

УДК 532.546:536.421

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПОЧВЕННОГО ПОКРОВА

ДЖАМАНБАЕВ М.ДЖ., ЧЫНЫБАЕВ М.К.

КГТУ им. И.Раззакова

izvestiya@ktu.aknet.kg

Рассмотрена математическая модель процесса загрязнения подземной гидросферы через грунтовые воды, дисперсией, адвекцией, химическим или биологическим распадом вредных веществ. На типичном примере для ненасыщенной двухслойной среды произведены расчеты с помощью программного комплекса COMSOL Multiphysics, результаты расчетов представлены в графическом виде.

Mathematical model of the process of pollution of underground hydrosphere through ground water, dispersion, advection, chemical or biological degradation of harmful substances. Typical example of an unsaturated two-layer medium calculation is made using the software system COMSOL Multiphysics, the results of the calculations are presented in graphical form.

Целью данной работы является построение математической модели, описывающей процесс загрязнения подземной гидросферы через фильтрационный поток жидкости и ее численная реализация в COMSOL Multiphysics с визуализацией результатов. Загрязнителями могут быть промышленные отходы, отходы санаторно-курортных учреждений, дачные участки, АЗС, нитраты или химические растворы и т.д. Качественное исследование, прогнозирование процессов загрязнения подземной гидросферы является основной задачей охраны окружающей среды.

Постановка задачи. Рассматривается типичный случай загрязнения подземной гидросферы. В сухой грунт проникает жидкость с определенной концентрацией вредных веществ. Источниками загрязнения могут быть хвостохранилища или локальные источники загрязнения. В данной работе рассматривается случай, когда загрязнение может происходить через дно пруда хвостохранилища (рис.1). Для общности задачи пористая среда под основанием пруда считается двухслойной. Если среда однородная, то в программе параметры для двухслойной среды вводятся одинаково для двух сред.

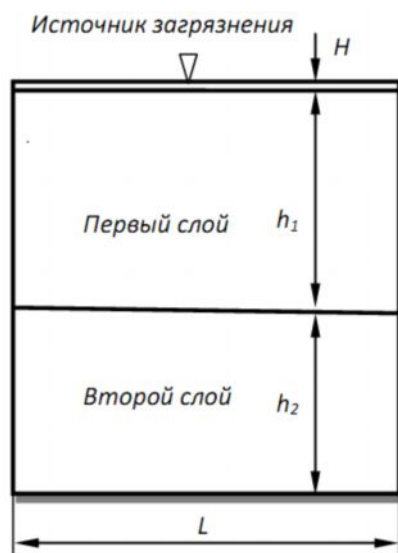


Рис.1 Схематичное представление проникновения загрязнителей в слои грунта.

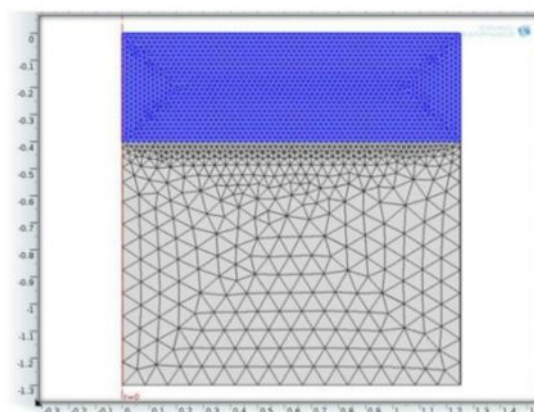
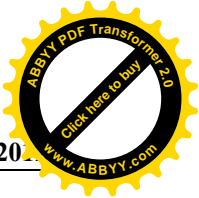
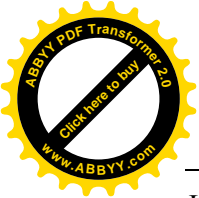


Рис.2. Конечно-элементная схема (4106 элементов).



