

**МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВИЛУЧЕННЯ
ЗАБРУДНЕНЬ З ҐРУНТОВИХ ВОД ЗА ДОПОМОГОЮ
СОРБЦІЙНИХ БАР'ЄРІВ**

**Кремез В.С., Штамковський В.Є., Харламова О.В.,
Курганська С.М.**

Інститут гідромеханіки НАН України, Київ

Запропоновано математичну модель і метод розрахунку сорбційних бар'єрів, що застосовуються для внутріпластового очищення забруднених ґрунтових вод.

Ключові слова: ґрунтові води, математична модель, сорбційний бар'єр.

Предложена математическая модель и метод расчета сорбционных барьеров, которые используются для внутрипластовой очистки загрязненных грунтовых вод.

Ключевые слова: грунтовые воды, математическая модель, сорбционный барьер.

The mathematical model and the numerical method for the calculation of properties of sorption's barriers used for intra-stratal cleaning of ground water contamination.

Key words: pollution, groundwater, mathematical model, sorption's barrier

Для внутріпластового очищення ґрунтових вод від різноманітних органічних і неорганічних сполук в багатьох промислово розвинутих країнах за останні роки набули поширення сорбційні бар'єри (СБ) [3]. Зазвичай, СБ являють собою проникні вертикальні секції, що заповнені (завантажені) спеціально підібраним фільтруючим матеріалом з високою сорбційною ємністю і вмонтовані в досконалу або недосконалу за ступенем розкриття пласту "стіну в ґрунті".

У випадках бічного надходження забруднених вод в потоки ґрунтових вод невеликої потужності (до 10-12 м) можливо застосування як досконалих, так і недосконалих бар'єрів. Слід зазначити, що застосування СБ 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, хвостосховищ, золовідвалів та ін.). 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 СБ, заглиблених під рівень ґрунтових вод на 0.5-2 м в залежності від амплітуди коливання РГВ, що дозволяє зменшити витрати на спорудження і експлуатацію СБ.

Таким чином, СБ 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 водоочистки процеси в фільтрувальних секціях відбуваються при змінних швидкостях, напорах і концентраціях забруднень на вході в сорбційну секцію, а також під впливом багатьох інших природних і техногенних факторів. Методи математичного моделювання процесів внутріпластового очищення ґрунтових вод розроблено вкрай недостатньо, свідченням чого, наприклад, є робота [3], в якій використана комерційна програма MODFLOW (що має суттєві обмеження), за допомогою якої проведено моделювання СБ для деяких найпростіших умов.

В основу математичної моделі описаних процесів покладено фундаментальні рівняння фільтрації і масопереносу з урахуванням масообміну сполук в рідкій фазі і сорбованих твердою фазою ґрунту і сорбенту, що широко використовуються в багатьох наукових роботах і достатньо докладно викладено в навчальних посібниках і монографіях, наприклад [1]. У випадку одновимірної по простору математичної моделі досліджуваних процесів справедлива наступна система нелінійних рівнянь:

- рівняння нестационарної фільтрації ґрунтових вод у вигляді [1]

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

- рівняння конвективної дифузії з урахуванням масообміну

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

- 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 уздовж лінії току, м.; $h = h(x, t)$ і $m = m(x)$ – рівень ґрунтових вод (РГВ) і відмітка водотривкого шару відповідно, м; μ – коефіцієнт нестачі насичення (водовіддачі); $k = k(x)$ – коефіцієнт фільтрації ґрунту і фільтруючого елементу СБ, м/добу; $n_a = n_a(x)$ – 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/дм³); $S = S(x, t)$ – масова концентрація солей в твердій фазі, мг/кг; ρ – щільність сорбенту, кг/дм³; D – коефіцієнт конвективної дифузії розчинених солей, ($D = D_m + \delta|V|$), м²/доба; D_m – коефіцієнт молекулярної дифузії солей, м²/доба; $\delta = \delta(x)$ – коефіцієнт гідродисперсії, м; $\gamma = \gamma(x)$ – коефіцієнт швидкості адсорбції (десорбції), 1/доба; $K_F = K_F(x)$ – коефіцієнт адсорбції, дм³/кг.

На відміну від існуючих наукових робіт в моделі (1)-(3) враховуються зміни по простору параметрів рівнянь, що характеризують фільтраційні і фізико-хімічні властивості ґрунтів. Крім того, для тих значень просторової координати, де розташований СБ ($x_l < x < x_r$) відповідні параметри характеризують фізико-хімічні властивості СБ.

