_\alpha m_\alpha,$$

из которого получим:

$$\bar{\varphi}_\alpha^n(x_j, y_j, h_z) = \bar{\varphi}_\alpha^n(x_j, y_j, -h_z) + 2h_z K_D S_\alpha X_\alpha m_\alpha. \quad (18)$$

Из выражений (17) и (18) получаем:

$$C_z \left( \bar{\varphi}_\alpha^n \right) \Big|_{z=0} \equiv \frac{1}{2h_z} \left( w^n(x_i, y_j, 0,5h_z) \left( \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j, -h_z) + 2h_z K_D S_\alpha X_\alpha m_\alpha \right) - w^n(x_i, y_j, -0,5h_z) \bar{\varphi}_\alpha^n(x_j, y_j, -h_z) \right). \quad (19)$$

Далее рассмотрим формально на расширенной сетке  $\bar{\omega}^*$  равенство

$$D_z \left( \bar{\varphi}_\alpha^n \right) \Big|_{z=0} \equiv \frac{1}{h_z} \left( \mu_v(x_i, y_j, 0,5h_z) \frac{\bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j, h_z) - \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j, 0)}{h_z} - \mu_v(x_i, y_j, -0,5h_z) \frac{\bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j, 0) - \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j, -h_z)}{h_z} \right). \quad (20)$$

Поскольку на свободной невозмущенной поверхности водоема отсутствует турбулентная диффузия, то можем считать, что  $\mu_v(x_i, y_j, -0,5h_z) \equiv 0$ . С учетом этого из выражения (20) получаем

$$D_z \left( \bar{\varphi}_\alpha^n \right) \Big|_{z=0} \equiv \frac{1}{h_z^2} \mu_v(x_i, y_j, 0,5h_z) \left( \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j, h_z) - \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j, 0) \right). \quad (21)$$

Из (18) и (21) находим

$$D_z \left( \bar{\varphi}_\alpha^n \right) \Big|_{z=0} \equiv \frac{1}{h_z^2} \mu_v(x_i, y_j, 0,5h_z) \left( \bar{\varphi}_\alpha^n(x_j, y_j, -h_z) - \bar{\varphi}_\alpha^n(x_i, y_j, 0) + 2h_z K_D S_\alpha X_\alpha m_\alpha \right). \quad (22)$$

**Обсуждение и заключение.** В работе представлена математическая модель процесса распространения и трансформации нефтяных загрязнений в прибрежных морских системах. Данная модель учитывает многофракционный состав нефтяных загрязнений, турбулентную диффузию и адвективный перенос, деструкцию частиц нефти под воздействием микроорганизмов и т. д. Аппроксимация предложенной модели выполнена со вторым порядком точности относительно шагов пространственной сетки. Вопросы, связанные с исследованием монотонности построенной разностной схемы и её сходимости к решению исходной начально-краевой задачи являются предметом дальнейших исследований автора.

### Список литературы

1. Ülker D., Burak S., Balas L., et al. Mathematical modelling of oil spill weathering processes for contingency planning in Izmit Bay. *Regional Studies in Marine Science*. 2022;50:102155. <https://doi.org/10.1016/j.rsma.2021.102155>
2. Chen H., An W., You Y., et al. Numerical study of underwater fate of oil spilled from deepwater blowout. *Ocean Engineering*. 2015;110(A):227–243. <https://doi.org/10.1016/j.oceaneng.2015.10.025>
3. Das T., Goerlandt F. Bayesian inference modeling to rank response technologies in arctic marine oil spills. *Marine Pollution Bulletin*. 2022;185(A):114203. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2022.114203>
4. Liu Z., Chen Q., Zhang Y., et al. Research on transport and weathering of oil spills in Jiaozhou Bight, China. *Regional Studies in Marine Science*. 2022;51:102197. <https://doi.org/10.1016/j.rsma.2022.102197>
5. Другов Ю.С. *Экологические анализы при разливах нефти и нефтепродуктов*. Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний; 2015. 273 с.
6. Нельсон-Смит А. *Нефть и экология моря*. Москва: Прогресс; 1977. 301с.
7. Li Y., Chen H., Lv X. Impact of error in ocean dynamical background, on the transport of underwater spilled oil. *Ocean Modelling*. 2018;132:30–45. <https://doi.org/10.1016/j.ocemod.2018.10.003>
8. Durgut I., Erdoğan M., Reed M. Extending Voronoi-diagram based modeling of oil slick spreading to surface tension-viscous spreading regime. *Marine Pollution Bulletin*. 2020;160:111663. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2020.111663>

9. Ворович И.И. *Рациональное использование водных ресурсов бассейна Азовского моря: Математические модели*. Москва: Наука; 1981. 360 с.
10. Сухинов А.И., Сидорякина В.В., Проценко Е.А. и др. Численное моделирование воздействия ветровых течений на прибрежную зону крупных водохранилищ. *Математическая физика и компьютерное моделирование*. 2022;25(3):15–30. <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2022.3.2>
11. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А. и др. Метод учета заполненности ячеек для решения задач гидродинамики со сложной геометрией расчетной области. *Математическое моделирование*. 2019;31(8):79–100. *Math. Models Comput. Simul.* 2020;12:2:232–245. <https://doi.org/10.1134/S0234087919080057>
12. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Filina A.A., et al. Supercomputer simulation of oil spills in the Azov Sea. *Вестн. ЮУрГУ. Сер. Матем. моделирование и программирование*. 2019;12:3:115–129.
13. Самарский А.А. *Численные методы решения задач конвекции-диффузии*. Москва: Изд. УРСС; 1998. 248 с.
14. Самарский А.А. *Методы решения сеточных уравнений*. Москва: Наука; 1978. 592 с.
15. Самарский А.А. *Теория разностных схем*. Москва: Наука; 1989. 616 с.

