

В.С. КРЕМЕЗ, кандидат фізико-математичних наук  
Інститут гідромеханіки Національної академії наук України

## МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВНУТРІПЛАСТОВОГО ОЧИЩЕННЯ ЗАБРУДНЕНИХ ҐРУНТОВИХ ВОД ЗА ДОПОМОГОЮ ШТУЧНИХ ГЕОХІМІЧНИХ БАР'ЄРІВ

*Запропоновано математичну модель і метод розрахунку штучних геохімічних бар'єрів, що застосовуються для внутріпластового очищення забруднених ґрунтових вод. Приведено приклад розрахунку для визначення товщини фільтра.*

**Ключові слова:** забруднення; ґрунтові води; математична модель; геохімічний бар'єр.

*Предложена математическая модель и метод расчета искусственных геохимических барьеров, которые используются для внутривластовой очистки загрязненных грунтовых вод. Приведен пример расчета для определения толщины фильтра.*

**Ключевые слова:** загрязнение; грунтовые воды; математическая модель; геохимический барьер.

*The mathematical model and the numerical method for the calculation of properties of artificial geochemical barriers used for intra-stratal cleaning of ground water contamination. The example of calculation to determine the thickness of filter is demonstrated.*

**Key words:** pollution; groundwater; mathematical model; geochemical barrier.

**Вступ.** Для внутрішньопластового очищення ґрунтових вод від різноманітних органічних і неорганічних сполук в багатьох промислово розвинутих країнах за останні роки набули поширення штучні геохімічні бар'єри (ШГБ) [7,8]. Зазвичай, ШГБ являють собою проникні вертикальні секції, що заповнені (завантажені) спеціально підібраним фільтруючим матеріалом із високою сорбційною ємністю і вмонтовані в досконалу або недосконалу за ступенем розкриття пласту [6] "стіну в ґрунті" (рис. 1).

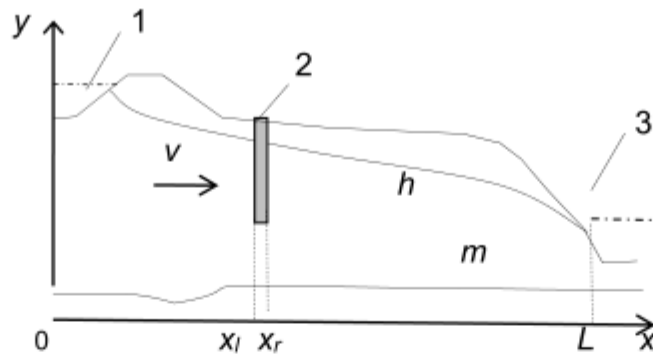


Рис.1. Схема області фільтрації:  
 1 – хвостосховище; 2 – ШГБ; 3 – річка;  
 $v, h, m, L, x, x_l, x_r$  – пояснення за текстом

У випадках бокового надходження забруднених вод в ґрунтові потоки невеликої потужності (до 10...12 м) можливо застосування як досконалих, так і недосконалих бар'єрів. Слід зазначити, що застосування ШГБ найбільш ефективно і економічно доцільно в тих випадках, якщо забруднення ґрунтових вод відбувається внаслідок інфільтраційного живлення з різноманітних джерел (недостатньо якісно екрановані накопичувачі рідких стоків, твердих відходів, хвостосховища, золівдвали та їн.).

При таких умовах надходження забруднень області максимальних концентрацій розчинених сполук локалізовані поблизу вільної поверхні ґрунтових вод, тому при згаданих техногенних особливостях формування міграційних потоків можливо застосування недосконалих ШГБ, заглиблених під рівень ґрунтових вод на 0,5...2 м в залежності від амплітуди коливання РГВ, що дозволяє зменшити витрати на спорудження і експлуатацію ШГБ.

Таким чином, ШГБ доцільно розглядати як водоочисну споруду, що занурена безпосередньо в потік забруднених ґрунтових вод. Слід зазначити, що на відміну від умов роботи водоочисних фільтрів на станціях водоочищення процеси в фільтрувальних секціях відбуваються при змінних швидкостях і напорах, при змінних концентраціях забруднень на вході в фільтрувальну секцію, а також під впливом багатьох інших природних і техногенних факторів. Методи математичного моделювання процесів внутріпластового очищення ґрунтових вод розроблено вкрай недостатньо, свідченням чого є, наприклад, робота [8], в якій використана комерційна програма MODFLOW (що має суттєві обмеження), за допомогою якої проведено моделювання ШГБ для деяких найпростіших умов.

