

Министерство образование и науки Российской Федерации

---

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ**

---

К.В. Зотов, Т.Н. Кучурина

**ОСНОВЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ  
МАССОПЕРЕНОСА В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ**

Часть I

Учебное пособие

Санкт-Петербург  
2014

## **ОСНОВЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ МАССОПЕРЕНОСА В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ. Часть I: Учебное пособие / К.В. Зотов, Т.Н. Кучурина.**

Учебное пособие соответствует требованиям ФГОС по формированию профессиональных компетенций.

В первой части учебного пособия приведены основные сведения о исходных данных, необходимых для моделирования массопереноса в пористой среде. Рассматриваются основы гидрогеологии, свойства водопроницающих и водонепроницающих пород и грунтовых вод. Кратко излагаются физико-математические основы фильтрации и переноса растворенных веществ в грунтовых водах.

Пособие предназначено для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлениям подготовки бакалавров и дипломированных специалистов 280100 «Природообустройство и водопользование» и 280401 «Мелиорация, рекультивация и охрана земель», по дисциплинам «Моделирование процессов массопереноса», «Инженерная подготовка территории «Мелиорация земель», "Водохозяйственные системы и водопользование". Может быть использовано в процессе курсового и дипломного проектирования.

Табл. 3. Ил. 8.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	4
1. ВИДЫ ВОДОНОСНЫХ ГОРИЗОНТОВ.....	6
2. ПАРАМЕТРЫ ПРОЦЕССОВ МАССОПЕРЕНОСА В ПОРИСТЫХ ТЕЛАХ .....	8
2.1. ГИДРАВЛИКА ГРУНТОВЫХ ВОД.....	8
2.1.1. Свойства грунтовой и инфильтрующейся воды. ....	8
2.1.1.1. Плотность .....	8
2.1.1.2. Вязкость .....	9
2.1.1.3. Поверхностное натяжение.....	9
2.1.1.4. Сжимаемость жидкости.....	9
2.1.1.5. Выводы.....	10
2.1.2. ДИНАМИКА ГРУНТОВЫХ ВОД.....	10
2.1.2.1. Проницаемость.....	10
2.1.2.2. Гидравлическая проводимость.....	10
2.1.2.3. Закон Дарси .....	11
2.1.2.4. Водопроницаемость .....	13
2.1.2.5. Водоотдача .....	13
2.1.2.5. Типы водоносных горизонтов.....	14
НАПОРНЫЕ ВОДОНОСНЫЕ ГОРИЗОНТЫ .....	14
БЕЗНАПОРНЫЕ ВОДОНОСНЫЕ ГОРИЗОНТЫ .....	15
ПОЛУНАПОРНЫЕ ВОДОНОСНЫЕ ГОРИЗОНТЫ .....	16
2.1.2.5. Дифференциальные уравнения движения грунтовых вод.....	17
2.2. Перенос растворенных веществ в грунтовых водах.....	20
2.2.1 Диффузия.....	21
ДИФфузия в ПОРИСТОЙ СРЕДЕ .....	22
2.2.2. Конвекция .....	22
2.2.3. Дисперсия.....	23
ГИДРОДИНАМИЧЕСКАЯ ДИСПЕРСИЯ.....	24
2.2.4. Коэффициент уменьшения .....	25
ИОННЫЙ ОБМЕН .....	25
СОРБЦИЯ.....	27
РАВНОВЕСНАЯ СОРБЦИЯ.....	28
РАДИОАКТИВНЫЙ РАСПАД, РАЗЛОЖЕНИЕ БАКТЕРИЯМИ И БИОХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ .....	30
2.2.5. Уравнения массопереноса в грунтовых водах.....	31
3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА В ГРУНТОВЫХ ВОДАХ.....	34

## Введение

Наличие надежных источников пресной воды является неременным условием для успешного и устойчивого развития как отдельных регионов Земли, так и всей планеты в целом. Проблемы водоснабжения и охраны водных ресурсов от всех видов загрязнения, сохранения количественных запасов пресной воды и их рационального, бережного использования всегда актуальны.

Основная масса воды приходится на долю морей и океанов. Однако, использование этой воды в народно-хозяйственных целях в настоящее время очень дорого в связи с большими материальными и энергетическими затратами на опреснение соленых морских и океанических вод. Поэтому лишь малая часть воды на планете пригодна для использования в качестве питьевой воды, а также для промышленного и сельскохозяйственного водоснабжения. К сожалению, количество и качество этой воды неуклонно снижается, причем в последние годы этот процесс, несмотря на предпринимаемые во всем мире срочные меры, приобретает колоссальные масштабы. В результате антропогенной и техногенной нагрузки безжалостно загрязняются и истощаются огромные водные бассейны, снабжающие водой крупные регионы. Положение усугубляется неблагоприятными климатическими условиями последних десятилетий.

Хозяйственная деятельность человека способствует сильному загрязнению воды. Огромный вред водным ресурсам наносится также загрязнением почвы и атмосферы. Результатом резкого ухудшения качества воды и ее дефицита стали участвовавшие в последнее время эпидемии и вспышки инфекционных заболеваний, хотя и там, где этого не происходит, использование некондиционных вод пагубно сказывается на здоровье людей.

В настоящее время сохранение и рациональное использование водных ресурсов для многих областей земли является самой главной и первоочередной

задачей, решение которой открывает возможности для дальнейшего развития территории.