## References

1. Ülker D., Burak S., Balas L., et al. Mathematical modelling of oil spill weathering processes for contingency planning in Izmit Bay. *Regional Studies in Marine Science*. 2022;50:102155. <https://doi.org/10.1016/j.rsma.2021.102155>
2. Chen H., An W., You Y., et al. Numerical study of underwater fate of oil spilled from deepwater blowout. *Ocean Engineering*. 2015;110(A):227–243. <https://doi.org/10.1016/j.oceaneng.2015.10.025>
3. Das T., Goerlandt F. Bayesian inference modeling to rank response technologies in arctic marine oil spills. *Marine Pollution Bulletin*. 2022;185(A):114203. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2022.114203>
4. Liu Z., Chen Q., Zhang Y., et al. Research on transport and weathering of oil spills in Jiaozhou Bight, China. *Regional Studies in Marine Science*. 2022;51:102197. <https://doi.org/10.1016/j.rsma.2022.102197>
5. Drugov Yu.S. *Environmental analyses in oil and petroleum product spills*. Moscow: BINOM. Laboratory of Knowledge; 2015. 273 p. (In Russ.).
6. Nelson-Smith A. *Oil and marine ecology*. Moscow: Progress; 1977. 301 p. (In Russ.).
7. Li Y., Chen H., Lv X. Impact of error in ocean dynamical background, on the transport of underwater spilled oil. *Ocean Modelling*. 2018;132:30–45. <https://doi.org/10.1016/j.ocemod.2018.10.003>
8. Durgut I., Erdoğan M., Reed M. Extending Voronoi-diagram based modeling of oil slick spreading to surface tension-viscous spreading regime. *Marine Pollution Bulletin*. 2020;160:111663. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2020.111663>
9. Vorovich I.I. *Rational use of water resources of the Azov Sea basin: Mathematical models*. Moscow: Nauka; 1981. 360 p. (In Russ.).
10. Sukhanov A.I., Sidorkina V.V., Protsenko E.A., et al. Numerical modeling of the impact of wind currents on the coastal zone of large reservoirs. *Mathematical physics and computer modeling*. 2022;25(3):15–30. (In Russ.). <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2022.3.2>
11. Sukhanov A.I., Chistyakov A.E., Protsenko E.A., et al. Method of accounting for cell occupancy for solving problems of hydrodynamics with complex geometry of the computational domain. *Mathematical modelling*. 2019;31(8):79–100. *Mathematics. Models calculate. Modeling*. 2020;12:2:232–245. (In Russ.). <https://doi.org/10.1134/S0234087919080057>
12. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Filina A.A., et al. Supercomputer simulation of oil spills in the Azov Sea. *Vestn. SUSU. Ser. Matem. modeling and programming*. 2019;12:3:115–129.
13. Samarskiy A.A. *Numerical methods for solving convection-diffusion problems*. Moscow: URSS Publishing House; 1998. 248 p. (In Russ.).
14. Samarsky A.A. *Methods for solving grid equations*. Moscow: Nauka; 1978. 592 p. (In Russ.).
15. Samarskiy A.A. *Theory of difference schemes*. Moscow: Nauka; 1989. 616 p. (In Russ.).

Поступила в редакцию 15.11.2023

Поступила после рецензирования 01.12.2023

Принята к публикации 01.12.2023

Об авторе:

**Сидорякина Валентина Владимировна**, докторант кафедры математики и информатики, Донской государственной технической университет, (РФ, 344003, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1); доцент кафедры математики, Таганрогский институт имени А.П. Чехова (филиал) РГЭУ (РИНХ), (РФ, 347936, г. Таганрог, ул. Инициативная, 48); кандидат физико-математических наук, [MathSciNet](https://orcid.org/), [eLibrary.ru](https://e-library.ru/), [ORCID](https://orcid.org/), [ResearcherID](https://orcid.org/), [ScopusID](https://orcid.org/), [cvv9@mail.ru](mailto:cvv9@mail.ru)

Конфликт интересов

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Автор прочитал и одобрил окончательный вариант рукописи.

**Received** 15.11.2023

**Revised** 01.12.2023

**Accepted** 01.12.2023

*About the Author:*

**Valentina V. Sidoryakina**, Doctoral student of the Mathematics Department and Computer Science, Don State Technical University, (1, Gagarin Sq., Rostov-on-Don, 344003, RF); Associate Professor of the Department of Mathematics, A.P. Chekhov Taganrog Institute (branch) of the Russian State Economic University (RINH), (48, Initiativnaya St., Taganrog, 347936, RF); PhD (Physical and Mathematical Sciences), [MathSciNet](#), [eLibrary.ru](#), [ORCID](#), [ResearcherID](#), [ScopusID](#), [cvv9@mail.ru](mailto:cvv9@mail.ru)

*Conflict of interest statement*

The author declares that there is no conflict of interest.

*The author read and approved the final version of the manuscript.*