**Постановка задачі.** В основу математичної моделі описаних процесів покладено фундаментальні рівняння фільтрації і масопереносу із урахуванням масообміну сполук в рідкій фазі і сорбованих твердою фазою ґрунту і адсорбенту, що широко використовуються в багатьох наукових роботах і достатньо докладно викладено в монографіях і навчальних посібниках, наприклад [3]. У випадку одновимірної за простором

математичної моделі процесів справедлива наступна система нелінійних рівнянь:

- рівняння нестационарної фільтрації ґрунтових вод у вигляді [2]

$$\mu \left( 1 + (h-m) \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k(h-m) \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \varepsilon, \quad V = -k(x) \frac{\partial h}{\partial x}; \quad (1)$$

- рівняння конвективної дифузії із урахуванням масообміну

$$n_a \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right) - V \frac{\partial C}{\partial x} - \rho \gamma (K_F C - S) + \varepsilon \frac{C_s - C}{h-m}; \quad (2)$$

- рівняння масообміну між сполуками в рідкій і твердій фазах при лінійній ізотермі сорбції Генрі (як одна з можливих форм міжфазних перетворень)

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \gamma (K_F C - S) \quad 0 < x < L. \quad (3)$$

В записаних вище рівняннях і співвідношеннях прийняти наступні позначення:  $t$  – час, доба;  $x$  – просторова координата вздовж лінії току, м.;  $h = h(x, t)$  і  $m = m(x)$  – рівень ґрунтових вод (РГВ) і відмітка водоупору відповідно, м;  $\mu$  – коефіцієнт нестачі насичення (водовіддачі);  $k = k(x)$  – коефіцієнт фільтрації ґрунту і фільтруючого елементу ШХБ, м/добу;  $\varepsilon = \varepsilon(x, t)$  – величина інфільтраційного живлення ґрунтових вод внаслідок атмосферних опадів і втрат з різноманітних техногенних джерел, м/доба;  $n_a = n_a(x)$  – активна (за рахунок зв'язаних між собою порових каналів і відкритих мікропорожнин в ґрунті і сорбенті) пористість;  $L$  – довжина області фільтрації, м.;  $C = C(x, t)$  – масова концентрація розчинених солей в рідкій фазі, мг/л (або мг/дм<sup>3</sup>);  $S = S(x, t)$  – масова концентрація солей в твердій фазі, мг/кг;  $\rho$  – щільність сорбенту, кг/дм<sup>3</sup>;  $D$  – коефіцієнт конвективної дифузії розчинених солей, ( $D = D_m + \delta|V|$ ), м<sup>2</sup>/доба;  $D_m$  – коефіцієнт молекулярної дифузії солей, м<sup>2</sup>/доба;  $\delta = \delta(x)$  – коефіцієнт гідродисперсії, м;  $\gamma = \gamma(x)$  – коефіцієнт швидкості адсорбції (десорбції), 1/доба;  $K_F = K_F(x)$  – коефіцієнт адсорбції, дм<sup>3</sup>/кг;  $C_s$  – концентрація забруднення в атмосферних опадах або поверхневому джерелі інфільтраційного живлення, мг/л (або мг/дм<sup>3</sup>).

На відміну від згаданих вище робіт в моделі (1)-(3) ураховуються зміни за простором параметрів рівнянь, що характеризують фільтраційні і фізико-хімічні властивості ґрунтів. Крім того, для тих значень просторової координати, де розташований ШГБ ( $x_l < x < x_r$ ), відповідні параметри характеризують властивості загрузки фільтрувальної секції,  $x_l, x_r$  – координати ШХБ (рис. 1).

Рівняння (1)- (3) розв'язуються при наступних початкових умовах:

$$h(x, 0) = h^0(x), \quad C(x, 0) = C^0(x), \quad S(x, 0) = S^0(x), \quad 0 < x < L, \quad (4)$$

де  $h^0(x), C^0(x), S^0(x)$ , – значення невідомих функцій в початковий момент часу.

Для рівняння фільтрації (1) задаються добре відомі граничні умови 1,2,3 роду, що докладно викладені, наприклад, в монографії [3]. Для рівняння масопереносу на вхідній границі, наприклад,  $x = 0$ , частіше за все, задаються граничні умови 1 роду або умови 3 роду (умови Данкверста-Бреннера) [3].

$$C(0,t) = C_0(t) \quad \text{or} \quad (C(0,t) - C_0)V = D \frac{\partial C(0,t)}{\partial x}, \quad (5)$$

де  $C_0 = C_0(t)$  – задана концентрація солей во вхідному перетині потоку.

