Мурзакматов М.У.
кафедра прикладной математики Иссык-Кульского Государственного университета, кандидат технических наук, доцент,
Ажыгулова Н.Т.
кафедра прикладной математики Иссык-Кульского Государственного университета

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПЕРЕНОСА ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ В ПОДЗЕМНЫХ ВОДАХ ПРИ СТАЦИОНАРНОМ РЕЖИМЕ

Рассматривается вывод дифференциального уравнения диффузии и массообмена в подземных водах, основанный на балансе массы вещества и законе Фика, которое решается методом конечных элементов совместно с стационарным уравнением фильтрации. Алгоритм и программа отлажены на решении тестовых задач.

Важной проблемой в экологии является контроль за выбросом промышленных, животноводческих и бытовых отходов. Особенно актуальными являются исследования влияния на окружающую среду хвостохранилищ, содержащих химически вредные вещества. Эти проблемы тесно связаны с обеспечением населения качественно чистой водой. Загрязнители, попадая в подземные воды, приводят к изменению их свойств и состава. При моделировании миграции подземных вод должны учитываться еще и модели процессов массопереноса.

При изучении фильтрации смешивающихся жидкостей в условиях их физико-химического взаимодействия с пористой средой рассматриваются совместно уравнения фильтрации и уравнения диффузии и массообмена. Баланс массы вещества для произвольного элемента области фильтрации в пористой среде без учета изменения плотности и вязкости потока приводит к уравнениям [1,2]:

$$\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}+\frac{\partial u_z}{\partial z}+\frac{\partial N}{\partial t}=-\frac{\partial(n_0 C)}{\partial t}, \qquad (1)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t}=\varphi(C,N), \qquad (2)$$

где u_x, u_y, u_z – компоненты массовой скорости ассоциированного с жидкостью вещества; *C* и *N*-массовые концентрации вещества в жидкой (на единицу объема раствора) и твердой (на единицу объема пористой среды) фазах. Уравнение (2) является уравнением кинетики. Если концентрация твердой фазы не учитывается, то уравнение (2) не рассматривается, а слагаемое $\partial N/\partial t$ в уравнении (1) отсутствует.

Основным законом диффузии в неподвижной среде является закон Фика (точнее, его первый закон), согласно которому диффузионный поток пропорционален градиенту концентрации

$$q=-D\frac{\partial C}{\partial n},$$

где: C–концентрация диффундирующего вещества; q–диффузионный поток, т. е. количество вещества, переносимое через единицу поверхности за единицу времени; D – коэффициент конвективной диффузии. Для динамических условий в связи с наличием дополнительного механизма переноса вещества фильтрующимся потоком первый закон Фика для полного потока вещества записывается в виде [3]:

$$u=\nu C-q,$$

или в покомпонентной форме:

$$u_x=\nu_x C-D\frac{\partial C}{\partial x},\quad u_y=\nu_y C-D\frac{\partial C}{\partial y},$$

$$u_z=\nu_z C-D\frac{\partial C}{\partial z}, \qquad (3)$$

т. е. складывается из конвективного переноса вещества со средней скоростью фильтрации ν и диффузионного переноса с коэффициентом конвективной диффузии D.

Здесь ν_x, ν_y, ν_z –компоненты вектора скорости фильтрации.

Подставляя выражения (3) в уравнение (1) и полагая пористость среды постоянной и процесс установившимся, получаем уравнение (без учета кинетики)

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial C}{\partial x}-\nu_x C\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D\frac{\partial C}{\partial y}-\nu_y C\right)+$$

$$+\frac{\partial}{\partial z}\left(D\frac{\partial C}{\partial z}-\nu_z C\right)+$$

$$+g(x,y,z)=0,\qquad (x,y,z)\in V, \qquad (4)$$

где g(x, y, z) – возможный источник растворимого вещества в области фильтрации.

Для решения конкретных задач о переносе загрязняющих растворов должны быть заданы граничные условия. Граничные условия могут принимать различные формы. На границе S области фильтрации или на ее части задается одно из следующих условий [4, 5]:

1. Задается концентрация загрязняющего вещества

$$C = C_p(x,y,z)\,, \qquad (5)$$

где C_p – концентрация вещества в растворе.

