

**Biliaieva V. V., Perkin V. S.**

*Oles Honchar Dnipro National University,  
(Prospect Gagarin, 72, Dnipro, 49000, Ukraine; e-mail: gidravlika2013@mail.ru)*

**Yakubovskaya Z. N.**

*Ukrainian State Chemical Technology University,  
(Prospect Gagarin, 8, Dnipro, 49000, Ukraine; e-mail: physics@udhtu.edu.ua)*

## NUMERICAL SIMULATION OF ACID ZONE ELIMINATION IN GROUND WATERS

Development of a numerical model to compute the process of acid neutralization in ground waters. The neutralization is performed using wells which supply reagent into ground waters. The developed model is based on 2D equations of filtration and contaminant transfer. To solve the governing equations difference schemes are used. On the basis of the numerical model the generic model was developed. To code the finite – difference equations FORTRAN language was used. Computational experiments were carried out to estimate the dynamics of neutralization process in ground waters. The proposed numerical model can be used to develop strategy of optimizing regime of contamination elimination.

**Keywords:** ground waters pollution; numerical simulation; neutralization.

**Introduction.** Acid contamination of ground waters very often takes place during transportation of dangerous cargo or filling tanks. It is important to develop methods of elimination of such zones and theoretical methods which can be used to support the engineer decisions. Very often to solve the problem of ground waters contamination analytical or empirical models are used [3, 5]. These models are restricted enough. Numerical models represent more effective tool and help in predicting the process of ground waters contamination after spills [1, 2, 4, 6, 8]. For a quick evaluation of spatial and temporal contamination of ground waters it is important to develop not time consuming numerical models.

**Purpose.** The purpose of this work is development of 2-D numerical model to simulate the acid contaminant zone elimination in ground waters using reagent supply through wells.

**Mathematical model.** To eliminate contamination zone in ground waters after acid spill it is possible to use wells which supply reagent into this zone. To simulate the ground waters dynamics when such wells work we use equation of filtration [1, 2, 7, 8]

$$\mu \frac{\partial h}{\partial t} = kh_{cp} \left( \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) + W\delta(x - x_i)\delta(y - y_i)$$

where  $h$  is depth of ground waters flow;  $k$  is coefficient of filtration;  $\mu$  is lack of saturation;  $W$  is intensity of reagent supply through well;  $h_{cp}$  is averaged depth;  $\delta(x - x_i)\delta(y - y_i)$  are Dirac delta function.

Contamination of ground waters pollution in the case of accident spillage and reagent supply is simulated using 2-D transport equation [1, 2, 8]:

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \sigma C = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \sum q_i(t)\delta(x - x_i(t))\delta(y - y_i(t)), \quad (1)$$

where  $C$  is concentration of the contaminant (reagent);  $u, v$  are the velocity components in the  $x$  and  $y$  directions;  $\sigma$  is the reaction rate constant;  $\mu_x, \mu_y$  are dispersion coefficients;  $q_i(t)$  is source terms;  $\delta(x - x_i(t))\delta(y - y_i(t))$  are Dirac delta function;  $x_i, y_i$  are the coordinates of the point source of pollution (reagent supply).

This equation is numerically integrated using the following boundary conditions:

– at the entrance boundaries we use the boundary condition:  $C|_{boundary} = C_{etr}$ ,

where  $C_{etr}$  is known concentration (for example  $C_{etr} = 0$ );

– at the exit boundaries so called “mild boundary condition” is used. For example, in the numerical model it can be written as following:  $C(i + 1, j) = C(i, j)$ ,

where  $(i+1,j)$  is the last computational cell and  $(i,j)$  is the previous computational cell.

The initial condition (at time  $t=0$ ) can be written as  $C = 0$  in the whole computational region or  $C = C_0$ , where  $C_0$  is the known concentration in ground waters under the spillage took place. In this case  $C = 0$  in the other part of the computational region.

**Numerical model.** To solve equation of filtration we use the implicit scheme of conditional approximation. The difference equations in this case are following

$$\frac{h_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - h_{i,j}^n}{\Delta t} = a \left[ \frac{-h_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + h_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x^2} \right] + a \left[ \frac{-h_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + h_{i,j-1}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y^2} \right],$$

$$\frac{h_{i,j}^{n+1} - h_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} + a \left[ \frac{h_{i+1,j}^{n+1} - h_{i,j}^{n+1}}{\Delta x^2} \right] + a \left[ \frac{h_{i,j+1}^{n+1} - h_{i,j}^{n+1}}{\Delta y^2} \right].$$

where  $a = \frac{h_{cp} \cdot k}{\mu}$ .

