

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПОДЗЕМНЫХ ВОД

Розроблена чисельна модель розрахунку захисту підземних вод від забруднення у разі використання нейтралізуючого розчину. Модель базується на рішенні двувимірного рівняння фільтрації та геоміграції. Наводяться результати обчислювального експерименту.

Разработана численная модель расчета защиты подземных вод от загрязнения путем использования нейтрализующего раствора. Модель основывается на решении двухмерных уравнений фильтрации и геомиграции. Приводятся результаты вычислительного эксперимента.

A numerical model to calculate the process of ground waters protection from pollution with the use of neutralizer has been proposed. The model is based on the 2-D equations of filtration and admixture transfer. Results of numerical experiment are presented.

Защита безнапорных, первых от поверхности земли, водоносных горизонтов – задача большой важности в области экологической безопасности, т.к. эти горизонты наиболее подвержены техногенному загрязнению, и в частности, при аварийных разливах. С другой стороны, данные горизонты часто используются для водоснабжения в сельской местности. Поэтому совершенствование методов защиты грунтовых вод актуальная задача. Одним из методов защиты является подача в загрязненный водоносный горизонт нейтрализатора (рис. 1).

Обзор научных публикаций, посвященных данному вопросу [1; 3; 5; 6] показал, что отсутствуют расчетные методики, которые можно было бы применить для расчета данного процесса и его оптимизации.

Целью настоящей работы явилось создание эффективной методики экспресс-расчета процесса нейтрализации загрязнителя в подземном водоносном горизонте. Методика расчета базируется на создании численной модели изучаемого процесса.

Разработанная методика расчета адаптирована для решения прикладных задач, поэтому при применении методики используется стандартная гидрогеологическая информация, кроме этого пользователь получает прогнозную информацию в виде, удобном для оперативного анализа и принятия инженерного решения.

**Математическая модель.** Процесс миграции загрязняющего вещества в подземном потоке и нейтрализатора, который подается в поток за счет его фильтрации через зону аэрации или через систему перфорированных труб описывается уравнением [2; 4]:

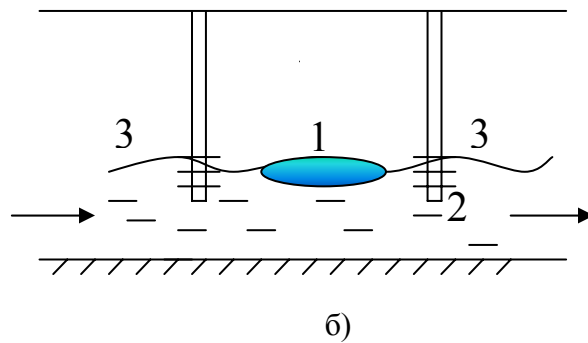
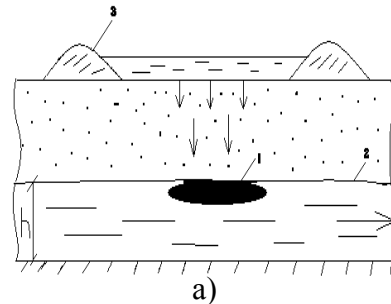


Рис. 1. Схема подачи нейтрализатора в подземный поток: а) путем подачи нейтрализатора на поверхность грунта с последующей его фильтрацией через зоны аэрации; б) путем подачи нейтрализатора через перфорированные трубы (скважины); 1 – зона загрязнения в подземном потоке; 2 – подземный водоносный горизонт; 3 – подача нейтрализатора

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

где  $C$  – концентрация загрязняющего вещества в подземном потоке (нейтрализатора);  $W$  – интен-

сивность поступления нейтрализатора в подземный поток;  $\delta(x - x_i)$ ,  $\delta(y - y_i)$  – дельта-функция Дирака;  $u, v$  – компоненты вектора скорости;  $\mu = (\mu_x, \mu_y)$  – коэффициент диффузии.

Постановка краевых условий для приведенных уравнений рассмотрена в работе [2].

**Метод решения.** Расчет уравнения геомиграции реализуется на прямоугольной разностной сетке.

Рассмотрим неявную разностную схему расщепления [2], которая положена в основу разработанного алгоритма.