2. Задается поток вещества через границу

$$-D\frac{\partial C}{\partial n} = q(x,y,z). \qquad (6)$$

Если граница или ее часть непроницаема для диффузии, то

$$q = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\partial C}{\partial n} = 0\,. \qquad (7)$$

3. Если фильтрационный поток граничит с жидкой непрерывной средой (морем, озером, рекой, бассейном), где распределение концентрации растворенного вещества равно C_p, то задается поток вещества с учетом конвективного отвода и дисперсии

$$-D\frac{\partial C}{\partial n} + \nu C = q(x,y,z). \qquad (8)$$

Поскольку

$$q=\nu\, C_p\,,$$

из (8) получаем

$$D\frac{\partial c}{\partial n} = \nu(C - C_p)\,. \qquad (9)$$

Это условие является обобщением условий (5) и (7): при большой скорости фильтрации, когда ν >>D, получается условие $C=C_p$; при относительно высоком значении коэффициента дисперсии и малой скорости фильтрации, когда ν <<D, – условие $\frac{\partial C}{\partial n} = 0$.

Условия (5) – (9) в общем виде записываются как

$$D\frac{\partial C}{\partial n} - \beta_c C = \alpha_c, \quad (x,y,z)\in\Sigma\,. \qquad (10)$$

В уравнениях (4), (10)

$v_x = -k\dfrac{\partial H}{\partial x}$, $v_y = -k\dfrac{\partial H}{\partial y}$, $v_z = -k\dfrac{\partial H}{\partial z}$ – составляющие скорости фильтрации подземных вод; $H=H(x, y, z)$ – напорная функция; $k=k(x, y, z)$ – коэффициент фильтрации пористой среды; $\beta_c=\beta_c(x, y, z)$, $\alpha_c=\alpha_c(x, y, z)$ – заданные функции; V – область фильтрации подземных вод, $\Sigma=\partial V$ – ее граница.

Компоненты скорости фильтрации определяются из уравнения движения подземных вод

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial H}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(k\frac{\partial H}{\partial y}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(k\frac{\partial H}{\partial z}\right) + QH = f(x,y,z),$$

$$(x, y, z) \in V, \qquad (11)$$

$$k\frac{\partial H}{\partial n} - \beta H = \alpha, \quad (x, y, z) \in \Sigma. \qquad (12)$$

Здесь Q(x, y, z) – функция перетока; f(x, y, z) – функция влияния источников и стоков подземных вод; $\alpha=\alpha(x, y, z)$, $\beta=\beta(x, y, z)$ – заданные функции.

Задачи (4), (10) и (11), (12) решаем методом конечных элементов [6, 7]. Считая область фильтрации V цилиндрической, разбиваем ее на тетраэдральные элементы и приближенно представляем функции H(x, y, z) и C(x, y, z) в виде

$$H(x,y,z) \approx H_n(x,y,z) = \sum_{j=1}^{n} H_j N_j(x,y,z), \qquad (13)$$

$$C(x,y,z) \approx C_n(x,y,z) = \sum_{j=1}^{n} C_j N_j(x,y,z), \qquad (14)$$

где $H_j=H(x_j, y_j, z_j)$,
$C_j=C(x_j, y_j, z_j)$,
$N_j(x, y, z) = a_j+b_jx+c_jy+d_jz$,
n – число узлов сеточной области.

В задаче (4), (10) вместо C(x, y, z) подставляем функцию $C_n(x, y, z)$ и применяем обобщенный принцип Галеркина:

$$-\iiint_V N_i\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial C_n}{\partial x} - v_x C_n\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(D\frac{\partial C_n}{\partial y} - v_y C_n\right) + \right.$$
$$\left. + \frac{\partial}{\partial z}\left(D\frac{\partial C_n}{\partial z} - v_z C_n\right) + g\right]dv +$$
$$+\iint_\Sigma N_i\left(D\frac{\partial C_n}{\partial n} - \beta_c C_n - \alpha_c\right)d\sigma = 0,$$
$$i = 1,2,\ldots,n \qquad (15)$$

и используем формулу Грина:

$$\iiint_V D\left(\frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial C_n}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial C_n}{\partial y} + \frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial C_n}{\partial z}\right)dv -$$
$$-\iiint_V C_n\left(v_x\frac{\partial N_i}{\partial x} + v_y\frac{\partial N_i}{\partial y} + v_z\frac{\partial N_i}{\partial z}\right)dv -$$
$$-\iint_\Sigma N_i k\frac{\partial H}{\partial n}C_n d\sigma - \iiint_V N_i g dv - \iint_\Sigma N_i(\beta_c C_n + \alpha_c)d\sigma = 0,$$
$$i = 1,2,\ldots,n.$$