To solve transport equation (1) the implicit change – triangle scheme is used [8]. The main features of this scheme are shown below. To build the scheme we perform the splitting of the transport equation at the differential level.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \sigma c = 0,$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial C}{\partial y} \right),$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \sum q_i(t) \delta(r - r_i).$$

where  $r_i = (x_i, y_i)$ .

After that the approximation of time dependent derivative is used:

$$\frac{\partial C}{\partial t} \approx \frac{C_{ijk}^{n+1} - C_{ijk}^n}{\Delta t}.$$

At the next step the convective derivatives are represented as follows:

$$\frac{\partial uC}{\partial x} = \frac{\partial u^+ C}{\partial x} + \frac{\partial u^- C}{\partial x},$$

$$\frac{\partial vC}{\partial y} = \frac{\partial v^+ C}{\partial y} + \frac{\partial v^- C}{\partial y},$$

where  $u^+ = \frac{u + |u|}{2}$ ,  $u^- = \frac{u - |u|}{2}$ ,  $v^+ = \frac{v + |v|}{2}$ ,  $v^- = \frac{v - |v|}{2}$ .

At the second step the convective derivatives are approximated as following:

$$\frac{\partial u^+ C}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,j}^+ C_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^+ C_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial u^- C}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,j}^- C_{i+1,j}^{n+1} - u_{i,j}^- C_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^- C^{n+1},$$

$$\frac{\partial v^+ C}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1}^+ C_{i,j}^{n+1} - v_{i,j}^+ C_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial v^- C}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1}^- C_{i,j+1}^{n+1} - v_{i,j}^- C_{i,j}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^- C^{n+1}.$$

The second order derivatives are approximated as following:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \approx \mu_x \frac{C_{i+1,j}^{n+1} - C_{i,j}^{n+1}}{\Delta x^2} -$$

$$- \mu_x \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} = M_{xx}^- C^{n+1} + M_{xx}^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) \approx \mu_y \frac{C_{i,j+1}^{n+1} - C_{i,j}^{n+1}}{\Delta y^2} -$$

$$- \mu_y \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} = M_{yy}^- C^{n+1} + M_{yy}^+ C^{n+1}.$$

In these expressions  $L_x^+, L_x^-, L_y^+, L_y^-$ ,  $M_{xx}^+, M_{xx}^-$  are the difference operators.

At the next step we write the finite difference scheme of splitting:

– at the first step  $k=1/4$ :

$$\frac{C_{ij}^{n+k} - C_{ij}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^+ C^k + L_y^+ C^k) + \frac{\sigma}{2} C_{ij}^n = 0;$$

– at the second step  $k=1/2, c=n+1/4$ :

$$\frac{C_{ij}^k - C_{ij}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^- C^k + L_y^- C^k) + \frac{\sigma}{2} C_{ij}^k = 0;$$

– at the third step  $k=3/4, c=n+1/2$ :

$$\frac{C_{ij}^k - C_{ij}^c}{\Delta t} = \frac{1}{2} (M_{xx}^- C^c + M_{xx}^+ C^k + M_{yy}^- C^c + M_{yy}^+ C^k);$$

– at the fourth step  $k=1, c=n+3/4$ :

$$\frac{C_{ij}^k - C_{ij}^c}{\Delta t} = \frac{1}{2} (M_{xx}^- C^k + M_{xx}^+ C^c + M_{yy}^- C^k + M_{yy}^+ C^c);$$

– at the fifth step:

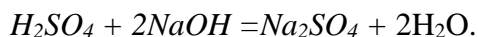
$$\frac{C_{i,j}^{5^{n+1}} - C_{i,j}^{5^n}}{\Delta t} = \sum_{l=1}^N \frac{q_l(t^{n+1/2})}{\Delta x \Delta y} \delta_l.$$

Function  $\delta_l$  is equal to zero in all cells except the cells where the source of emission is situated.

This difference scheme is implicit and absolutely steady but the unknown concentration  $C$  is calculated using the explicit formulae at each step (so called “method of running calculation”), where  $C^1, C^k, C^5$  – are concentrations at each time step.

FORTRAN language was used to code the developed numerical model.

**Results.** The developed generic code «Area- 2A» was used to solve the following problem. We consider the possible spillage of  $H_2SO_4$ . To eliminate the acid zone we use well which supplies  $2NaOH$  solution. In this case the reaction can be written as



Results of numerical simulation which were obtained are shown in Fig.1-3. These Figures show the reduction of acid contamination zone in ground waters after reagent supply through well.