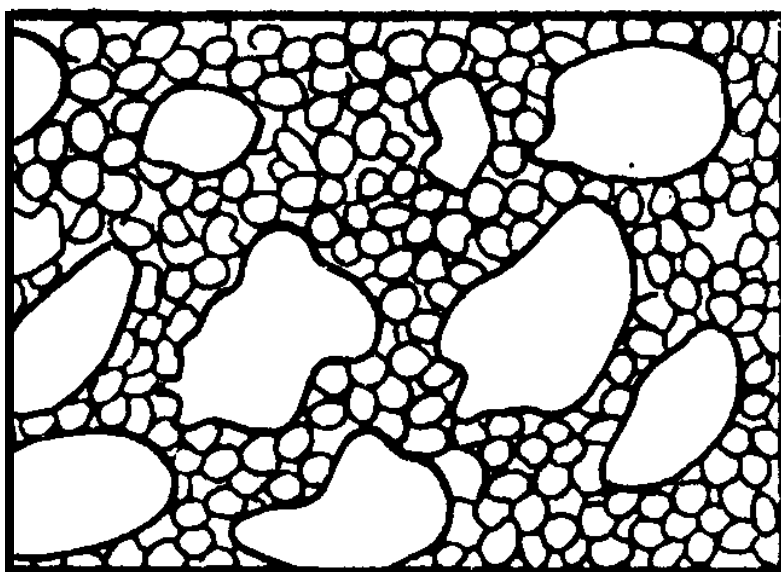
Отрицательные изменения качества и уменьшение запасов воды коснулось как поверхностных, так и подземных вод. Тем не менее, грунтовые пресные воды по качеству значительно превосходят воды поверхностных водоемов, которые в гораздо большей степени подвержены загрязнению; в связи с этим использование для водоснабжения грунтовых вод предпочтительнее. Более того, во многих областях земного шара подземные воды являются главным, а подчас и единственным источником водоснабжения. Необходимо отметить, что запасы подземных вод, как и поверхностных, чутко реагируют на изменение окружающей среды. Бурная эксплуатация подземных водоносных горизонтов вызвала резкое снижение уровней грунтовых вод; большое количество вредных производств, складирование промышленных и бытовых отходов, сельское хозяйство, военные полигоны пагубно сказываются на качестве грунтовых вод. Несмотря на это, подземные воды еще долго не потеряют своего значения. В больших городах люди выстраиваются в очереди у источников подземных вод (родников и колодцев). На прилавках магазинов появились бутылки с питьевой водой. В средствах массовой информации проводятся широкие кампании по рекламе бытовых фильтров для очистки воды. Фильтры в квартирах и на производстве призваны выполнять роль, которую в природе играют почво-грунты. На этом фоне следует признать недостаточность мер, принимаемых человеком, призванных защитить количественные и качественные запасы подземных вод, пригодных для водоснабжения. Однако ход событий явно показывает, что сама природа не может справиться с теми проблемами, которые поставило перед ней человечество. Необходимо срочное практическое вмешательство, подкрепленное детальными теоретическими исследованиями, чтобы сохранить подземные воды, которые сегодня являются по настоящему полезными ископаемыми.

## 1. Виды водоносных горизонтов

Процессы массопереноса в грунтовых водах, являющиеся следствием антропогенного воздействия, существенно определяются типом водоносного горизонта, под которым понимают геологические породы способные содержать и проводить воду.

В общем различают два вида водоносных горизонтов:

- 1) пористые водоносные горизонты, в которых грунтовая вода движется равномерно через весь общий объем породы

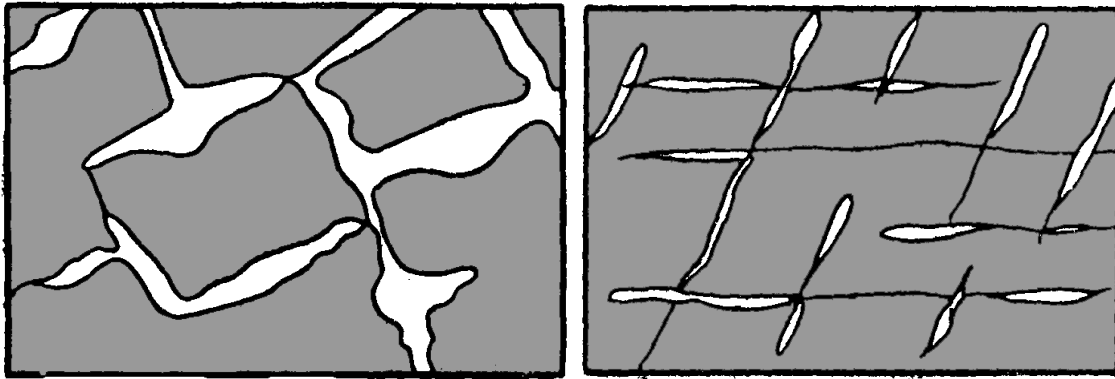


- 2) горные (скальные) водоносные горизонты, в которых вода движется по определенным, главным путям фильтрации. Горные водоносные горизонты делятся на трещиноватые и карстовые.