У вихідному перетині потоку, наприклад при  $x = L$ , для рівняння масопереносу, зазвичай, задається умова 2 роду [3]

$$\frac{\partial C(L,t)}{\partial x} = 0. \quad (6)$$

Відзначимо, що при малих значеннях числа Пекле  $Pe < 0,1$ , де  $Pe = \frac{VL}{D}$

для рівняння масопереносу (2) також можуть бути використані граничні умови 1,2,3 роду.

**Розв'язання задачі методом кінцевих різниць.** Рівняння (1)-(3) відносяться до числа нелінійних диференціальних рівнянь в часткових похідних параболічного типу, розв'язання яких для практично важливих випадків можливо отримати тільки наближеними методами. Найбільше поширення для розв'язання рівнянь розглянутого типу отримав теоретично обґрунтований і добре показавший себе в практичних розрахунках метод кінцевих різниць.

Запишемо кінцево-різницевої апроксимації рівнянь (1)-(3) на сітці з постійним кроком за часом і змінним кроком по просторовій координаті  $x$  (нерівномірна за простором різницева сітка). Застосування нерівномірної сітки обумовлено необхідністю урахування локальних неоднорідних по властивостям зон області моделювання. Наприклад, протяжність області моделювання для реальних задач може складати від декількох сотень метрів до декількох тисяч метрів, в той час як товщина фільтрувальної секції, зазвичай, складає 0,2...0,6 м [7-8].

Для дискретного представлення рівнянь (1) і (3) була використана неявна різницева схема:

– кінцево-різницевої аналог рівняння фільтрації (1) відповідно до робіт [1-4] має вигляд:

$$\mu A \frac{h_i^{j+1} - h_i^j}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta x_c} \left( F_i^j \frac{h_{i+1}^{j+1} - h_i^{j+1}}{\Delta x_i} - F_{i-1}^j \frac{h_i^{j+1} - h_{i-1}^{j+1}}{\Delta x_{i-1}} \right) + \varepsilon, \quad (7)$$

$$F_i^j = \frac{(k_{i+1}^j + k_i^j)}{2} \frac{(h_{i+1}^j + h_i^j - m_{i+1} - m_i)}{2}, \quad F_{i-1}^j = \frac{(k_{i-1}^j + k_i^j)}{2} \frac{(h_i^j + h_{i-1}^j - m_i - m_{i-1})}{2},$$

$$A = 1 + \frac{h_i^j - m_i}{\Delta x_c} \left( \frac{h_{i+1}^j - h_i^j}{\Delta x_i} - \frac{h_i^j - h_{i-1}^j}{\Delta x_{i-1}} \right),$$

$$V_i^j = -\frac{(k_{i+1}^j + k_i^j)(h_{i+1}^{j+1} - h_i^{j+1})}{2 \Delta x_j}; \quad q_i^j = V_i^j \frac{(h_{i+1}^j + h_i^j - m_{i+1} - m_i)}{2}.$$

Дискретний аналог рівняння масопереносу (2) з використанням різниці “проти потоку” [4] при апроксимації конвективної складової згаданого рівняння має вигляд:

$$n_a \frac{C_i^{j+1} - C_i^j}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta x_c} \left( D_i^j \frac{C_{i+1}^{j+1} - C_i^{j+1}}{\Delta x_i} - D_{i-1}^j \frac{C_i^{j+1} - C_{i-1}^{j+1}}{\Delta x_{i-1}} \right) - V_i^j \left\{ \begin{array}{l} \frac{C_i^{j+1} - C_{i-1}^{j+1}}{\Delta x_{i-1}}, \quad V_i^j \geq 0, \\ \frac{C_{i+1}^{j+1} - C_i^{j+1}}{\Delta x_i}, \quad V_i^j \leq 0, \end{array} \right.$$

$$- (K_F C_i^j - S_i^j) + \varepsilon \frac{C_s - C_i^{j+1}}{h_i^{j+1} - m_i}. \quad (8)$$

Кінцево-різницеву апроксимацію рівняння масообміну (3) запишемо в звичайному вигляді:

$$\frac{S_i^{j+1} - S_i^j}{\Delta t} = (K_F C_i^j - S_i^j), \quad (9)$$

де  $i, j$  – номери просторового і часового вузлів різницевої сітки;  $\Delta t$  – крок за часом;  $\Delta x_i, \Delta x_{i-1}, \Delta x_c$ , – “лівий”, “правий” і центрований крокі за простором;