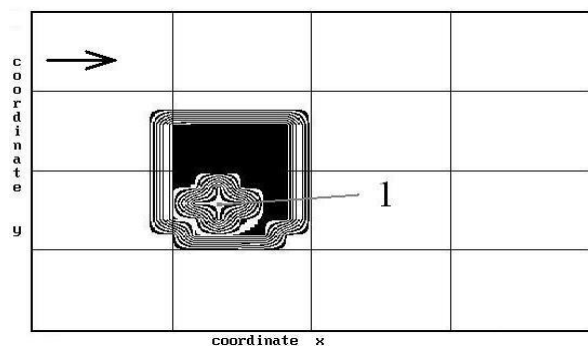


Fig. 1. Contamination zone in ground waters,  $t=0,01$  (time is dimensionless): 1 – well supplying reagent into ground waters

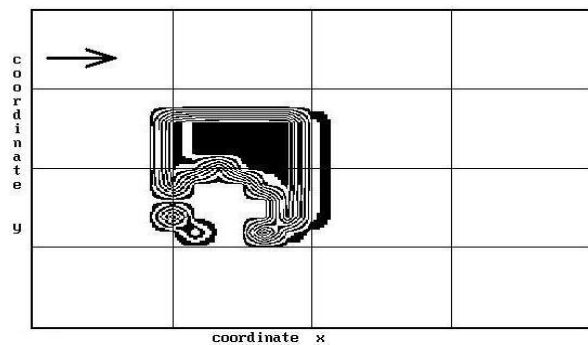


Fig. 2. Contamination zone in ground waters,  $t=5$  (time is dimensionless)

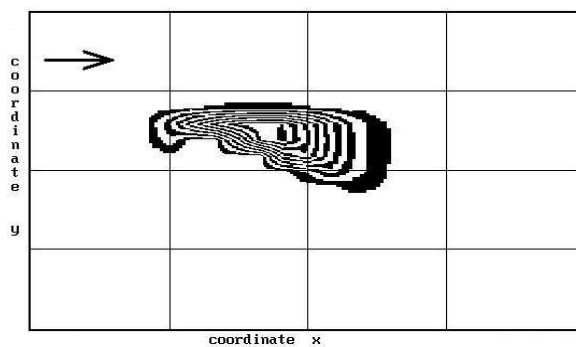


Fig. 3. Contamination zone in ground waters,  $t=15$  (time is dimensionless)

These Figures illustrate the contamination area at different times. As we can see from these Figures the contaminated area is slowly reduced by moving reagent.

**Conclusions.** A numerical model to compute acid zone elimination in ground waters using reagent supply is proposed. The reagent is supplied from well. The model is based on the 2-D mass transport equation and equation of filtration. The future work in this field will be connected with development of 3D filtration model to simulate ground waters dynamics and pollution.

REFERENCES:

1. Беляев, Н. Н. Компьютерное моделирование динамики движения и загрязнения подземных вод / Беляев Н. Н., Коренюк Е. Д., Хрущ В. К. – Д.: Наука и образование, 2001. – 156 с.
2. Беляев, Н. Н. Применение поглощающих скважин для подавления развития зоны загрязнения подземного потока / Н. Н. Беляев, Л.Ф. Долина, И. В. Калашников // Екологія і природокористування. – 2004. – Вип. 7. – С. 181–186.
3. Гольдберг, В. М. Гидрогеологические основы охраны подземных вод от загрязнения / Гольдберг В. М., Газда С. – М.: Недра, 1984. – 262с.
4. Крайнов, С.Р. Геохимические модели прогноза формирования качества подземных вод (обзор возможностей и ограничений). Водные ресурсы. – 1999, Т.26, №3. – с.322–334.
5. Лукнер, Л. Моделирование миграции подземных вод / Лукнер Л., Шестаков В. М. – М.: Недра, 1986. – 208 с.
6. Мироненко, В. А. Охрана подземных вод в горнодобывающих районах (опыт гидрогеологических исследований) / Мироненко В. А., Румынин В. Г., Учаев В. К.– Л.: Недра, 1980. – 320 с.
7. Олейник, А. Я. Геогидродинамика дренажа. – К.: Наук. думка, 1981. – 284 с.
8. Пшинько, А. Н. Эколого-гидрогеологическое обоснование природоохранных мероприятий

при ликвидации последствий аварийных разливов / А. Н. Пшынко, Н. Н. Беляев, И. В. Калашников – Д.: Нова ідеологія, 2011. – 173 с.

