

УДК 504.064+51-74

# МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЮЮЧИХ РЕЧОВИН У ҐРУНТАХ

**Т. В. Бойко**

Кандидат технічних наук, доцент,  
в.о. завідувача кафедри  
E-mail: tvbojko@gmail.com

**А. О. Абрамова**

Кандидат технічних наук, старший викладач\*  
E-mail: alla\_abramova@ukr.net

**Ю. А. Запорожець**

Аспірант\*

E-mail: z.juli@bigmir.net

\*Кафедра кібернетики хіміко-технологічних  
процесів

Національний технічний університет України  
«Київський політехнічний інститут»  
пр. Перемоги, 37, м. Київ, Україна, 03056

*Представлено аналіз математичного апарату у сфері гідроекологічних досліджень у напрямку вивчення і прогнозування стану водних екосистем. Виявлено специфіку математичного опису процесу розповсюдження промислових стоків задля дослідження впливу техногенного навантаження на ґрунти. Запропоновано математичну модель масопереносу розчинених речовин у фільтраційних потоках неконсервативних забруднюючих речовин*

*Ключові слова: математична модель, масоперенос, водні екосистеми, ґрунти, промислові стоки*

*Представлен анализ математического аппарата в сфере гидроэкологических исследований в направлении изучения и прогнозирования состояния водных экосистем. Выявлена специфика математического описания процесса распространения промышленных стоков для исследования влияния техногенной нагрузки на почву. Предложена математическая модель массопереноса растворенных веществ в фильтрационных потоках неконсервативных загрязняющих веществ*

*Ключевые слова: математическая модель, массоперенос, водные экосистемы, почвы, промышленные стоки*

## 1. Вступ

Посилення антропогенного впливу, що зумовлюється технічним прогресом, призводить до дедалі помітніших змін стану довкілля, причому більшість з них мають негативний вплив для всього живого на планеті. Тому проблема охорони навколишнього природного середовища пов'язана не тільки з питаннями забезпечення нормальних умов існування всього живого на Землі, а й покращення ситуації що вже склалася, тобто мінімізувати потрапляння шкідливих речовин в навколишнє природне середовище, чого можливо досягти на підґрунті концепції сталого розвитку суспільства [1], яка передбачає помірне і обмежене використання природних ресурсів, використання альтернативних джерел енергії з метою оптимізації життя майбутніх і сучасних поколінь.

З усіх видів шкідливих речовин, які потрапляють у навколишнє природне середовище, найбільша небезпека завдається ґрунту, що призводить до зміни складу природних вод (під впливом фільтраційних процесів). Якість води і стан різних водних об'єктів визначається різними гідрохімічними, гідробіологічними та гідрофізичними показниками. На динаміку цих показників впливають чисельні абіотичні і біотичні процеси, що відбуваються внаслідок взаємодії різних компонентів екосистеми із зовнішніми природними факторами і факторами антропогенного походження.

При вивченні процесів міграції промислових або побутових стічних вод, що скидаються у водойму, а

також у разі виносу ядохімікатів або добрив із сільськогосподарських угідь, виникає необхідність визначення ступеня впливу на ґрунти стічних вод, а також ступеня їхнього забруднення або мінералізації. Таким чином, рішення всіх цих важливих питань зводиться до розгляду відповідних крайових завдань фільтрації й конвективної дифузії.

## 2. Аналіз літературних даних і постановка проблеми

Можливості математичного та імітаційного моделювання практично необмежені. Минуло порівняно небагато часу після того як з'явилися перші математичні роботи Вольтера, проте математичне моделювання завойовує все нові галузі науки. Але в сфері гідроекологічних досліджень застосування математичного моделювання поки ще не набуло поширення, хоча в цій галузі в останні роки опубліковано значну кількість наукових праць, зокрема, праці Лаврика В. І [2 – 5] в області гідроекології, а також Олійника А. Я. [6] у вирішенні фільтраційних задач, Шестакова В. М. [7] у гідродинаміці та інші.