$\Delta x_c = 0,5 \cdot (\Delta x_i + \Delta x_{i-1})$ ;  $h_i^{j+1}, h_i^j$  значення невідомих функцій відміток РГВ в розрахунковому просторовому вузлі із номером  $i$  в розрахунковий момент часу  $t^{j+1}$  і попередній момент часу  $t^j$ ;  $C_i^{j+1}, C_i^j$  – сіткові значення концентрацій в рідкій фазі;  $S_i^{j+1}, S_i^j$  – сіткові значення концентрацій в твердій фазі;  $V_i^j, q_i^j$  – значення швидкості і витрати фільтраційного потоку у вузлах сітки.

Різницеві рівняння (7), (8) приводяться до виду:

$$a_1 f_{i-1}^{j+1} + a_2 f_i^{j+1} + a_3 f_{i+1}^{j+1} = d_1, \quad (10)$$

де для рівняння (1)  $f_i^{j+1} = h_i^{j+1}$ , а для рівняння (2)  $f_i^{j+1} = C_i^{j+1}$ .

Значення коефіцієнтів рівняння (10) для означених випадків легко можливо знайти, порівнюючи рівняння (7) і (10), а також (8) і (10). Рівняння (10) з урахуванням різницевої апроксимації граничних умов були розв’язані найбільш зручним для подальшого складання обчислювальних програм для ПК методом прогонки, який докладно описаний для розв’язання рівнянь подібного типу в монографії [1].

Для реалізації описаного чисельного методу розрахунків складена і відлагоджена програма для ПК, за допомогою якої проведено низку чисельних досліджень для модельних задач, що відображають значну кількість реальних умов, в яких можливо спорудження ШГБ.

**Приклад розв'язання модельної задачі.** Розглядається фільтрація забруднених вод з хвостосховища, уріз води якого в розрахунковому перетині розташовано на границі  $x=0$ , в малу річку, що розташована на правій (умовно) границі області моделювання  $L=116,48$  м. Технологічні води хвостосховища забруднені різноманітними сполуками, зокрема концентрація цинку складає 14 мг/л, в той час як згідно до деяких санітарних норм ГМК (гранично можлива концентрація) цинку у воді складає 3 мг/л.

Метою моделювання було вивчення міграції цинку в ґрунтових водах при наявності ШГБ, що розташований на відстані 67,94 м від лівої границі області фільтрації для 3 значень товщини фільтрувальної секції: 0,2; 0,4; 0,6 м. В якості завантаження фільтра розглядається вугільний сорбент "МИУ-С", властивості якого докладно викладено в роботі [5].

Водоупорний шар горизонтальний і розташований на позначці  $m=0$ . Початкове положення ґрунтових вод – статичний горизонт води  $h^0=7$  м; приймалося, що рівень води у хвостосховищі в початковий момент часу миттєво підвищується до позначки  $h_0=12$  м і залишається постійним на протязі всього розрахункового періоду часу  $t_{\max}=360$  діб. Початкова концентрація цинку у сорбенті складала  $S^0=1$  мг/кг.

На правій границі області моделювання значення невідомих функцій приймаються постійними і рівними їх значенням в початковий момент часу, тобто  $h_L=7$  м,  $C_L=0,1$  мг/л. Параметри рівняння масопереносу приймалися наступними:  $D_m=5 \cdot 10^{-5}$  м<sup>2</sup>/добу,  $\delta=0,01$  м.

Вихідні дані для природнього ґрунту приймалися наступними:

$k=3,2$  м/добу;  $\mu=0,23$ ;  $\varepsilon=0$ ;  $n_a=0,35$ ;  $\gamma=0,000011$ /добу;

$K_F=10$  дм<sup>3</sup>/кг. Щільність сухого ґрунту складає  $\rho=1,6$  кг/дм<sup>3</sup>.

Параметри фільтрувальної загрузки мали наступні значення:  $k=120$  м/добу;  $\mu=0,18$ ;  $\varepsilon=0$ ;  $n_a=0,40$ ;  $\gamma=0,000051$ /добу;  $K_F=10000$  дм<sup>3</sup>/кг. Насипна щільність сухого сорбенту  $\rho=0,7$  кг/дм<sup>3</sup> [5].