Кроме названных, существуют породы, способные содержать, но не проводить воду (например, глины) и наоборот (например мало трещиноватый гранит). Эти породы являются практически непроницаемыми и при достаточной мощности представляют собой границы водоносных горизонтов.

Основу пористых водоносных горизонтов составляют продукты физико-химического выветривания. Эти материалы могут частично содержать

значительное количество органических веществ. В инженерной и агрономической терминологии природные дисперсные пористые материалы называют «почва», «грунт». При этом понятие почва, как правило применяется для верхнего плодородного слоя.



Важнейшими физическими свойствами почв и грунтов для движения грунтовых вод являются:

- пористость и связанный с ней коэффициент водоотдачи,
- гидравлическая проводимость (проницаемость) определяемая структурой порового пространства и степенью насыщения грунта.

Общая пористость показывает, какую долю в общем объеме грунта составляет объем пор. При этом объемная пористость  $n$  определяется:

$$n = \frac{(V_{\text{общ}} - V_{\text{тв}})}{V_{\text{общ}}};;$$

где  $V_{\text{общ}}$  - общий объем, а  $V_{\text{тв}}$  - объем твердой фазы. Таким образом пористость может изменяться от 0 до 1 или от 0 до 100%.

Решающей для движения грунтовых вод и массопереноса является эффективная или активная пористость  $n_e$  (проводящая, транзитная часть пор), которая естественно меньше общей пористости:  $n_e < n$ . Эффективная пористость определяется наличием тупиковых пор, заземленного воздуха и дифференциальной пористостью (распределением пор по размерам). В таблице 1. даются значения пористости для различных грунтов.

Таблица 1. Пористость грунтов

Наименование грунта	Пористость
Гравий (d=2 - 20 мм)	0,30 - 0,40
Пески(d=0,05 - 2.0 мм)	0,30 - 0,45
Супесь	0,35 - 0,45
Суглинок	0,35 - 0,50
Глина	0,40 - 0,55
Торф	0,60 - 0,80

Для трещиноватых горных пород вводится понятие трещиноватости по аналогии с пористостью, т.е. отношение объема трещин к общему объему образца грунта.

## 2. Параметры процессов массопереноса в пористых телах

### 2.1. Гидравлика грунтовых вод

#### 2.1.1. Свойства грунтовой и инфильтрующейся воды.

В результате антропогенной деятельности с поверхности земли в водоносные горизонты поступает большое количество загрязненной воды. Это происходит в результате утечек из различных резервуаров, фильтрации воды через массу промышленных и бытовых свалок, сельскохозяйственного производства, высокого загрязнения армейских полигонов.

Инфильтрующаяся вода может иметь большое содержание растворенных веществ и повышенную температуру, что существенно влияет на ее физические свойства.

##### 2.1.1.1. Плотность

В большинстве случаев для моделирования процессов массопереноса в пористых системах достаточно рассматривать значение пористости воды  $\rho = 1000 \text{ кг/м}^3$ . При этом необходимо учитывать, что при наличии большого



количества растворенных веществ и/или повышенной температуре, плотность воды изменяется, что может оказать заметное влияние на поток грунтовых вод и процесс распространения загрязняющих веществ.

#### 2.1.1.2. Вязкость

Вязкость представляет собой силу сопротивления, с которой частицы жидкости противостоят усилию сдвига друг относительно друга. Различают динамическую вязкость  $\eta$  в единицах  $\text{Па}\cdot\text{с} = \text{Н}\cdot\text{с}/\text{м}^2 = \text{кг}/\text{м}\cdot\text{с}$  (в старой литературе встречается 1Пуаз (Пуазейль) =  $10^{-5}$  Па\*с); и кинематическую вязкость  $\nu = \eta/\rho$  в  $\text{м}^2/\text{с}$  (ранее 1Ст (Стокс) =  $10^{-8}$  м<sup>2</sup>/с).

Вязкость существенно зависит от температуры. Так вода, фильтрующаяся через объем полигона ТБО (твердых бытовых отходов), как правило имеет более высокую температуру, а в результате меньшую вязкость, чем нижележащие грунтовые воды, что обуславливает разную скорость фильтрации воды одного химического состава, но разной температуры.

#### 2.1.1.3. Поверхностное натяжение

Поверхностное натяжение обусловлено ван-дер-ваальсовскими силами притяжения между молекулами жидкости. Поверхностным натяжением, гидрофильностью твердой поверхности, формой и размером поры определяется высота капиллярного поднятия. Чем тоньше поры, тем выше высота капиллярного поднятия

#### 2.1.1.4. Сжимаемость жидкости

Для рассматриваемых здесь процессов и водоносных горизонтов исходят из несжимаемости воды. Так 1 кубический метр воды с глубины 100 м под уровнем грунтовых вод поднятый на поверхность воды увеличивает свой объем при атмосферном давлении на 0.5 литра, что составляет не более 0.05%.

#### 2.1.1.5. Выводы

Для грунтовых вод верхних водоносных горизонтов (до глубины 100 м от поверхности земли) необходимо учитывать плотностные потоки, как результат растворения солей и/или изменения температуры. Другие рассмотренные факторы, за исключением изменения вязкости в случае инфильтрации нагретых вод, влияют в меньшей степени. Капиллярные эффекты могут применяться при разработке мероприятий по предотвращению распространения облака загрязнения.