Рівняння (1)- (3) розв'язуються при початкових і граничних умовах, що відповідають конкретним природним і техногенним особливостям формування фільтраційних і міграційних потоків.

Диференціальні рівняння (1)-(3) відносяться до числа нелінійних 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 (МКР).

Для розв'язання задачі використано кінцево-різницеву апроксимацію рівнянь (1) – (3) на сітці з постійним кроком по часу і змінним кроком по просторової координаті x (нерівномірна по простору різницева сітка). Застосування нерівномірної сітки обумовлено необхідністю урахування локальних неоднорідних по

властивостях 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 сорбційного бар'єру, зазвичай, складає 0.2-0.6 м. [3].

Кінцево-різницеві рівняння з урахуванням різницевої апроксимації граничних умов були розв'язані найбільш зручним для подальшого складання обчислювальних програм для ПК методом прогонки, який докладно описаний в багатьох наукових роботах для розв'язання рівнянь подібного типу.

Для реалізації описаного чисельного методу розрахунків складено і відлагоджено програму для ПК, за допомогою якої проведено значну кількість чисельних досліджень для модельних задач, що відображають значну кількість реальних умов, в яких можливо спорудження СБ.

В якості прикладу розглянуто деякі результати моделювання фільтрації 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.

Вихідні дані для природнього ґрунту приймалися наступними:

$k = 3.2$ м/добу; $\mu = 0.23$; $n_a = 0.35$; $\gamma = 0.00001$ 1/добу; $K_F = 10$ дм³/кг. Щільність сухого ґрунту складає $\rho = 1.6$ кг/дм³.

Інші вихідні дані для ґрунту і сорбенту прийняті з робіт [1-3].

Метою моделювання було вивчення міграції цинку в ґрунтових водах при наявності СБ, що розташований на відстані 67.94м від лівої границі області фільтрації для 3 значень товщини СБ: 0.2; 0.4; 0.6 м. В якості завантаження фільтруючого бар'єра пропонується вугільний сорбент "МІУ-С", властивості якого докладно викладені в роботі [2].

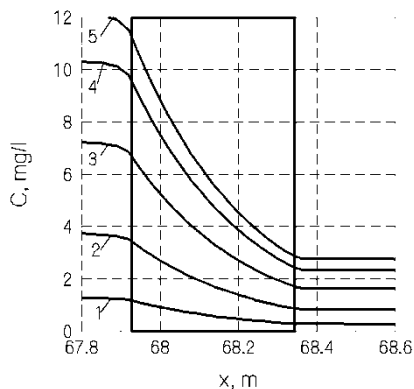
Зміни концентрації цинку в рідкій фазі по товщині СБ показано ша рисунку.

Аналіз результатів розрахунків показав, що при товщині сорбційного бар'єру 0.2; 0.4; 0.6 м перевищення концентрації цинку в ґрунтових водах над ГМК ($C/C_{ГМК}$) безпосередньо за бар'єром, а також той, що надходить до річки (в дужках) складало відповідно 1.97 (1.91); 1.02 (0.98); 0.53 (0.51).

Таким чином, на кінець розрахункового періоду часу сорбційний бар'єр товщиною 0.2м не забезпечує очищення ґрунтових вод до

потрібних значень, бар'єр товщиною 0.4 м працює в критичному режимі, а бар'єр 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 СБ. Розрахунки за описаною методикою дозволяють обрати оптимальні параметри споруди, зокрема товщину сорбційного бар'єру для забезпечення необхідного ступеню внутріпластового очищення ґрунтових вод від різноманітних розчинених забруднень. На підставі моделювання можливо обґрунтування захисту ґрунтових вод в районах розташування криниць або неглибоких свердловин, а також при захисті поверхневих вод ставків і річок.



Зміни концентрації цинку в сорбційному бар'єрі
в моменти часу

1 - $t=140$, 2 - $t=1160$, 3 - $t=180$, 4 - $t=200$, 5 - $t=220$ діб,

1. Методы прогноза солевого режима грунтов и грунтовых вод // Под. ред. Н.Н. Веригина. - М.: Колос, 1979. - 336 с.
2. Гарнопольская М.Г. Физико-химические основы очистки угольным сорбентом МИУ-С // Водоснабжение и санитарная техника, 2006, № 6
3. 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. pp. 348-355.