Произведем следующую аппроксимацию производных, входящих в уравнение (1):

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

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

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

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

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

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

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

где

$$u^+ = \frac{u + |u|}{2}; \quad u^- = \frac{u - |u|}{2};$$

$$v^+ = \frac{v + |v|}{2}; \quad v^- = \frac{v - |v|}{2}.$$

Следуя работе [2], компоненты скорости потока  $u$  будем задавать на вертикальных гранях разностной ячейки, а компоненты скорости  $v$  – на горизонтальных гранях. Вторые производные аппроксимируем так:

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

$$-\tilde{\mu}_x \frac{C_{ij}^{n+1} - C_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} = M_{xx}^- C^{n+1} + M_{xx}^+ C^{n+1};$$

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

$$-\tilde{\mu}_y \frac{C_{ij}^{n+1} - C_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} = M_{yy}^- C^{n+1} + M_{yy}^+ C^{n+1}$$

В используемых выражениях  $L_x^+$ ,  $L_x^-$ ,  $L_y^+$ ,  $L_y^-$ ,  $M_{xx}^+$ ,  $M_{xx}^-$ ,  $M_{yy}^+$ ,  $M_{yy}^-$  – обозначения разностных операторов.

С учетом этих обозначений разностный аналог уравнения (2) будет иметь вид:

$$\begin{aligned} & \frac{C_{ij}^{n+1} - C_{ij}^n}{\Delta t} + L_x^+ C^{n+1} + L_x^- C^{n+1} + \\ & + L_y^+ C^{n+1} + L_y^- C^{n+1} + \sigma C_{ij}^{n+1} = \\ & = (M_{xx}^+ C^{n+1} + M_{xx}^- C^{n+1} + M_{yy}^+ C^{n+1} + M_{yy}^- C^{n+1}) \end{aligned}$$

Решение данного разностного уравнения расщепляется на 4 шага при интегрировании на временном интервале  $dt$ :

- на первом шаге  $k = \frac{1}{4}$ :

$$\begin{aligned} & \frac{C_{ij}^{n+k} - C_{ij}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^+ C^k + L_y^+ C^k) + \frac{\sigma}{4} C_{ij}^k = \\ & = \frac{1}{4} (M_{xx}^+ C^k + M_{xx}^- C^n + M_{yy}^+ C^k + M_{yy}^- C^n); \end{aligned}$$

- на втором шаге  $k = n + \frac{1}{2}$ ,  $c = n + \frac{1}{4}$ :

$$\begin{aligned} & \frac{C_{ij}^k - C_{ij}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^- C^k + L_y^- C^k) + \frac{\sigma}{4} C_{ij}^k = \\ & = \frac{1}{4} (M_{xx}^- C^k + M_{xx}^+ C^c + M_{yy}^- C^k + M_{yy}^+ C^c); \end{aligned}$$

- на третьем шаге  $k = n + \frac{3}{4}$ ,  $c = n + \frac{1}{2}$ :

$$\begin{aligned} & \frac{C_{ij}^k - C_{ij}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^+ C^k + L_y^+ C^k) + \frac{\sigma}{4} C_{ij}^k = \\ & = \frac{1}{4} (M_{xx}^- C^c + M_{xx}^+ C^k + M_{yy}^- C^k + M_{yy}^+ C^c); \end{aligned}$$

- на четвертом шаге  $k = n + 1$ ,  $c = n + \frac{3}{4}$ :

$$\frac{C_{ij}^k - C_{ij}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^- C^k + L_y^- C^k) + \frac{\sigma}{4} C_{ij}^k =$$

$$= \frac{1}{4} (M_{xx}^- C^k + M_{xx}^+ C^c + M_{yy}^- C^c + M_{yy}^+ C^k).$$

В данные разностные соотношения входит «возмущенный» коэффициент диффузии  $\tilde{\mu}$  [4].

Преимуществом данной схемы расщепления является то, что на каждом дробном шаге неизвестное значение концентрации загрязняющего вещества определяется по методу бегущего счета. Разностная схема является абсолютно устойчивой на каждом дробном шаге и легко программируется.