### **2.1.2. Динамика грунтовых вод**

#### 2.1.2.1. Проницаемость

Тензор проницаемости  $K$  описывает сопротивление, которое грунт оказывает потоку гомогенной жидкости. Он рассматривается в общем как независимый от свойств жидкости.  $K$  имеет размерность площади [ $m^2$ ].

Также сегодня еще в нефтедобывающей отрасли и в старой литературе проницаемость дается в «исторических» единицах - Darcy. При этом  $1 \text{ Darcy} = 9.8697 \cdot 10^{-13} m^2$ .

#### 2.1.2.2. Гидравлическая проводимость

В то время, как проницаемость является характеристикой грунта, которая не учитывает такие свойства жидкости, как динамическая вязкость  $\eta$  и плотность  $\rho$ , тензор гидравлической проводимости  $k$  описывает систему «жидкость - пористая среда». Гидравлической проводимостью называют отношение плотности потока к гидравлическому градиенту. Гидравлическая проводимость имеет размерность скорости [ $m/c$ ].

Если все поры заполнены водой, имеет место полная гидравлическая проводимость, которую называют коэффициентом фильтрации  $k_f$ .

Коэффициент фильтрации связан с проницаемостью следующим соотношением:

$$k_{\phi} = K * \frac{\rho g}{\eta}.$$

Так как  $k_{\phi}$  обратно пропорционален вязкости, гидравлическая проводимость зависит от температуры. В таблице 2. приведены значения коэффициентов полной гидравлической проводимости (коэффициентов фильтрации) для различных почво-грунтов.

Таблица 2 Коэффициенты фильтрации различных почво-грунтов

Наименование грунта	Коэффициент фильтрации см/с
Песок	1.0 – 0.01
Песок глинистый	0.01 – 0.005
Супесь	0.005 – 0.003
Суглинок	0.001 – 0.00005
Глина	0.0005 – 0.0000005
Лесс	0.0005 – 0.00001
Торф мало разложившийся	0.006 – 0.002
Торф средне разложившийся	0.0008 – 0.0002

В случае неполного насыщения пористой среды водой коэффициент гидравлической проводимости называют коэффициентом влагопроводности. Его величина зависит структуры порового пространства и степени насыщения или влажности грунта.

### 2.1.2.3. Закон Дарси

Передвижение влаги в почво-грунтах подчиняется основному закону переноса массы и энергии, согласно которому плотность потока  $q$  пропорциональна градиенту движущих сил. Плотность потока имеет

размерность скорости  $q = m/c$ . В случае полного заполнения пор влагой, т.е. в насыщенных почво-грунтах, происходит фильтрация воды под влиянием градиента положительного потенциала давления  $p$  или гидравлического напора  $H$ .

Фильтрационный закон Дарси описывает взаимосвязь между скоростью фильтрации  $V$  и градиентом давления  $p$ . Для изотропной среды это выглядит как:

$$\bar{V} = -k_e * grad p$$

Движение воды в ненасыщенной пористой среде подчиняется основному закону переноса массы и подобно течению воды в насыщенных грунтах вызывается движущей силой, возникающей в результате градиента потенциала давления. Различие этих двух механизмов движения воды в почве состоит в том, что в насыщенном грунте движущей силой является градиент положительного потенциала, в то время как в случае движения воды в ненасыщенном грунте это градиент отрицательного потенциала или эквивалентного ему всасывания. Давление почвенной влаги в ненасыщенной зоне зависит от влажности почвы:  $p(W)$ .

Ричардсон предложил использовать закон Дарси также и для ненасыщенной почвы:

$$\bar{V} = -k_e(W) * grad p(W)$$

где  $V$  - плотность потока,  $k_v(W)$  - коэффициент влагопроводности,  $grad p(W)$  – градиент давления почвенной влаги.

Скорость фильтрации  $V$  определяется как расход жидкости  $Q$  через сечение определенной площади  $F$  и может быть записана в следующем виде:

$$\bar{V} = \frac{Q}{F}.$$

Действительная скорость фильтрации  $\bar{V}_a$  соответствует пористости материала в рассматриваемом сечении и является скоростью движения частиц жидкости. Скорость фильтрации связана с действительной соотношением:

$$\bar{V}_a = \frac{\bar{V}}{n_e}.$$

#### 2.1.2.4. Водопроницаемость

Водопроницаемость  $T$  есть мера количества воды, которое переносится через единицу ширины и полную мощность насыщенную зону водоносного горизонта при гидравлическом градиенте  $I = 1$ . Водопроницаемость определяют как произведение полной гидравлической проницаемости  $K$  ( $k_\phi$ ) и мощности насыщенной зоны  $M$  водоносного горизонта:

$$T_M = M * k_\phi$$

#### 2.1.2.5. Водоотдача

Водоотдача (насыщение) – емкостная характеристика пласта. Водоотдача происходит либо путем изменения степени заполнения пор водой, либо в результате изменения порового объема водоносных пород и плотности воды, т.е. свободная емкость и упругая емкость.

Различают удельный коэффициент водоотдачи  $S_0$  [ $m^{-1}$ ] и безразмерный коэффициент водоотдачи  $S$ . Удельный коэффициент водоотдачи определяется как изменение объема воды в единице объема при изменении уровня грунтовых вод на 1 метр.

