

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПОДЗЕМНОЙ ГИДРОСФЕРЫ

Целью данной работы является построение математической модели, описывающей процесс загрязнения подземной гидросферы через фильтрационный поток жидкости и ее численная реабилитация в COMSOL Multiphysics с визуализацией результатов. Загрязнителями могут быть промышленные отходы, отходы санитарно-курортных учреждений, дачные участки, АЗС, нитраты, 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 одинаковые для двух сред.

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 считаются линейно пропорциональными водным концентрациям. Сначала решается фильтрационная задача, затем, с учетом результатов фильтрационной задачи, решается задача о переносе вредных веществ. Задача решается методом конечных элементов. Разбиение области на треугольные элементы производится автоматически и представлено на рис. 2. В начальный момент задается поле значений гидростатических давлений и концентраций.

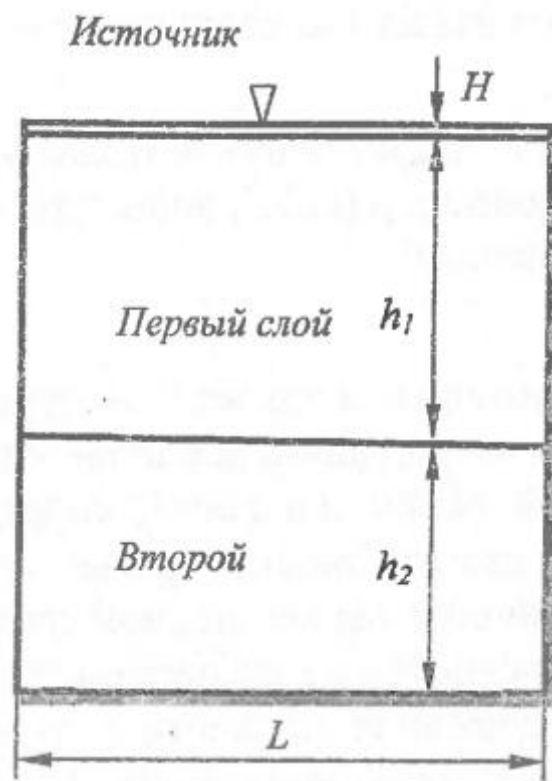


Рис. 1. Схематическое представление проникновения загрязнителей в слои грунта

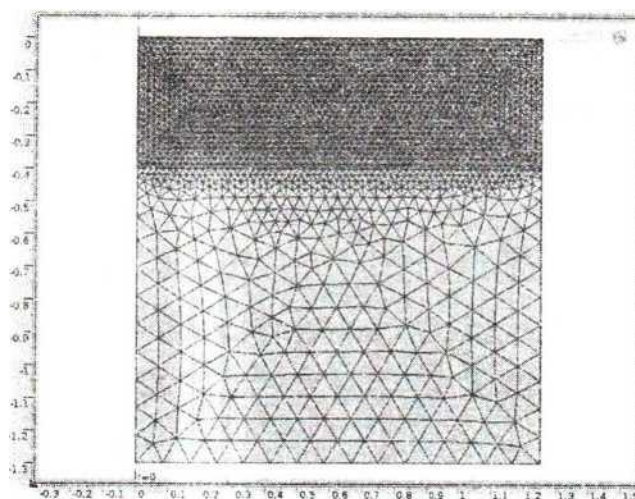


Рис. 2. Конечно-элементная схема (4106 элементов)

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

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

где C – влагоемкость грунта; S_e – эффективная насыщенность грунта или почвы (безразмерная); S – коэффициент насыщенности среды; H_p – гидростатическое давление, которое пропорционально давлению $P(\text{Па})$; 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 ($1/m^2$) и гидравлическая проводимость, K (m/s) связаны с вязкостью μ ($Pa \cdot s$) – плотностью ρ (kg/m^3) жидкости, и ускорением свободного падения g (m/s^2) 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, содержащийся в грунте $S = ((\theta_s - \theta_r)/(lm \rho g))$ – уровень насыщенности среды. Здесь θ_s, θ_r характеризует содержание воды в насыщенной и ненасыщенной среде. Влагоемкость среды C характеризует изменения влажности с изменением гидростатического давления $C = \partial/\partial H_p$ или изменение содержания жидкости в грунте $C \partial H_p / \partial t = \theta \partial/\partial H_p$. 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:

$$\begin{aligned} \theta &= \begin{cases} \theta_r + S_s(\theta_s - \theta_r), & H_p < 0, \\ \theta_s, & H_p \geq 0. \end{cases} \\ S_s &= \begin{cases} \frac{1}{[1 + \alpha H_p^m]^m}, & H_p < 0, \\ 1, & H_p \geq 0 \end{cases} \\ C &= \begin{cases} \frac{\alpha m}{1-m} (\theta_s - \theta_r) S_s^{\frac{1}{m}} (1 - S_s^{\frac{1}{m}})^m, & H_p < 0, \\ 0, & H_p \geq 0 \end{cases} \\ k_r &= \begin{cases} S_s \left(1 - \left(1 - S_s^{\frac{1}{m}}\right)^m\right)^2, & H_p < 0, \\ 1, & H_p \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

