

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПРОМЫВКИ ЗОНЫ АЭРАЦИИ

Розроблена чисельна модель розрахунку фільтрації нейтралізуючого розчину крізь зону аерації для ліквідації осередку забруднення. Модель базується на розв'язку рівняння геоміграції. Наводяться результати обчислювального експерименту.

Разработана численная модель расчета фильтрации нейтрализующего раствора через зону аэрации для ликвидации области загрязнения. Модель основывается на решении уравнения геомиграции. Приводятся результаты вычислительного эксперимента.

A numerical model to calculate the process of soil protection from pollution with the use of neutralizator has been proposed. The model is based on the equation of admixture transfer. The results of numerical experiment are presented.

При ликвидации последствий аварийных разливов на железнодорожном транспорте одной из важных задач является нейтрализация области загрязнения, образовавшейся в зоне аэрации.

Обзор научных публикаций, посвященных данному вопросу [1, 3, 5, 6], показал, что отсутствуют расчетные методики, которые можно было бы применить для расчета процесса нейтрализации загрязнителя в зоне аэрации.

Целью настоящей работы явилось создание численной модели, позволяющей выполнить расчет процесса промывки области загрязнения в зоне аэрации за счет инфильтрации с поверхности грунта нейтрализующего раствора. Для эффективной промывки необходимо, чтобы подача нейтрализующего раствора в зону аэрации осуществлялась по принципу «насыщенной фильтрации». Это можно организовать путем обваловки обрабатываемого участка валиками и подачей на грунт раствора с условием $Q > k$ (где Q – расход нейтрализатора на единицу площади, м/сут; k – коэффициент фильтрации грунта зоны аэрации, м/сут). В случае неоднородной структуры грунта зоны аэрации предлагается использовать обобщенное значение коэффициента фильтрации, которое рассчитывается по методу Г. Г. Каменского.

Математическая модель

При построении математической модели будем считать, что известна структура грунта, глубина расположения зеркала подземных вод, тип нейтрализатора, его концентрация.

Математическая модель. Процесс движения нейтрализующего раствора внутри грунта будем описывать следующим уравнением геомиграции:

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \sigma C = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right), \quad (1)$$

где n – активная пористость; C – концентрация нейтрализующего вещества; u – скорость фильтрации; D – коэффициент дисперсии; σ – коэффициент, учитывающий процессы сорбции.

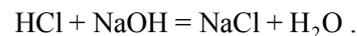
При вертикальной фильтрации скорость фильтрации равна коэффициенту фильтрации.

Для данного уравнения ставятся следующие граничные условия: на входе в расчетную область задается концентрация нейтрализатора, на выходе из расчетной области ставится условие

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0.$$

В качестве начального условия полагается, что в начальный момент времени концентрация нейтрализатора в грунте равна нулю и известна концентрация загрязняющего вещества в грунте.

Уравнение (1) дополняется моделью кинетики процесса взаимодействия загрязнителя в грунте и нейтрализующего вещества. Например, в случае нейтрализации соляной кислоты и подачи раствора NaOH имеем:



В разработанном пакете программ, реализующем на ПЭВМ расчет по разработанной модели, процесс кинетики взаимодействия рассчитывается в отдельной подпрограмме, что

позволяет быстро настроить пакет на решение любой задачи из данного класса.

Метод решения

Необходимо отметить, что для моделируемой ситуации – миграция нейтрализатора + взаимодействие с загрязнителем в зоне аэрации – нельзя использовать существующие аналитические решения уравнения (1). В данной работе расчет уравнения массопереноса нейтрализующего раствора через зону аэрации реализуется с помощью неявной попеременно-треугольной разностной схемы расщепления.

Разностная схема является абсолютно устойчивой на каждом дробном шаге и легко программируется.

Практическая реализация

Практическое применение разработанной численной модели рассмотрено на следующем примере. Произошел разлив соляной кислоты, в результате которого произошло загрязнение всей зоны аэрации глубиной 4,64 м, площадь зоны разлива 100 м². В зоне аэрации находится примерно 14100 кг кислоты. Структура грунта: ПРС – 0,5 м, суглинок – 1,8 м, супесь – 2,24 м, далее – грунтовые воды. Концентрация кислоты в грунте составляет $\rho_0 = 30$ кг/м³. Для реабилитации «пораженного» участка грунта применяется подача 10 %-ного раствора NaOH. Гидрогеологические параметры: $n = 0,2$; $\sigma = 0$; $K_{ж} = 0,34 \cdot 10^{-5}$ м/с, $D = 0,001$ м. При вертикальной фильтрации скорость фильтрации с течением времени становится равной величине коэффициента фильтрации. Поэтому будем считать, что скорость вертикальной фильтрации равна заданному коэффициенту фильтрации. Подача нейтрализатора осуществляется так, чтобы над поверхностью земли был слой нейтрализующего раствора. На практике достаточно, чтобы величина этого слоя составляла примерно 5...10 см.

Результаты вычислительного эксперимента по моделированию промывки грунта в целях нейтрализации в нем кислоты представлены в табл. 1, 2. В табл. 1 показана, для различных моментов времени, величина (глубина) нейтрализованного участка грунта при подаче нейтрализующего раствора, а также количество нейтрализованной кислоты в грунте.