На рис. 1. показано схематичное проникновение загрязнителей из водоема глубиной H в грунты. Водопроницаемые грунты глубиной h_1, h_2 имеют разные гидрогеологические характеристики. Нижняя граница второго слоя считается непроницаемой. Вода на дневной поверхности содержит вредные вещества постоянной концентрации. Вредные вещества входят в почву с водой и перемещаются через пористую среду адвекцией и дисперсией. В процессе впитывания раствора в слоях грунта уменьшаются концентрации в воде и замедляется движение раствора относительно воды. Сорбция и биологический распад считается линейно пропорциональным водным концентрациям. Сначала решается фильтрационная задача, затем с учетом ее результатов решается задача переноса вредных веществ методом конечных элементов. Разбиение области на треугольные элементы производится автоматически и представлено на рис.2. В начальный момент задаются поля значений гидростатических давлений и концентраций.

Процесс фильтрации рассматривается в ненасыщенной среде, т.е. с учетом изменения влажности пористой среды и моделируется уравнением Ричардсона.

$$(C + S_e S) \frac{\partial H_p}{\partial t} + \nabla \cdot (-K \nabla (H_p + D)) = 0,$$

где C – влагоемкость грунта; S_e – эффективная насыщенность грунта или почвы (безразмерная); S – коэффициент насыщенности среды; H_p – гидростатическое давление, которое пропорционально давлению P (Па); t - время; K – гидравлическая проницаемость (м/с); $D = z$ – направление, которое представляет разность по вертикали (м). Гидравлический напор H , гидростатическое давление H_p , и высота D связаны с давлением P через известное соотношение

$$H_p = \frac{P}{\rho g}; \quad H = H_p + D.$$

k – проницаемость ($1/m^2$), гидравлическая проводимость K (м/с) связаны с вязкостью μ (Па s) и плотностью ρ (кг/м³) жидкости и ускорением свободного падения g (м/т²) соотношением

$$\frac{k}{\mu} = \frac{K}{\rho g}.$$

В процессе проникновения жидкости в сухую или влажную среду жидкость может не полностью заполнять все поры в грунте. Поэтому вводится параметр, характеризующий объем жидкости, содержащейся в грунте $S = (\theta_s - \theta_r) / (l_m \rho g)$ - уровень насыщенности среды. Здесь θ_s, θ_r – характеризуют содержание воды в насыщенной и ненасыщенной среде. Влагоемкость среды C , характеризующая изменение влажности с изменением гидростатического давления $C = \partial \theta / \partial H_p$ или изменение содержания жидкости в грунте

$C \partial H_p / \partial t = \theta \partial \theta / \partial t$. В случае насыщенности среды C стремится к нулю. Параметр K характеризует, с какой интенсивностью пропускает жидкость через среду $K = K_s k_r$, где k_r - относительная проводимость среды или $k_r = K / K_s$. Все эти характеристики в программе введены следующим образом:

$$\theta = \begin{cases} \theta_r + S_e(\theta_s - \theta_r), & H_p < 0. \\ \theta_s, & H_p \geq 0. \end{cases}$$

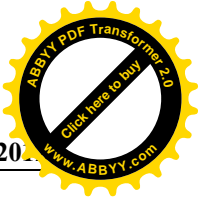
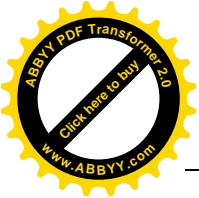
$$S_e = \begin{cases} \frac{1}{\{1 + |\alpha H_p|^m\}^m}, & H_p < 0. \\ 1, & H_p \geq 0 \end{cases}$$

$$C = \begin{cases} \frac{\alpha m}{1-m} (\theta_s - \theta_r) S_e^{\frac{1}{m}} (1 - S_e^{\frac{1}{m}})^m, & H_p < 0. \\ 0, & H_p \geq 0 \end{cases}$$

$$k_r = \begin{cases} S_e \left(1 - \left(1 - S_e^{\frac{1}{m}}\right)^2\right), & H_p < 0. \\ 1, & H_p \geq 0 \end{cases}$$