В безнапорных пластах при нестационарном режиме происходит осушение или насыщение пласта. Эти процессы характеризуются коэффициентом гравитационной емкости пласта  $\mu$  – изменение количества воды отнесенное к объему породы. Водоотдача значительно меньше активной

пористости. Для легких грунтов она составляет от 0.1 до 0.25, а для тяжелых от 0.05 до 0.15

В напорном водоносном горизонте удельный коэффициент водоотдачи определяется через эластичность скелета грунта и сжимаемость жидкости:

$$S_0 = \rho g \left( \frac{1-n}{E} \right) + n_s c,$$

где  $\rho$  – плотность жидкости,

$g$  – ускорение свободного падения

$n_s$  – пористость грунта, определяющая водоотдачу,

$E$  – эластичность скелета грунта,

$c$  – сжимаемость жидкости.

Твердую фазу почвы рассматривают как несжимаемую, а под пористость грунта, определяющей водоотдачу  $n_s$  понимают транзитную пористость. При этом, как правило  $n_s < n$ .

В безнапорном водоносном горизонте водоотдача зависит от направления процесса (осушение или наполнения объема), и может быть связана с пористостью грунта.

Чем меньше значение коэффициента водоотдачи, тем больше при отборе воды депрессионная воронка скважины.

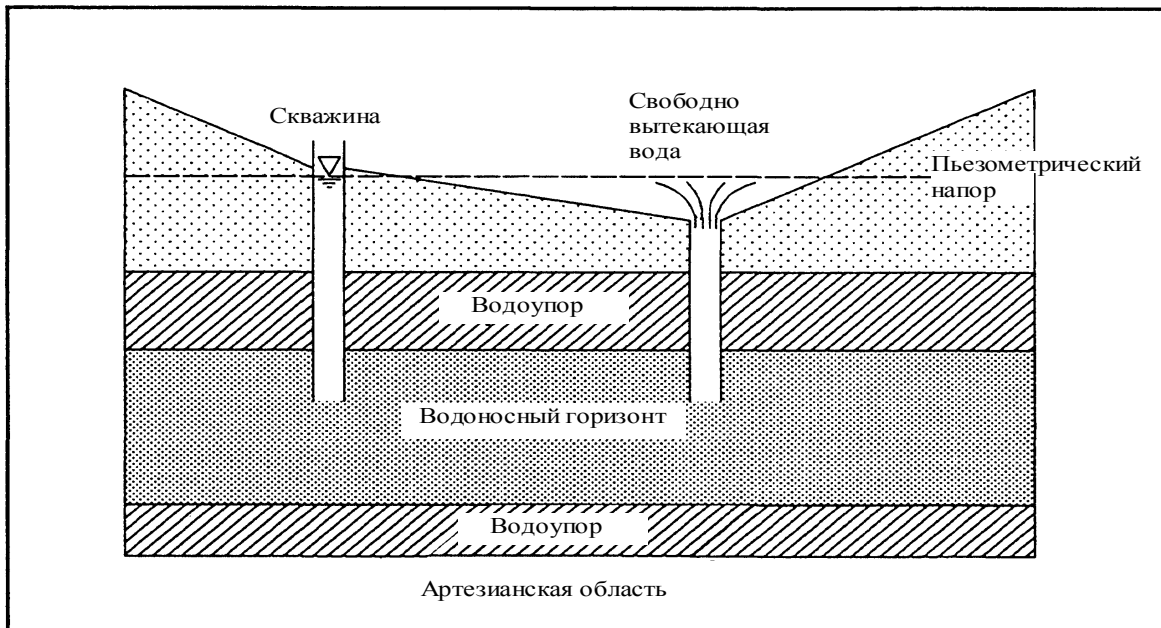
#### 2.1.2.5. Типы водоносных горизонтов

В природе существуют различные типы водоносных горизонтов. Различают три основных, между которыми можно выделить большое число смешанных и переходных форм.

#### **Напорные водоносные горизонты**

Напорные водоносные горизонты ограничены сверху и снизу водонепроницаемыми пластами. Синонимом напорных грунтовых вод является

понятие - артезианские. Часто артезианскими называют такие грунтовые воды, пьезометрический уровень которых выше уровня земли. В этом случае, из пробуренной скважины, вода будет свободно вытекать. В общем случае напорных водоносных горизонтов пьезометрический уровень выше верхнего уровня воды, ограниченного непроницаемым слоем.