**Практическая реализация.** Практическое применение разработанной модели рассмотрено на следующем примере.

Произошёл аварийный разлив серной кислоты, в результате которого в подземном потоке образовалась зона загрязнения. Зона загрязнения подземных вод имеет в плане сложную форму (рис. 2), с характерными размерами: максимальная длина – 12 м, максимальная ширина – 4,5 м, минимальная ширина – 3 м. Среднее значение концентрации загрязнителя составляет  $50 \text{ кг/м}^3$ . Гидрологические параметры потока таковы: поверхностная пористость – 0,3; скорость фильтрации подземного потока –  $V = 0,15 \text{ м/сут}$ ; направление потока  $\alpha = 45^\circ$ ;  $\sigma = 0$ ; средняя глубина потока – 7 м;  $\mu = 0,01V$ . Размеры расчетной области  $50 \times 32 \text{ м}$ . Для ликвидации зоны загрязнения в подземном потоке принято решение о подачи нейтрализующего раствора  $\text{Na}_2\text{CO}_3$ . Нейтрализатор может подаваться в подземный поток путем фильтрации его с поверхности земли через зону аэрации или через систему перфорированных труб.

Рассматриваются следующие сценарии ликвидации зоны загрязнения в подземном потоке:

**Вариант 1.** Зона подачи нейтрализатора имеет в плане форму квадрата (рис. 4, зона А) размером  $6 \times 6 \text{ м}$ ; интенсивность подачи нейтрализатора составляет  $q = 333 \text{ кг/м}^2/\text{сут}$ .

**Вариант 2.** Параметры данного сценария аналогичны варианту 1, но интенсивность подачи нейтрализатора увеличилась и составляет  $q = 1666 \text{ кг/м}^2/\text{сут}$ .

**Вариант 3.** Зона подачи нейтрализатора имеет форму прямоугольника (рис. 4, зона А) размером  $6 \times 4,5 \text{ м}$ ; интенсивность подачи нейтрализатора составляет  $q = 1666 \text{ кг/м}^2/\text{сут}$ , однако зона подачи нейтрализатора смещена от области загрязнения в сторону, т. е. данный вариант моделирует «неудачное» расположение зоны подачи.

**Вариант 4.** Зона подачи нейтрализатора аналогична варианту 3; интенсивность подачи нейтрализатора составляет  $q = 1666 \text{ кг/м}^2/\text{сут}$ , однако подача нейтрализатора осуществляется только на временном интервале  $[0,1 - 1 \text{ сут}]$ , т. е. примерно 21 час.

Динамика загрязнения подземного потока показана на рис. 3, 4. Видно, что к моменту времени  $t = 2 \text{ сут}$  произошло вытягивание зоны загрязнения в направлении движения фильтрационного потока и частичное ее расширение.

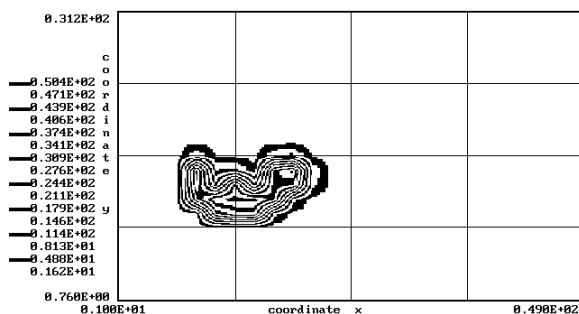


Рис. 2. Зона загрязнения подземного потока для момента времени  $t = 1 \text{ сут}$

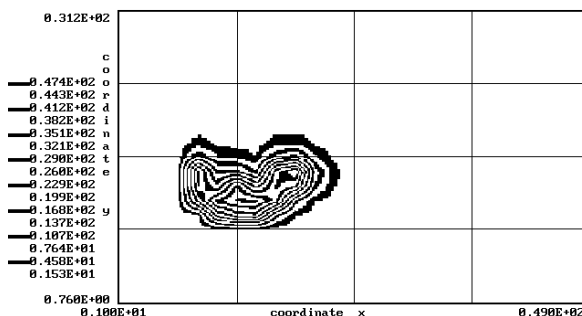


Рис. 3. Зона загрязнения подземного потока для момента времени  $t = 2 \text{ сут}$