Математичні моделі впливу стічних вод на стан ґрунтів повинні формуватися з урахуванням: типу стічних вод, тобто тих домішок, які знаходяться в них і можуть взаємодіяти з частинками ґрунтів; властивостей і складу ґрунтів [8], тобто породи, структури, форми пор і тріщини ґрунту, а також присутність води в його складі; процесів взаємодії між ними.

Таким чином, вивчення і прогнозування стану водних екосистем є одними з найважливіших завдань сучасних гідроекологічних досліджень, особливо в умовах впливу антропогенних і техногенних факторів. Отже, використовуючи математичні моделі, є можливість дослідити процес розповсюдження промислових стоків, що дозволить проаналізувати вплив техногенного навантаження на ґрунти, а саме складних процесів сорбції з рідких середовищ, фільтрації водних суспензій, солепереносу в ґрунтах, з метою прогнозування змін у ґрунтах.

### 3. Математична модель процесу міграції забруднюючих величин у ґрунтах

Математична модель міграції [8 – 10], тобто масопереносу розчинених речовин, у фільтраційних потоках неконсервативних забруднюючих речовин (домішок) описує взаємодію між ґрунтами та стічними водами, які фільтруються, за допомогою рівнянь матеріального балансу і рівняння кінетики і вирішується системою диференціальних рівнянь у частинних похідних другого порядку зі змінними коефіцієнтами, яка у випадку тривимірної плоско-вертикальної (профільної) сталої фільтрації за умови сталості коефіцієнта конвективної дифузії має такий вигляд (1) - (2):

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0, \quad v_x = \frac{\partial \phi}{\partial x}, \quad v_y = \frac{\partial \phi}{\partial y}, \quad v_z = \frac{\partial \phi}{\partial z},$$

$$\phi = -\chi h, \quad h = \frac{p}{\rho g} - \gamma, \quad (1)$$

$$D \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) - v_x \frac{\partial c}{\partial x} - v_y \frac{\partial c}{\partial y} - v_z \frac{\partial c}{\partial z} - \frac{\partial N}{\partial t} = \sigma \frac{\partial c}{\partial t},$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = a(\sigma c - \beta N), \quad (2)$$

де  $D$  - коефіцієнт конвективної дифузії у м<sup>2</sup>/доб,  $c(x, y, z, t)$  й  $N(x, y, z, t)$  - концентрація речовин, що дифундують, у г/л або кг/м<sup>3</sup> відповідно у рідкій і твердій фазах;  $v_x(x, y, z, t)$ ,  $v_z(x, y, z, t)$  і  $v_y(x, y, z, t)$  - координати вектора швидкості фільтрації в м/доб;  $t$  - час у добі;  $\sigma$  - пористість або активна пористість ґрунтів, де відбувається рух вод і конвективна дифузія розчинної речовини;  $\alpha$  - константа масообміну (швидкості сорбції);  $c_0$  - початкова концентрація речовини в рідкій фазі;  $\beta$  - коефіцієнт розподілу речовини між рідкою й твердою фазами в умовах рівноваги за законом лінійної ізотерми Генрі, що виражається рівністю  $c_p = \beta N$ , причому через  $c_p$  позначена рівноважна концентрація розчину, по величині рівна кількості речовини, що поглинає твердою фазою;  $\phi(x, y, z, t)$  - потенціал швидкості фільтрації;  $\chi$  - коефіцієнт фільтрації в м/доб;  $h$  - напір в м;  $p$  - тиск у Н (м<sup>2</sup> = кг/м·с<sup>2</sup>);  $\rho$  - щільність у кг/м<sup>3</sup>;  $g$  - прискорення сили ваги в м/с<sup>2</sup>;  $\gamma$  - константа швидкості масообміну

Для знаходження розв'язку системи рівнянь необхідно сформулювати початкові і граничні умови (3), (4):

$$c(x, y, z, t_0) = c(x, y, z), \quad (3)$$

$$c(x, y, z, t) \Big|_{x=x_1} = c_0(y, z, t), \quad \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z=L} = 0, \quad (4)$$

де  $c_0$  - задана концентрація речовини, що дифундує, в області фільтрації в момент часу до настання процесу забруднення (засолення) або промивання підземного середовища.