### **Безнапорные водоносные горизонты**

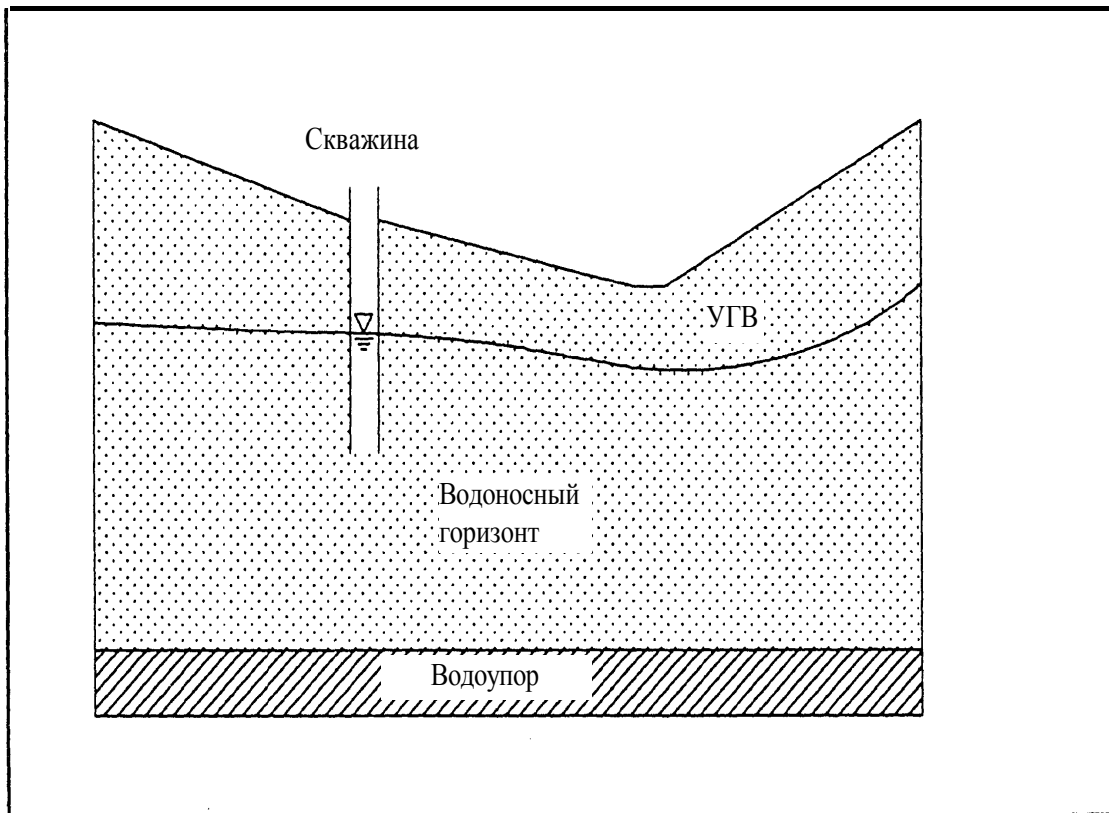
В безнапорном водоносном горизонте, который также называют фреатическим или свободным, поверхность воды образует верхнюю границу насыщенной зоны. Во фреатическом водоносном горизонте различают две области:

- насыщенная зона, в которой все поры заполнены водой,
- ненасыщенная зона или зона аэрации, в которой вода в адсорбционной, пленочной, капиллярной и гравитационной формах вместе с почвенным воздухом заполняет поровое пространство.

Переход между двумя зонами осуществляет капиллярная кайма.

Давление жидкости в ненасыщенной зоне ниже атмосферного, давление в насыщенной зоне, которое называют напором, - выше и распределено по гидростатическому закону. Плоскость, на которой давление соответствует

атмосферному обозначают как поверхность (зеркало или уровень) грунтовых вод.