Деякі результати розрахунків наведені на рис. 2-4, зокрема, на рис. 2, 3 показані зміни в часі концентрації цинку в рідкій і твердій фазах, відповідно, у фільтрувальній секції і у природньому ґрунті біля неї. Як видно з цих рисунків концентрації забруднень по товщині фільтру в напрямку потоку зменшуються, а із часом зростають, що свідчить про накопичення сорбованого цинку в матеріалі завантаження.

На рис. 4 показано зміни ступеню очищення забруднених вод від цинку відносно ГМК  $C_{ex}/C_{bac}$ . ( $C_{ex}$  – концентрація солей цинку на виході з фільтрувальної секції,  $C_{bac}$  – ГМК цинку в питній воді. В наведеному прикладі прийнято  $C_{bac}=3$  мг/л). Аналіз результатів розрахунків показав, що на кінець розрахункового періоду часу (360 діб) ступінь очищення ґрунтової води, що надходить у річку, від цинку при товщині фільтрувальної секції 0,2; 0,4; 0,6 м

складала 2,1; 4,1; 7,9 відповідно. Для тих же значень товщин перевищення вихідної концентрації над ГМК безпосередньо за бар'єром, що показана на рис.4, а також той, що надходить до річки, складало, відповідно, 1,97 (1,91); 1,02 (0,98); 0,53 (0,51).

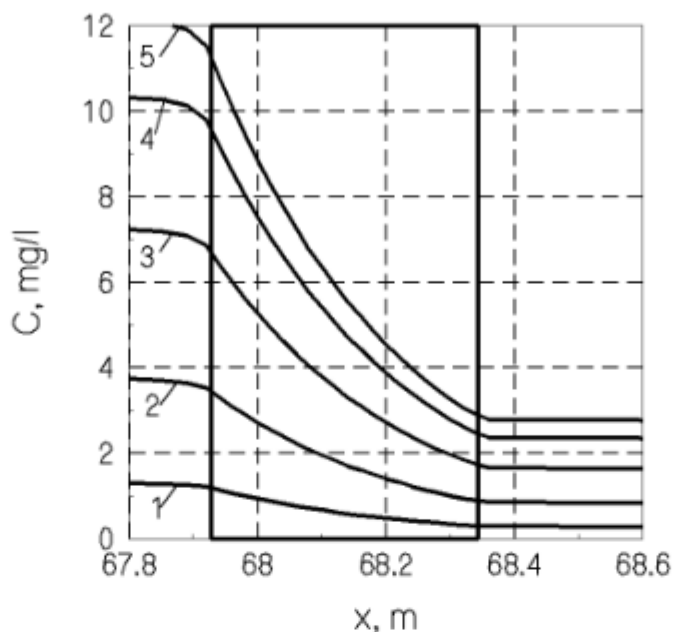


Рис. 2. Зміни в часі концентрації цинку в рідкій фазі у фільтрувальній секції і у природньому ґрунті біля неї

1 –  $t = 140$ ; 2 –  $t = 1160$ ; 3 –  $t = 180$ ; 4 –  $t = 200$ ; 5 –  $t = 220$  діб

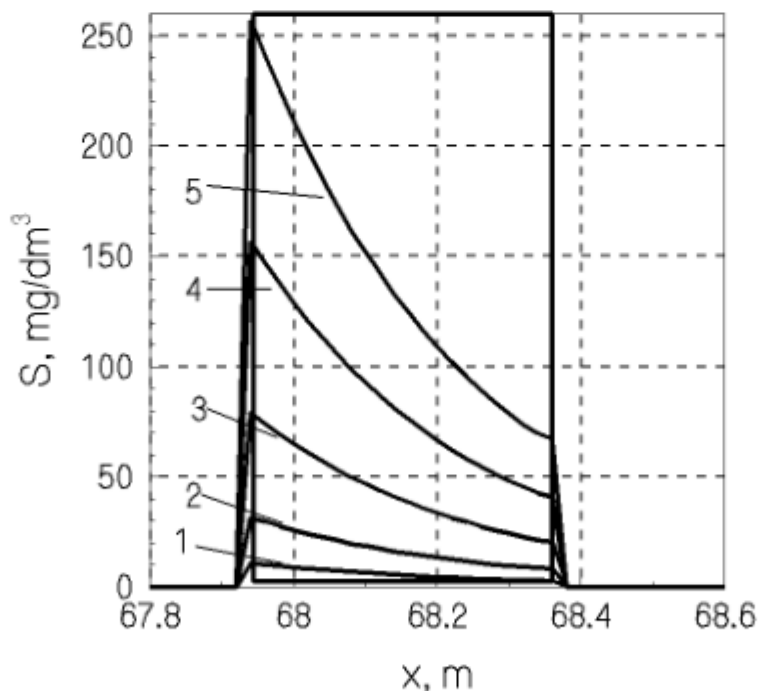


Рис. 3. Зміни в часі концентрації цинку у твердій фазі у фільтрувальній секції і у природньому ґрунті біля неї