Заменяя функцию $C_n(x, y, z)$ ее разложением по формуле (14), получаем систему линейных алгебраических уравнений относительно C_j:

$$\sum_{j=1}^{n} c_{ij}C_j = d_i\,, \quad i = 1,2,\ldots,n, \qquad (16)$$

где

$$c_{ij} = \iiint_V D\left(\frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y} + \frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial N_j}{\partial z}\right)dv -$$
$$-\iiint_V N_j\left(v_x\frac{\partial N_i}{\partial x} + v_y\frac{\partial N_i}{\partial y} + v_z\frac{\partial N_i}{\partial z}\right)dv -$$

$$-\iint_{\Sigma} N_i N_j(\beta H+\alpha)d\sigma-\iint_{\Sigma} N_i N_j \beta_c d\sigma, \qquad (17)$$

$$d_i=\iiint_V N_i g dv+\iint_{\Sigma} N_i \alpha_c d\sigma.$$

Функции v_x, v_y, v_z и v выражаются через производные функции H(x, y, z), значения которых находятся из системы уравнений [7], получаемой из задачи (11), (12) по описанной выше процедуре:

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} H_j = f_i, \quad i=1,2,\ldots,n. \qquad (18)$$

Здесь

$$a_{ij}=\iiint_V k\left(\frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial N_j}{\partial x}+\frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y}+\frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial N_j}{\partial z}\right)dv-$$

$$-\iint_{\Sigma} N_i N_j \beta \; d\sigma, \qquad (19)$$

$$f_i=\iiint_V N_i f\, dv+\iint_{\Sigma} N_i \alpha \; d\sigma.$$

Для одного тетраэдрального элемента (f) с вершинами i, j, k, l и базисными функциями $N_s=a_s+b_s x+c_s y+d_s z$, s=i, j, k, l, коэффициенты систем (16) и (18) относительно вершины i имеют вид:

$$c_{ii}=q(N_i,N_i)\iiint_{(f)} D(x,y,z)dv+$$
$$+p(\nu,N_i)\iiint_{(f)} N_i k(x,y,z)dv-$$
$$-\iint_{\Sigma_f} N_i^2(\beta H_n+\alpha)d\sigma-\iint_{\Sigma_f} N_i^2\beta_c d\sigma,$$
$$c_{ij}=q(N_i,N_j)\iiint_{(f)} D(x,y,z)dv+$$
$$+p(\nu,N_i)\iiint_{(f)} N_j k(x,y,z)dv-$$
$$-\iint_{\Sigma_f} N_i N_j(\beta H_n+\alpha)d\sigma-\iint_{\Sigma_f} N_i N_j\beta_c d\sigma,$$
$$c_{ik}=q(N_i,N_k)\iiint_{(f)} D(x,y,z)dv+$$
$$+p(\nu,N_i)\iiint_{(f)} N_k k(x,y,z)dv-$$
$$-\iint_{\Sigma_f} N_i N_k(\beta H_n+\alpha)d\sigma-\iint_{\Sigma_f} N_i N_k\beta_c d\sigma,$$
$$c_{il}=q(N_i,N_l)\iiint_{(f)} D(x,y,z)dv+$$
$$+p(\nu,N_i)\iiint_{(f)} N_l k(x,y,z)dv-$$
$$-\iint_{\Sigma_f} N_i N_l(\beta H_n+\alpha)d\sigma-\iint_{\Sigma_f} N_i N_l\beta_c d\sigma,$$
$$d_i=\iiint_{(f)} N_i g dv+\iint_{\Sigma_f} N_i\alpha_c d\sigma,$$
$$a_{ii}=q(N_i,N_i)\iiint_{(f)} k(x,y,z)dv+$$
$$+\iiint_{(f)} N_i^2 Q d\nu-\iint_{\Sigma_f} N_i^2\beta(x,y,z)d\sigma,$$
$$a_{ij}=q(N_i,N_j)\iiint_{(f)} k(x,y,z)dv+$$
$$+\iiint_{(f)} N_i N_j Q d\nu-\iint_{\Sigma_f} N_i N_j\beta(x,y,z)d\sigma,$$
$$a_{ik}=q(N_i,N_k)\iiint_{(f)} k(x,y,z)dv+$$
$$\iiint_{(f)} N_i N_k Q d\nu-\iint_{\Sigma_f} N_i N_k\beta(x,y,z)d\sigma,$$
$$a_{il}=q(N_i,N_l)\iiint_{(f)} k(x,y,z)dv+$$
$$+\iiint_{(f)} N_i N_l Q d\nu-\iint_{\Sigma_f} N_i N_l\beta(x,y,z)d\sigma,$$
$$f_i=\iiint_{(f)} N_i f\, dv+\iint_{\Sigma_f} N_i\alpha d\sigma,$$