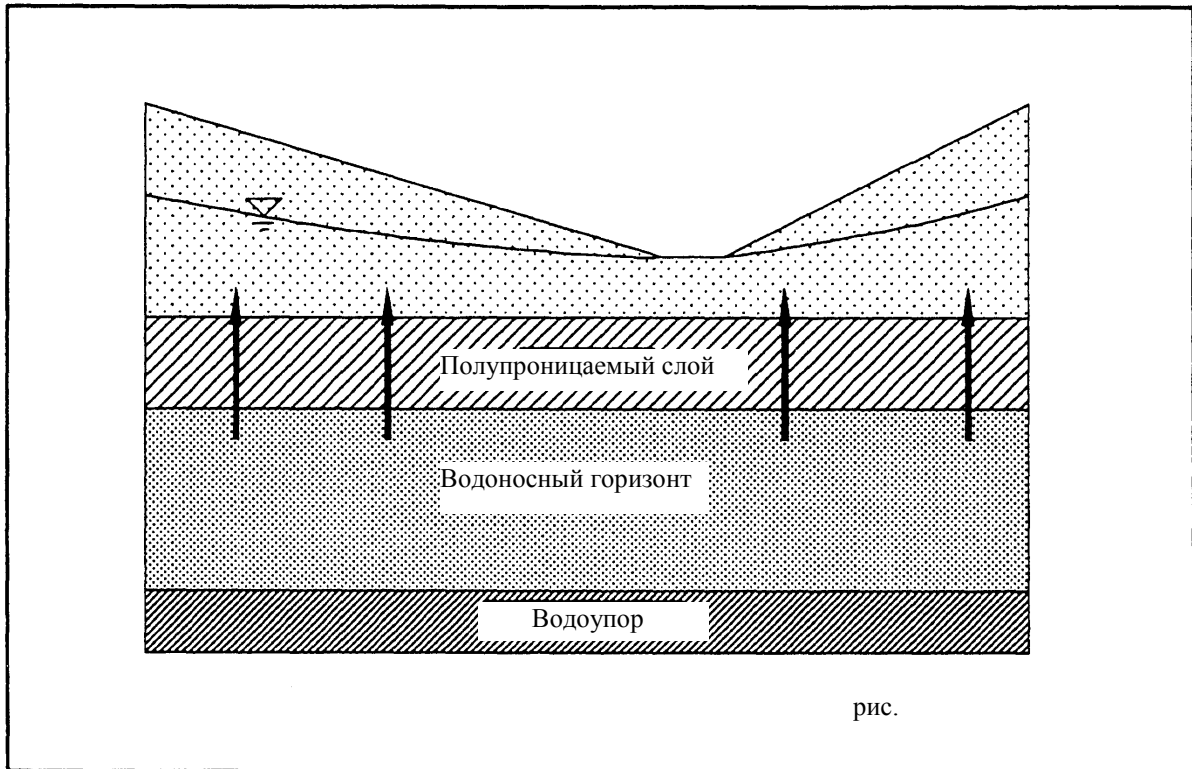


### ***Полунапорные водоносные горизонты***

Полунапорными водоносными горизонтами называют водоносные пласты, ограниченные либо сверху, либо снизу полупроницаемым слоем. В этом случае второй границей является непроницаемый пласт. Возможен вариант, когда роль как верхней, так и нижней границы выполняют полупроницаемые пласты. Через полупроницаемые слои грунтовые воды могут втекать в водоносные горизонты, или вытекать из них. Несмотря на то, что слои, ограничивающие водоносный пласт, имеют более низкую, по сравнению с ним, проводимость, то при большой площади горизонтального контакта значительное количество грунтовой воды может поступать в водоносный горизонт или вытекать из него. Часто полупроницаемые слои рассматривают как мембраны с вертикальным



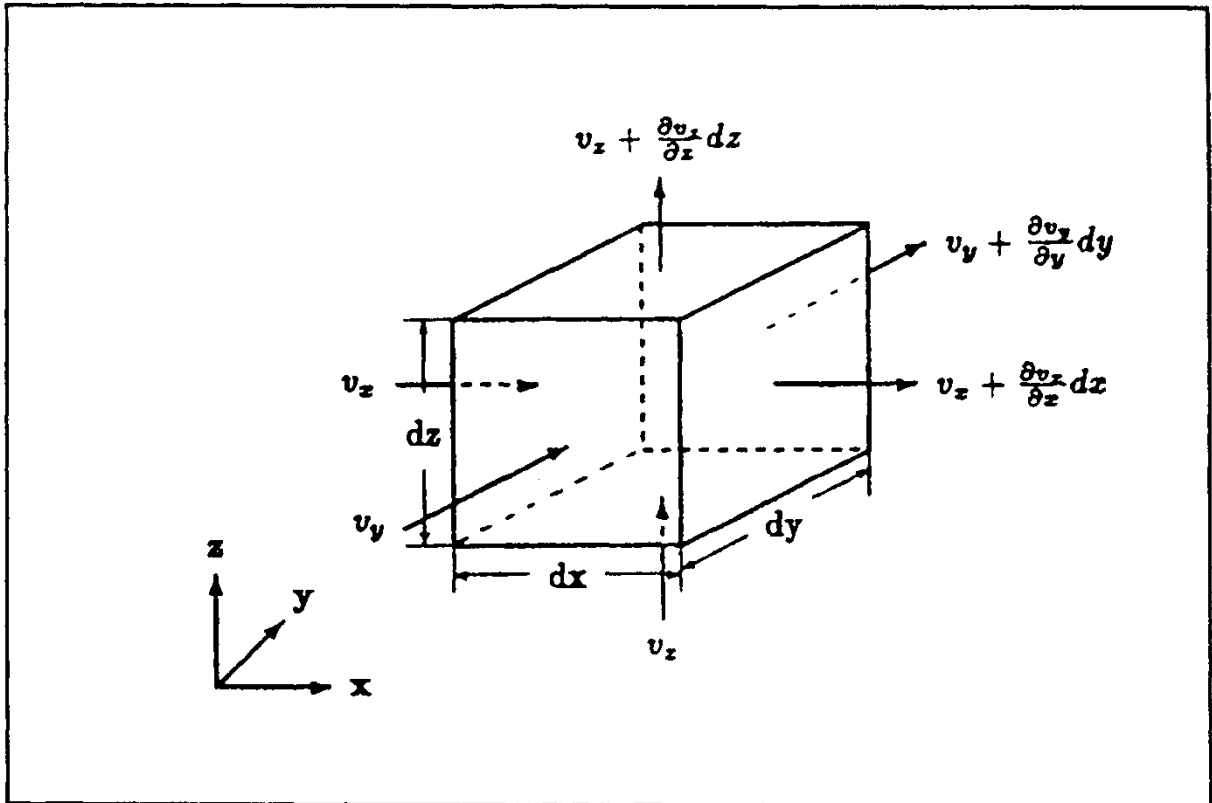
грунтовым потоком. Это тем более справедливо при очень малой проницаемости и относительно небольшой мощности этих слоев, по сравнению с водоносным горизонтом.