При побудові імітаційної математичної моделі масопереносу розчинених речовин, як правило, використовуються досить складні математичні методи. Зокрема, для спрощення системи рівнянь (1) - (4) вдаються до зменшення розмірності шляхом усереднення шуканих величин (концентрації, швидкостей тощо) по одній або двом просторовим координатам, а інколи і по всьому досліджуваному просторі. Вертикальне усереднення по координаті  $z$  зводить дане рівняння до двовимірної «профільної» моделі, яка дає змогу оцінити розповсюдження стоків у глиб ґрунтів [8].

Таким чином, після спрощення модель набуває вигляду (5) - (7):

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0, \quad v_x = \frac{\partial \phi}{\partial x}, \quad v_y = \frac{\partial \phi}{\partial y},$$

$$\phi = -\chi h, \quad h = \frac{p}{\rho g} - \gamma, \quad (5)$$

$$D \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) - v_x \frac{\partial c}{\partial x} - v_y \frac{\partial c}{\partial y} - \frac{\partial N}{\partial t} = \sigma \frac{\partial c}{\partial t},$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = a(\sigma c - \beta N), \quad (6)$$

$$c(x, y, t_0) = c_0(x, y), \quad c(x, y, t) \Big|_{x=x_1} = c_0(y, t), \quad \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z=L} = 0. \quad (7)$$

В залежності від типу і властивостей ґрунтів, а також від виду взаємодії флюїду з ґрунтами у багатьох практичних задачах як рівняння кінетики масообміну береться одне з наступних рівнянь:

1) при кристалізації або розчиненні компонентів породи у фільтрівній воді:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \gamma(c - c^*) \quad \gamma = a^* \sigma, \quad (8)$$

де  $c^* = C_k$  - коефіцієнт насичення;  $\gamma$  - константа швидкості масообміну;

2) при нерівномірній необоротній сорбції або десорбції відповідно:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \gamma_1 \frac{\partial N}{\partial t} = \gamma_1^*, \quad (9)$$

3) при рівноважній сорбції або десорбції відповідно:

$$N = \frac{a}{\beta} c, \quad \frac{\partial N}{\partial t} = \sigma \Gamma \frac{\partial c}{\partial t}, \quad \sigma_c^* = \sigma(1 + \Gamma), \quad (10)$$

$$N = -\frac{a}{\beta^*} c, \quad \frac{\partial N}{\partial t} = \sigma \Gamma^* \frac{\partial c}{\partial t}, \quad \sigma_g^* = \sigma(1 - \Gamma), \quad (11)$$

де  $\sigma_c^*$  (або  $\sigma_g^*$ ) - так звана ефективна пористість або масообмін поглинання (виділення) речовини породою.

Надалі як рівняння кінетики приймемо рівняння (8), що є в математичному відношенні найбільш загальним з наведених вище. Тому, у випадку плоско-вертикальної сталої фільтрації, система рівнянь масопереносу набуде вигляду (12)-(14):

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0, \quad v_x = \frac{\partial \phi}{\partial x}, \quad v_y = \frac{\partial \phi}{\partial y},$$

$$\phi = -\chi h, \quad h = \frac{p}{\rho g} - \gamma, \tag{12}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ D_x(x,y) \frac{\partial c}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ D_y(x,y) \frac{\partial c}{\partial y} \right] -$$

$$-v_x \frac{\partial c}{\partial x} - v_y \frac{\partial c}{\partial y} - \gamma(c - c^*) = \sigma \frac{\partial c}{\partial t},$$

$$c(x,y,t_0) = c_0(x,y), \quad c(x,y,t)|_{x=x_1} = c_0(y,t), \quad \left. \frac{\partial c}{\partial z} \right|_{z=L} = 0. \tag{14}$$

Складність, що виникає при вирішенні даної системи рівнянь, яка описує рух рідини в пористому середовищі, залежить головним чином від структури і властивостей ґрунтів, форми пор і тріщин, що обов'язково треба врахувати при складанні граничних умов.