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

$$n u = 0 \quad (1)$$

где n — вектор нормали границ области, u — скорость фильтрации. Начальное условие для гидростатического давления задано

$$H_p = H_{p0} \quad (2)$$

Скорость фильтрации с гидростатическим давлением связаны через закона Дарси

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

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

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

Здесь c — растворенная концентрация веществ в жидкости (kg/m), c_p — масса адсорбированного загрязнителя на грунте (mg/kg), θ — доля объема жидкости в

грунте, ρ_b — объемная плотность (кг/м³), $\rho_b c_p$ — масса раствора в грунте, D_l — гидродинамический тензор дисперсии (м²/д),

R_l — представляет реакции в воде (кг/(м³д)), R_p — представляет реакцию, вовлекающую растворы (кг/(м³д)), S_c — раствор, отнесенный к единичному объему почвы в единицу времени (кг/(м³д)). Для простоты вышеприведенное уравнение перепишем только для случая растворенной концентрации. Введем следующее преобразование:

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

Масса раствора в почве c_p выражается линейно через концентрацию и коэффициент разделения K_p (м³/кг)

$$c_p = K_p c$$

или

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

С учетом этих преобразований исходное уравнение имеет вид

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

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

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

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

где D_{Lii} — диагональные компоненты тензора дисперсии; D_{Lij} — недиагональные члены; α_1, α_2 — продольные и поперечные дисперсии (м); D_m — коэффициент молекулярной дисперсии (м²/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 считаются следующими: в начале 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 непроницаемыми. Конкретно рассмотрен типичный пример, исходные данные которого равны:

Для фильтрационной задачи:

Таблица 1

Переменные	Описание переменных	Верхний слой почвы	Нижний слой почвы
K_s	Насыщенная гидравлическая проводимость	0,298	0,454
θ_s	Пористость	0,399	0,339
θ_r	Остаточная насыщенность	0,001	0,001
α	Альфа параметр	1,74	1,39
H_{pc}	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	Коэффициент молекулярной диффузии	0.00374
α_r	М	Продольная дисперсия	0.005
α_z	М	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. Ниже приведены результаты расчета.

Результаты расчета представлены после 14,4 часа с 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.

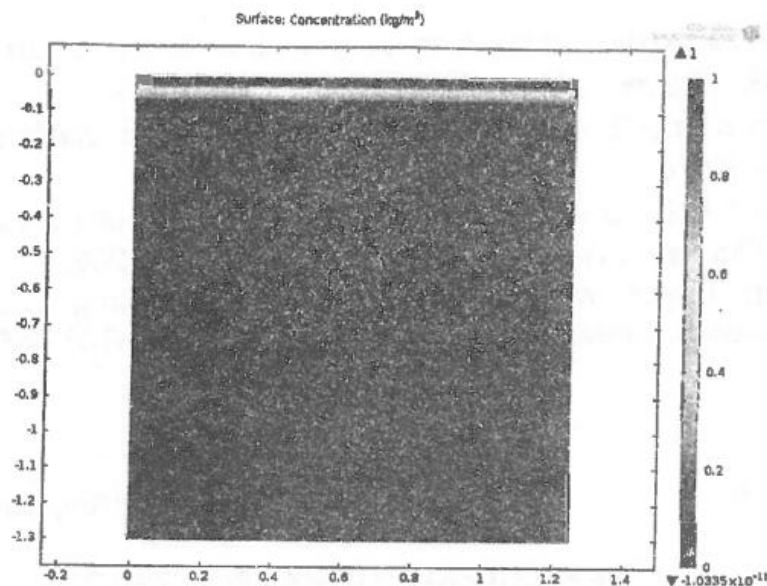


Рис. 3. Концентрация раствора в слоях грунта время 51840 с

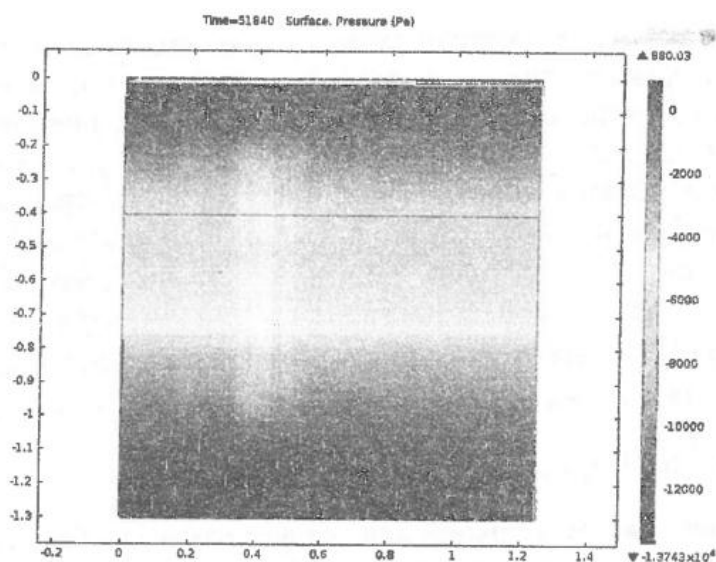


Рис. 4. Давление в слоях грунта время 51840 с

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.

Список литературы

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.
4. Pryor, Roger W., Multiphysics Modeling Using COMSOL: A First Principles Approach, Jones and Bartlett Publishers, ISBN: 0763779997, 2009