### Беляева В. В., Перкин В. С., Якубовская З. Н. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛИКВИДАЦИИ КИСЛОТНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ В ПОДЗЕМНЫХ ВОДАХ

Разработка численной модели для быстрого расчета процесса нейтрализации загрязнения в подземных водах. Нейтрализация проводится путем подачи реагента через скважины в подземный поток. Построенная модель, основана на уравнениях фильтрации и геомиграции. Для численного решения моделирующих уравнений используются разностные схемы. Разработан пакет программ на алгоритмическом языке ФОРТРАН. Представлены результаты вычислительного эксперимента по исследованию динамики процесса нейтрализации загрязнения в подземных водах. Разработанная модель может быть использована для выбора оптимального режима ликвидации загрязнения в подземных водах.

**Ключевые слова:** загрязнение подземных вод; численное моделирование; нейтрализация.

### Біляєва В. В., Перкін В. С., Якубовська З. М. ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЛІКВІДАЦІЇ КИСЛОТНОГО ЗАБРУДНЕННЯ В ПІДЗЕМНИХ ВОДАХ

Розробка чисельної моделі для швидкого розрахунку процесу нейтралізації забруднення в підземних водах. Нейтралізація проводиться шляхом подачі реагенту через свердловини до підземного потоку. Побудована модель, заснована на рівняннях фільтрації і геоміграції. Для чисельного розв'язання моделюючих рівнянь використовуються різницеві схеми. Розроблено пакет програм на алгоритмічній мові ФОРТРАН. Представлені результати обчислювального експерименту по дослідженню динаміки процесу нейтралізації забруднення в підземних водах. Розроблена модель може бути використана для вибору оптимального режиму ліквідації забруднення в підземних водах.

**Ключові слова:** забруднення підземних вод; чисельне моделювання; нейтралізація.

УДК 519.6:504.3.054

**Біляєв М. М.,**

*Дніпропетровський національний університет залізничного транспорту ім. академіка В. Лазаряна,  
(вул. Лазаряна, 2, Дніпро, 49000, Україна; e-mail: [berlovaalexandrr@gmail.com](mailto:berlovaalexandrr@gmail.com))*

**Русаківа Т. І.**

*Дніпровський національний університет ім. Олеса Гончара,  
(пр-т Гагаріна, 72, Дніпро, 49000, Україна)*

## ОЦІНКА СТАНУ АТМОСФЕРНОГО ПОВІТРЯ В ПРОМИСЛОВІЙ ЗОНІ

Розробка методики чисельного розрахунку для дослідження та оцінки рівня забруднення атмосферного повітря за рахунок діяльності Дніпровського меткомбінату та ПАТ Євраз Дніпродзержинського коксохімічного заводу, яка базується на математичній моделі для розрахунку концентрації забруднювача (діоксиду сірки), що враховує процеси хімічної трансформації діоксиду сірки в атмосфері. Розв'язання рівняння конвективно-дифузійного переносу домішки (забруднювача) виконується із застосуванням неявних різницевих схем. Створено програмне забезпечення, яке дозволяє проводити ряд обчислювальних експериментів по дослідженню зон забруднення атмосферного повітря викидами діоксиду сірки підприємствами м. Каменського. У результаті виконання розрахунків визначено райони, які найбільш схильні до забруднення з урахуванням певних метеорологічних умов. Проведені дослідження необхідні для екологічно безпечного функціонування вказаних підприємств, що впливають на навколишнє середовище.

**Ключові слова:** промислові підприємства, інтенсивність викиду забруднювача, концентрація забруднюючої речовини, хімічна трансформація, рівняння переносу домішки, чисельна модель.

**Постановка проблеми.** Металургія залишається головною промисловою галуззю України, на яку припадає більше третини валютних надходжень країни. За даними Всесвітньої асоціації виробників сталі (Worldsteel) за 11 місяців 2016 року наша країна утримувала 10-е місце в світовому рейтингу виробництва сталі. Вітчиз-

няні заводи виробили 22,2 млн. тонн, показавши зростання на 5,6 % в порівнянні з 2015 роком. У той же час Україна втрачає зарубіжні ринки залізничної сировини, перш за все китайський, звідки її витісняють Австралія та Бразилія. Частково втрата китайського ринку була компенсована зростанням поставок до Сербії, Японії, Кореї,