Граничные условия. Кроме источника загрязнения на всех границах области ставится условие непроницаемости

$$n u = 0, \tag{1}$$



где \mathbf{n} – вектор нормали границ области, \mathbf{u} – скорость фильтрации. Начальное условие для гидростатического давления задано

$$H_p = H_{p\epsilon} \quad (2)$$

Скорость фильтрации с гидростатическим давлением связаны через закон Дарси

$$\mathbf{u} = K_s k_r \nabla(H_p + D) \quad (3)$$

Процесс переноса вредных веществ в пористой среде моделируется в общем виде уравнением

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta c) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho_b c_p) + \nabla[-\theta D_L \nabla c + \mathbf{u} c] = \sum R_L + \sum R_p + S_c$$

Здесь c – растворенная концентрация вещества в жидкости ($кг/м^3$), c_p – масса адсорбированного загрязнителя на грунте ($мг/кг$), θ – доля объема жидкости в грунте, ρ_b – объемная плотность ($кг/м^3$), $\rho_b c_p$ – масса раствора в грунте, D_L – гидродинамический тензор дисперсии ($м^2/д$), R_L – представляет реакции в воде ($кг/(м^3 д)$), R_p – представляет реакцию, вовлекающую растворы ($кг/(м^3 д)$), S_c – раствор, отнесенный к единичному объему почвы в единицу времени ($кг/(м^3 д)$). Для простоты вышеприведенное уравнение перепишем только для случая растворенной концентрации. Введем следующее преобразования

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta c) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho_b c_p) \equiv \theta \frac{\partial c}{\partial t} + c \frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial c_p}{\partial c} \frac{\partial c}{\partial t}$$

Масса раствора в почве c_p выражается линейно через концентрацию и коэффициент разделения K_p ($м^3/кг$)

$$c_p = K_p c$$

или

$$K_p = \frac{\partial c_p}{\partial c}$$

С учетом этих преобразований исходное уравнение имеет вид

$$(\theta + \rho_b k_p) \frac{\partial c}{\partial t} + c \frac{\partial \theta}{\partial t} + \nabla(-\theta D_L \nabla c + \mathbf{u} c) = \theta \varphi_L c + \rho_b k_p \varphi_p c + S_c$$

Здесь φ_L, φ_p – показатели распада для растворенных и впитанных почвой концентрации раствора, D_L – гидродинамический тензор дисперсии, описывает механическое распространение от движения грунтовой воды в дополнение к химическому распространению:

$$\theta D_{Lii} = \alpha_1 \frac{u_i^2}{|u|} + \alpha_2 \frac{u_j^2}{|u|} + \theta D_m \tau_L,$$

$$\theta D_{Lij} = (\alpha_1 - \alpha_2) \frac{u_i u_j}{|u|},$$

где D_{Lii} – диагональные компоненты тензора дисперсии; D_{Lij} – не диагональные члены; α_1, α_2 – продольные и поперечные дисперсии ($м$); D_m – коэффициент молекулярной дисперсии ($м^2/д$); τ_L – фактор извилистости, который уменьшает воздействия молекулярного распространения в пористой среде относительно чистой воды.

Граничные и начальные условия процесса переноса вредных веществ в грунте считается следующими: вначале раствор поступает в грунт с водой при концентрации c_0 . До начала процесса загрязнения грунт считается сухим и чистым, т.е. начальное условие – нулевая концентрация. Все границы области загрязнения, кроме границ, где происходит загрязнение, считаются не проницаемыми. Конкретно рассмотрен типичный пример, исходные данные которого равны:

Для фильтрационной задачи:

Таблица 1

| Переменные | Описание переменных | Верхний слой почвы | Нижный слой почвы |
|------------|--|--------------------|-------------------|
| K_s | Насыщенная гидравлическая проводимость | 0.298 | 0.454 |
| θ_s | пористость | 0.399 | 0.339 |
| θ_r | Остаточная | 0.001 | 0.001 |

| | | | |
|----------|-------------------------------------|------|------|
| | насыщенность | | |
| α | Альфа параметр | 1.74 | 1.39 |
| H_{p0} | Начальное гидростатическое давление | 0.01 | |

Исходные данные для задачи переноса вредных веществ:

Таблица 2

| Переменные | Единица измерения | Описание | Значения |
|-------------|-------------------|---|----------|
| ρ_b | Kg/m^3 | Объемная плотность | 1400 |
| k_p | m^3/kg | Коэффициент распределения | 0.0001 |
| D_m | m^2/d | Коеф. молекулярной диффузии | 0.00374 |
| α_r | M | Продольная дисперсия | 0.005 |
| α_z | M | Поперечная дисперсия | 0.001 |
| φ_L | d^{-1} | Уровень распада в жидкости | 0.05 |
| φ_p | d^{-1} | Уровень распада в грунте | 0.01 |
| c_0 | kg/m^3 | Начальный уровень концентрации раствора | 0 |
| c | kg/m^3 | Уровень концентрации раствора в объеме жидкости | 1.0 |

Согласно вышеприведенной математической модели загрязнения подземной гидросферы произведены расчеты на определенный период времени. Здесь приведены результаты расчета.

Результаты расчета представлены после 14,4 часа начала загрязнения. Как видно из рис.3., хорошо показано процентное содержание вредного вещества в грунте. Оно распространяется согласно гидростатическому давлению в среде. Поле давлений за это время показано на рис.4.

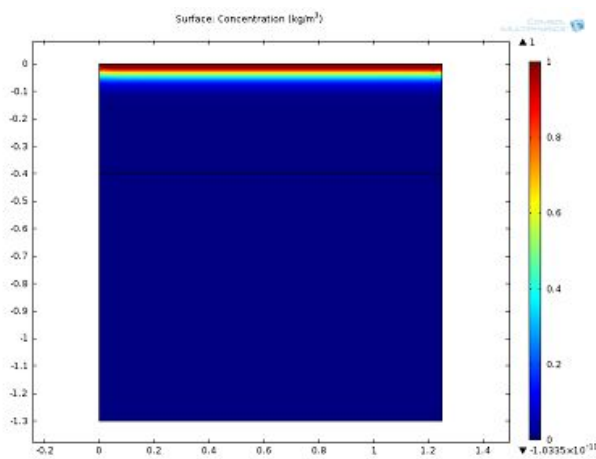


Рис.3. Концентрация раствора в слоях грунта время 51840 сек

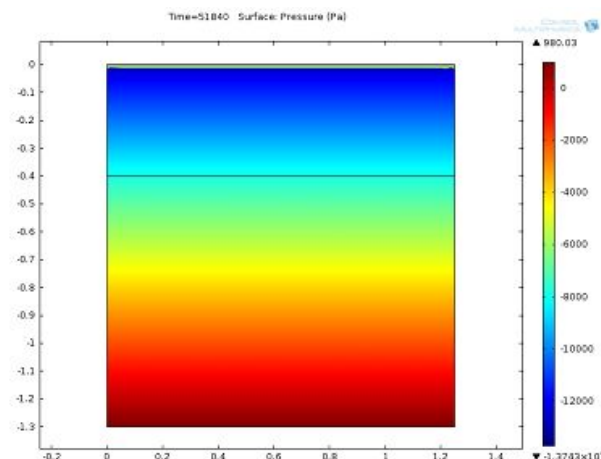


Рис.4. Давление в слоях грунта время 51840 сек.

Выводы. Результаты математической модели загрязнения вредных веществ в пористой среде, полученные с помощью программного продукта, являются достоверными. Работоспособность модели и программного продукта COMSOL проверены на типичном примере задачи загрязнения подземной гидросферы.



Литература

1. Методы охраны подземных вод от загрязнения и истощения. / Под ред. И.К. Гавич. - М.: Недра, 1985. – 320 с.
 2. Лукнер Л., Шестаков М.М. Моделирование геофильтрации. - М.: Недра, 1975. -320 с.
 3. Brooks R.H. and Corey A.T. “Properties of porous media affecting fluid flow”. J.Irrig. Drainage., ASCE. Proc.72(IR2), pp. 61-88, 1966.
- Pryor, Roger W., Multiphysics Modeling Using COMSOL: A First Principles Approach, Jones and Bartlett Publishers, ISBN: 0763779997, 2009