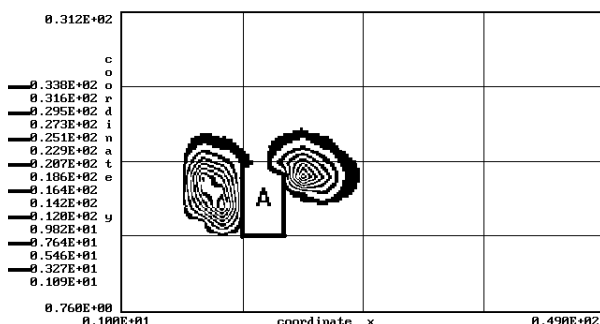


Рис. 4. Зона загрязнения подземного потока (вариант 1: время  $t = 3 \text{ сут}$ )

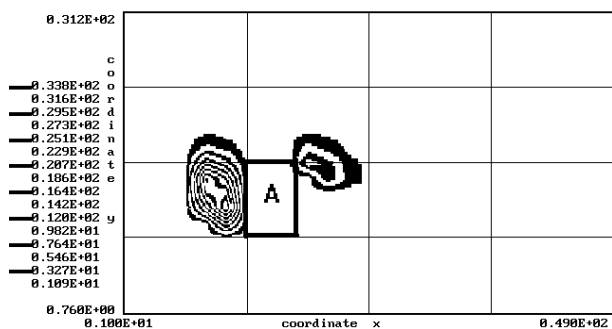


Рис. 5. Зона загрязнения подземного потока после подачи нейтрализатора (вариант 2: время  $t = 3$  сут)

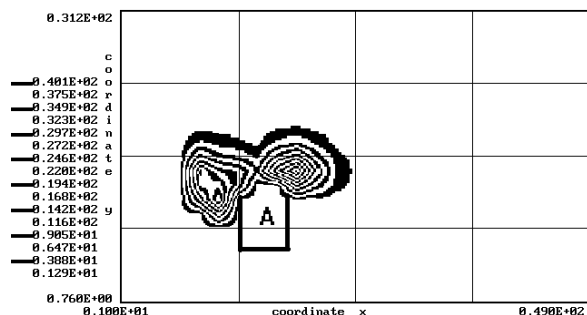


Рис. 6. Зона загрязнения подземного потока после подачи нейтрализатора (вариант 3: время  $t = 3$  сут)

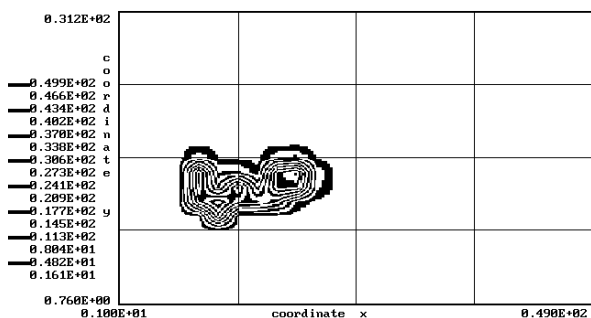


Рис. 7. Зона загрязнения подземного потока после подачи нейтрализатора (вариант 4: время  $t = 1$  сут)

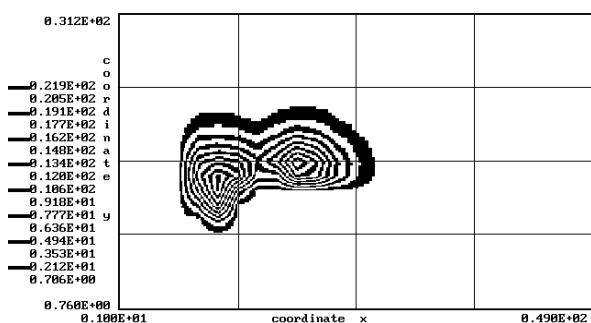


Рис. 8. Зона загрязнения подземного потока после подачи нейтрализатора (вариант 4: время  $t = 6$  сут)

Теперь перейдём к рассмотрению результатов моделирования процесса ликвидации зоны загрязнения, образовавшейся в подземном по-

токе. В момент времени  $t = 0$  началось поступление в подземный поток раствора соды. Процесс взаимодействия кислоты и нейтрализатора описывается следующим уравнением кинетики:



Об эффективности ликвидации зоны загрязнения будем судить о площади оставшейся зоны загрязнения после обработки (на рисунках эта область показана темным цветом).