Таблица 1. Точные и приближенные значения функций H(x, y, z) и C(x, y, z)

№ узлов	Функция H(x, y, z)		Функция C(x, y, z)	
	Точные значения	Приближенные значения	Точные значения	Приближенные значения
z=0				
2	1,231	1,223	2,462	2,446
4	1,252	1,245	2,503	2,503
7	1,122	1,121	2,245	2,251
8	1,163	1,174	2,325	2,332
14	1,121	1,142	2,241	2,253
19	1,000	1,012	2,000	2,011
20	1,040	1,039	2,080	2,058
22	1,250	1,250	2,500	2,513
z=0,2				
39	1,271	1,298	2,542	2,566
41	1,292	1,299	2,583	2,623
44	1,162	1,174	2,325	2,330
45	1,202	1,214	2,405	2,434
51	1,161	1,174	2,321	2,371
56	1,040	1,047	2,080	2,114
57	1,080	1,084	2,160	2,205
59	1,290	1,301	2,580	2,630
z=0,4				
76	1,391	1,361	2,782	2,830
78	1,412	1,379	2,823	2,873
81	1,282	1,288	2,565	2,575
82	1,322	1,320	2,645	2,673
88	1,281	1,299	2,561	2,582
93	1,160	1,169	2,320	2,323
94	1,200	1,201	2,400	2,378
96	1,410	1,385	2,820	2,877

где

$$q(N_i, N_j) = \frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y} + \frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial N_j}{\partial z},$$

$$p(v, N_i) = v_x \frac{\partial N_i}{\partial x} + v_y \frac{\partial N_i}{\partial y} + v_z \frac{\partial N_i}{\partial z}.$$

Для проверки работы алгоритма и программы решена тестовая задача при следующих исходных данных: областью фильтрации является цилиндр $V=\{x^2+y^2 \le 0{,}25,\ 0 \le z \le 0{,}4\}$, который разбит на две равные части высотой $\Delta z=0{,}2$, а основание – на 54 треугольных элемента с максимальной длиной сторон $\Delta x=\Delta y=0{,}2$, так что область V состоит из 108 треугольных призм с общим числом узлов (вершин) 111. Функции, фигурирующие в задачах (1), (2) и (3), (4), имеют вид:

$k(x, y, z)=x+y+z+2$, $D(x, y, z)=2k(x, y, z)$, $W(x, y, z)=-4[2k(x, y, z)-1]$, $G(x,y,z)=-20[D(x, y, z)-1]$. Искомыми функциями являются $H(x, y, z)=x^2+y^2+z^2+1$, $C(x, y, z)=2H(x, y, z)$. В табл. 1 приведены точные и приближенные значения этих функций, соответствующие первому октанту цилиндра.

Результаты счета свидетельствуют о хорошем согласии погрешности аппроксимации с теоретической оценкой $O(\Delta x^2+\Delta y^2+\Delta z^2)$.

Сравнительно быстрый рост погрешности в расчете концентрации загрязняющего вещества объясняется тем, что она аккумулирует погрешности обеих задач, к тому же по результатам решения задачи фильтрации выполняется некорректная операция численного дифференцирования напорной функции.

Список использованной литературы:
1. Веригин Н.Н. Некоторые вопросы химической гидродинамики, представляющие интерес для мелиорации и гидротехники. //Изв. АН СССР, ОТН, №10, 1953. – с. 1369-1382.
2. Веригин Н.Н., Шержуков Б.С. Диффузия и массообмен при фильтрации жидкостей в пористых средах. В кн.: Развитие исследований по теории фильтрации в СССР. – М.: Наука, 1959. – с. 237-313.
3. Гидродинамические и физико-химические свойства горных пород. Под ред. Н. Н. Веригина. – М.: Недра, 1977. – 272 с.
4. Бэр Я., Заславски Д., Ирмей С. Физико-механические основы фильтрации воды. – М.: Мир, 1971. – 452с.
5. Гавич И.К. Теория и практика моделирования в гидрогеологии. – М.: Недра, 1980. – 385 с.
6. Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов. – М.: Мир, 1979. – 392 с.
7. Мурзакматов М.У., Исабеков К.А. Приближенное решение краевой задачи пространственной стационарной фильтрации подземных вод. В настоящем сборнике.