Отметим, что моменту времени $t = 0$ соответствует начало подачи нейтрализатора на пораженный участок. Как видно из данной таблицы, к моменту времени $t = 5826$ мин будет ней-

трализовано практически основная часть кислоты в зоне аэрации. Нейтрализатор, проходя зону аэрации, может попасть в подземный поток. На основе разработанной численной модели имеется возможность прогнозировать интенсивность загрязнения подземного потока за счет фильтрации нейтрализатора. В табл. 2 показано, какое количество нейтрализатора будет поступать в подземный водоносный горизонт, если вовремя не остановить процесс нейтрализации.

Таблица 1

Глубина зоны нейтрализации и количество нейтрализованной кислоты

t , мин	Глубина нейтрализованного участка, м	Масса нейтрализованной кислоты в грунте, кг
226	0,16	700
493	0,40	1400
1320	1,04	3300
5826	4,48	13800

Таблица 2

Количество NaOH, поступившего в подземный водоносный горизонт на 1 м² обрабатываемой зоны разлива

t , мин	5906	5960	6013	6053
Масса NaOH, кг	0,29	1,85	4,44	6,88

Как видно из табл. 2, с течением времени происходит нарастание степени загрязнения подземного водоносного горизонта под обрабатываемым участком за счет инфильтрации нейтрализатора. Для рассматриваемой зоны загрязнения, которая обрабатывается, общее количество нейтрализатора, попавшего в подземный поток к моменту времени $t = 6053$ мин, составит около 688 кг. С помощью разработанной численной модели можно оптимизировать процесс нейтрализации так, чтобы уменьшить количество нейтрализатора, попадающего в подземный поток. Т.к. при расчете определяется на текущий момент времени, какое количество кислоты уже нейтрализовано (а значит известно, какое количество кислоты еще не нейтрализовано), а также какое количество нейтрализатора еще не успело вступить в реакцию в зоне аэрации. На основании этих данных в разработанной программе определяется момент времени, когда в поступающем на грунт растворе уже может не быть нейтрализатора. На-

пример, для рассмотренной выше ситуации, к моменту времени $t = 1520$ мин содержание щелочи может быть равно 0. В этом случае процесс нейтрализации характеризуется такими данными (см. табл. 3, 4).

Таблица 3

Количество нейтрализованной кислоты при оптимизации процесса нейтрализации	
t , мин	Масса нейтрализованной кислоты в грунте, кг
6206	13200
6460	13400
6966	13900
7220	14000

Таблица 4

Количество NaOH, поступившего в подземный водоносный горизонт на 1 м² обрабатываемой зоны разлива при оптимизации процесса нейтрализации

t , мин	7346	7473	8233
Масса NaOH, кг	0,011	0,13	0,44

Из данных, приведенных в табл. 3, 4, можно сделать следующий вывод. Во-первых, при оптимизации процесса нейтрализации путем прекращения подачи нейтрализатора в фильтрующийся поток в определенный момент времени происходит замедление темпа процесса нейтрализации кислоты в грунте. Во-вторых, процесс оптимизации позволяет существенно уменьшить количество нейтрализатора, поступающего в подземный поток при процессе обработки. Из табл. 4 видно, что к моменту времени $t = 8233$ мин в подземный поток поступит всего 44 кг щелочи для обрабатываемой площади, что в 15 раз меньше, чем в рассмотренном выше варианте, когда не было процесса оптимизации. Отметим, что при решении данной задачи, в расчет вкладывался 5 % «запас» нейтрализатора в фильтрующемся растворе по сравнению с тем, что требуется, исходя из стехиометрического соотношения.

Выводы

Разработана численная модель, на основе которой создан метод расчета процесса нейтрализации области загрязнения, образовавшейся в зоне аэрации путем вертикальной инфильтрации специального раствора. Для реализации предложенного метода используется стандартная гидрогеологическая информация. Метод хорошо приспособлен для практических расчетов, требует около 5...10 с машинного времени на решение одного варианта задачи. Модель может быть использована для обоснования принятых инженерных решений по защите зоны аэрации и 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 [Текст]: учеб. пособие в 5 кн. / под ред. В. А. Котляревского и А. В. Забегаева. – М.: АСВ, 2001.
2. Беляев, Н. Н. Компьютерное моделирование динамики движения и загрязнения подземных вод [Текст] / Н. Н. Беляев, Е. Д. Коренюк, В. К. Хрущ. – Д.: Наука и образование, 2001. – 156 с.
3. Основы гидрогеологических расчетов [Текст] / под ред. Ф. М. Бочевера. – М.: Недра, 1965. – 305 с.
4. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде [Текст] / под ред. М. З. Згуровского. – К.: Наук. думка, 1997. – 368 с.
5. Полубаринова-Кочина, П. Я. Математические методы в вопросах орошения [Текст] / П. Я. Полубаринова-Кочина, В. Г. Пряжинская, В. Н. Эмих. – М.: Наука, 1969. – 414 с.
6. Скаболланович, И. А. Гидрогеологические расчеты по динамике подземных вод [Текст] / И. А. Скаболланович. – М., Недра, 1954. – 388 с.
7. Экологические последствия загрязнения окружающей среды в результате аварий при перевозках неорганических кислот и технологические аспекты их ликвидации [Текст] / Л. А. Ярышкина и др. // Ресурсосберегающие технологии в транспорте и гидротехническом строительстве: Межвуз. сб. науч. тр. «Новые строительные технологии». – 1997. – Вып. 3. – Д.: Арт-Пресс, 1997. – С. 103-107.

Поступила в редколлегию 25.09.2008.