Из рис. 4, 5 видно, что увеличение интенсивности подачи нейтрализатора на обрабатываемый участок привело к расширению зоны, где ликвидирован загрязнитель. Хорошо видно, что при выбранной схеме подачи нейтрализатора исходная зона загрязнения разбивается на две части. Для третьего варианта (рис. 6) такое разбиение зоны на две части, для сходственного момента времени  $t = 3$  сут не произошло, что объясняется неудачным выбором местоположения обрабатываемого участка. Как видно из рис. 7, 8, в случае подачи нейтрализатора только в течении 20 часов и при «неудачном» расположении зоны обработки (вариант 4) практически не произойдет заметной нейтрализации исходной зоны загрязнения. Эта зона продолжает дальше развиваться и загрязнять подземный поток. Таким образом, разработанная модель позволяет для реальной аварийной ситуации осуществить прогноз возможного уровня загрязнения ВГ и выбрать оптимальную схему и интенсивность подачи нейтрализатора для ликвидации зоны загрязнения.

На втором этапе был проведен физический эксперимент по моделированию процесса нейтрализации зоны загрязнения в грунте после разлива 10 % раствора серной кислоты. Для нейтрализации использовался 10 % раствор щелочи. В процессе взаимодействия образовывался газ, то есть имело место многофазная фильтрация. В качестве грунта использовался крупнозернистый песок. Процесс нейтрализации фиксировался с помощью видеокамеры. На рис. 9, 10. представлены фотографии соответствующие различным моментом времени процесса нейтрализации. На фотографиях отдельно выделены зоны, где происходит выделение газа.



Рис. 9. Зона загрязнения грунта  $t = 2$  с



Рис. 10. Зона загрязнения грунта  $t = 8$  с

Проведенные эксперименты показали возможность применения модели фильтрации однофазного потока для расчета процесса нейтрализации загрязненных кислотой участков, но с применением «обобщенного» коэффициента фильтрации, который меньше по величине, чем коэффициент фильтрации грунта.

**Выводы.** Разработана численная модель на основе которой создан метод расчета процесса ликвидации зоны загрязнения, образовавшейся в безнапорном подземном потоке за счет применения подачи нейтрализатора. Для реализации

предложенного метода используется стандартная гидрогеологическая информация. Метод хорошо приспособлен для практических расчетов, требует около 5 с машинного времени на решение одного варианта задачи. Модель может быть использована для обоснования принятых инженерных решений по защите подземных вод. Дальнейшее совершенствование метода следует осуществлять в направлении его адаптации к процессам фильтрации в неоднородных грунтах.

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Аварии и катастрофы. Предупреждение и ликвидация последствий: Учебное пособие в 5-ти книгах / Под ред. Котляревского В. А. и Забегалева А. В. – М.: Из-во АСВ, 2001.
2. Беляев Н. Н. Компьютерное моделирование динамики движения и загрязнения подземных вод / Н. Н. Беляев, Е. Д. Коренюк, В. К. Хрущ. – Д.: Наука и образование, 2001. – 156 с.
3. Бочевер Ф. М. Основы гидрогеологических расчетов / Ф. М. Бочевер, И. В. Гармонов, А. В. Лебедев, В. М. Шестаков. – М.: Недра, 1965. – 305 с.
4. Згуровский М. З. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде / М. З. Згуровский, В. В. Скопецкий, В. К. Хрущ, Н. Н. Беляев. – К.: Наук. думка, 1997. – 368 с.
5. Полубаринова-Кочина П. Я. Математические методы в вопросах орошения / П. Я. Полубаринова-Кочина, В. Г. Пряжинская, В. Н. Эмих. – М.: Наука, 1969. – 414 с.
6. Ярышкина Л. А. Экологические последствия загрязнения окружающей среды в результате аварий при перевозках неорганических кислот и технологические аспекты их ликвидации / Л. А. Ярышкина, В. Н. Плахотник, А. Н. Бойченко, И. А. Ревина // Ресурсосберегающие технологии в транспорте и гидротехническом строительстве: Межвуз. сб. научных трудов. Новые строительные технологии. – Д.: Арт-Пресс, 1997. – Вып. 3. – С. 103–107.

Поступила в редколлегию 25.09.2007.