#### 4. Результати досліджень

Для вирішення запропонованої математичної моделі процесу міграції забруднюючих величин у ґрунтах (4) – (6) проводилося імітаційне моделювання у математичному пакеті Mathcad, отримані результати порівнювались із результатами, отриманими Лавриком В.И. [2] (при однакових початкових і граничних умовах).

Отримані результати свідчать про адекватність запропонованої моделі (похибка не перевищує 5 %).

Результати вирішення запропонованої моделі наведено у табл. 1.

Таблиця 1

Зміна швидкості фільтрування від часу

t, доб	0	1	2	3	4	5	6	7	8
$v_x$ , м/доб	0	1,581	2,449	2,976	3,320	3,719	3,837	3,923	3,986
$v_y$ , м/доб	0	0,22	0,29	0,38	0,05	0,86	1,13	1,49	1,97

Вирішення даної моделі дає можливість кількісно представити забруднення ґрунтів, а саме отримати об'єктивне уявлення про процес розповсюдження стічних вод у ґрунтах.

#### 5. Висновки

1. Встановлено, що математичні моделі впливу стічних вод на стан ґрунтів повинні формуватися з урахуванням: типу стічних вод; властивостей і складу ґрунтів; процесів взаємодії між ними.

2. Запропоновано математичну модель міграції, тобто масопереносу розчинених речовин, у фільтраційних потоках неконсервативних забруднюючих речовин (домішок), що описує взаємодію між ґрунтами та стічними водами.

3. У разі різного виду взаємодії флюїду з ґрунтами, а також в залежності від типу і властивостей ґрунтів запропоновано обрати рівняння кінетики масообміну (9).

4. Вирішена запропонована модель (13) - (16), що дає можливість кількісно представити забруднення ґрунтів, з урахуванням процесу розповсюдження стічних вод (табл. 1).

#### Література

1. Дырда, В. Устойчивое развитие и проблемы глобальной безопасности [Текст] / В. Дырда, В. Осипенко // Проблемы безопасности при чрезвычайных ситуациях. - 1995. - № 12. - С. 3-22.
2. Лаврик, В. И. Решение задачи массопереноса водорастворимых веществ в случае зависимости коэффициентов конвективной диффузии от скорости фильтрации [Текст] / В. И. Лаврик // Препринт 81.18. - К.: Ин-т. Математики АН УССР, 1981. - С. 3-24.
3. Лаврик, В. И., Вопросы математического моделирования процессов самоочищения подземных и поверхностных вод [Текст] / В. И. Лаврик, Н. А. Никифорович // Гидромеханика. - Вып. 68.- К.: Наук. думка, 1994.- С. 36-40.
4. Лаврик, В. И. Методи математичного моделювання в екології [Текст] / В. И. Лаврик - Київ, 2002. - 204с.
5. Лаврик, В. И. Математическое моделирование в гидроэкологических исследованиях [Текст] / В. И. Лаврик, Н. А. Никифорович - Киев, 1998. - 287с.
6. Олейник, А. Я. Гидродинамическая модель фильтрования при очистке подземных вод от соединений железа [Текст] / А. Я. Олейник, С. К. Киселев // Прикладна гідромеханіка. - 1999. - №1 (73). - С. 20-25.
7. Шестаков, В. М. Гидрогеодинамика. [Текст] / В. М. Шестаков, М.: МГУ, 1995. - 368 с.
8. Абрамов, И. Б. Оценка воздействия на подземные воды промышленно-городских агломераций [Текст] / И. Б. Абрамов - Харьков, 2007. - 285с.
9. Абрамов, И. Б. Оцінювання хімічного ризику забруднення ґрунту на основі вирішення геофільтраційної задачі [Текст] / І. Б. Абрамов, Т. В. Бойко, Ю. А. Запорожець // Східно-європейський журнал передових технологій, Харків, 2012, №2/14 (56) – С. 24-26.
10. Фрид, Ж. Загрязнение подземных вод [Текст] / Ж. Фрид – М.: Недра, 1981. - 304 с.