1 –  $t = 140$ ; 2 –  $t = 1160$ ; 3 –  $t = 180$ ; 4 –  $t = 200$ ; 5 –  $t = 220$  діб

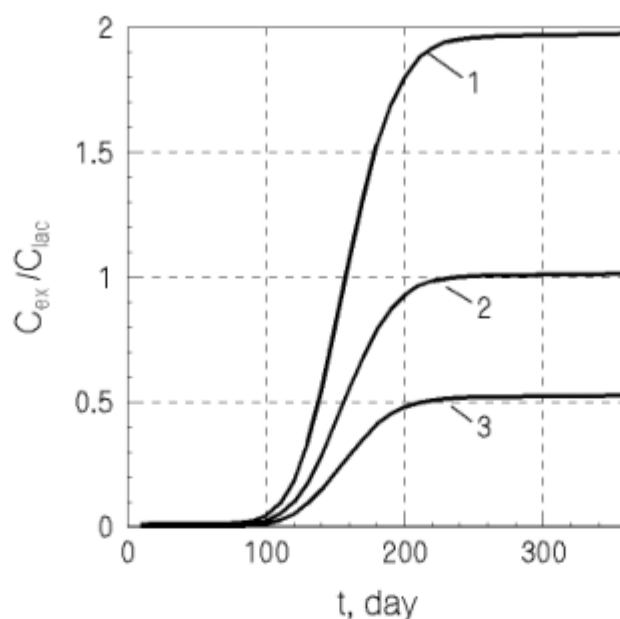


Рис. 4. Зміни ступеню очищення забруднених вод від цинку відносно ГМК.  
Товщина фільтрувальної секції: 1 – 0,2 м; 2 – 0,4 м; 3 – 0,6 м

Таким чином, на кінець розрахункового періоду часу фільтр товщиною 0,2 м не забезпечує очищення ґрунтових вод до потрібних значень, фільтр товщиною 0,4 м працює в критичному режимі, а фільтр товщиною 0,6 м ще має помітний ресурс роботи.

**Висновки.** Запропонована математична модель фільтрації і масо переносу із урахуванням сорбції розчинених сполук частинками ґрунту і сорбенту в потоці ґрунтових вод дозволяє теоретично вивчити закономірності згаданих процесів при наявності ШГБ. Розрахунки за описаною методикою дозволяють обрати оптимальні параметри ЩГБ, зокрема товщину фільтрувальної секції для забезпечення необхідного ступеню внутріпластового очищення ґрунтових вод від різноманітних розчинених забруднень.

#### Список літератури

1. Добронравов А.А., Кремез В.С., Сирый В.С. Расчет на ЭВМ нестационарной фильтрации в районах гидротехнических сооружений. – К: Наукова думка, 1980. – 184 с.
2. Кремез В.С. Моделирование фильтрации грунтовых вод на основе уточненного уравнения Буссинеска // Гідромеліорація та гідротехнічне будівництво. – Рівне: НУВГП. – 2007, вып 31. – С. 160-165
3. Методы прогноза солевого режима грунтов и грунтовых вод. // Под. ред. Н.Н. Веригина. – М.: Колос, 1979. – 336 с.
4. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. – М.: Мир, 1980. – 615 с.



5. *Тарнопольская М.Г.* Физико-химические основы очистки воды угольным сорбентом МИУ-С //Водоснабжение и санитарная техника, 2006. – № 6.
6. *Шестаков В.М.* Динамика подземных вод. – М.: Изд-во МГУ, 1973. – 326 с.
7. *An In Situ Permeable Reactive Barrier for the Treatment of Hexavalent Chromium and Trichloroethylene in Ground Water: V.1. Design and Installation* //United States Environmental Protection Agency // EPA/600/R-99/095a ,September 1999. – 111 p.
8. *Scott K.C., Folkes D. J.* Groundwater modeling of a permeable reactive barrier to enhance system performance //Proceedings of the 2000 Conference on Hazardous Waste Research. – P. 348-355.