#### 2.1.2.5. Дифференциальные уравнения движения грунтовых вод

Рассмотрим контрольный объем внутри водоносного горизонта. Объем, кубической формы, остается неизменным во времени. Изменение массы  $m$ , которая содержится в этом объеме, определяется как разница между входящим и выходящим потоком массы через границы объема, а также содержания количества воды внутри данного объема:

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \dot{m}_{\text{вх}} - \dot{m}_{\text{вых}} + \rho g \, dx \, dy \, dz$$



При этом подставляя в предыдущее уравнение

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \rho S_0 \frac{\partial h}{\partial t} dx dy dz,$$

$$\dot{m}_{\text{вх}} = \rho(v_x dy dz + v_y dx dz + v_z dx dy)$$

и

$$\dot{m}_{\text{вых}} = \rho \left[ \left( v_x + \frac{\partial v_x}{\partial x} dx \right) dy dz + \left( v_y + \frac{\partial v_y}{\partial y} dy \right) dx dz + \left( v_z + \frac{\partial v_z}{\partial z} dz \right) dx dy \right]$$

и разделив на  $\rho dx dy dz$  получим:

$$S_0 \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = q,$$

ИЛИ

$$S_0 \dot{h} + \text{div } \vec{v} = q.$$

Подставляя вместо  $\vec{v}$   $[-(k \text{ grad } h)]$ , согласно закону Дарси, получим для потока грунтовых вод дифференциальное уравнение второго порядка параболического типа в частных производных с неизвестным  $h$ :

$$S_0 \dot{h} - \text{div} (k \text{ grad } h) = q.$$

В условиях ненасыщенного грунта используется коэффициент влагопроводности и всасывающее давление почвенной влаги.

Для получения единственного решения  $h(x,y,z,t)$  задают

- начальные значения напора во всех узлах области моделирования в форме  $h(x,y,z,t) = f_0(x,y,z)$  и
- граничные условия.

Граничные условия

Обычно граничные условия делят на три вида:

Граничное условие 1-го рода (граничное условие Дирихле), при котором известны давление  $p$  почвенной влаги или пьезометрический напор на границе  $\Gamma$  в зависимости от времени:

$$p(\Gamma t) = f_1(\Gamma, t).$$

Типичные граничные условия первого рода: контакт грунта и водного тела (водоток, водоем, скважина, горизонтальная или вертикальная дрена); граница раздела сильнопроницаемого слоя грунта и слабопроницаемого, если рассматривается поток в слое слабопроницаемого грунта;

Граничное условие 2-го рода (граничное условие Ноймана), при котором задана, как функция времени  $B$  интенсивность источника, т.е. градиент потенциала давления на границе (с нормалью  $n$  к поверхности):

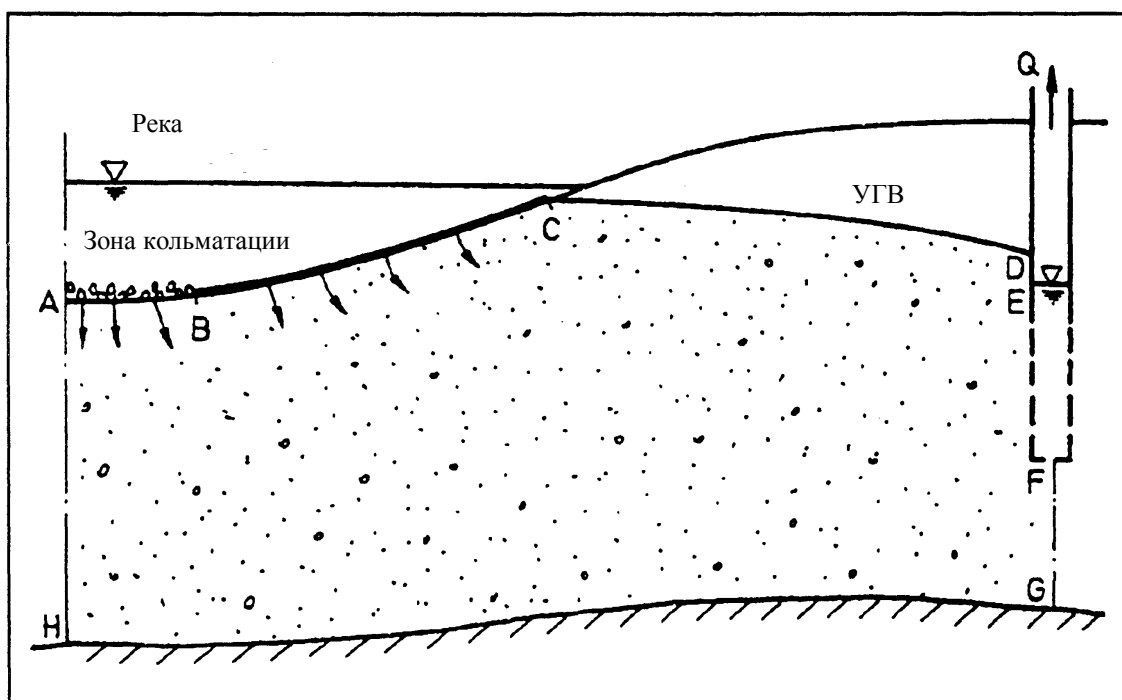
$$\frac{\partial h}{\partial n}(\Gamma, t) = f_2(\Gamma, t).$$

Типичные граничные условия второго рода: граница раздела сильнопроницаемого слоя грунта и слабопроницаемого, если рассматривается поток в слое сильнопроницаемого грунта; ось симметрии потока.

Граничное условие 3-го рода, при котором между площадью с известным распределением давлением и границей поля течения лежит сопротивление (здесь обозначенное как  $A$ ), зависящее от времени:

$$h(\Gamma, t) + A(\Gamma) \frac{\partial h}{\partial n} = f_3(\Gamma, t).$$

Типичные граничные условия третьего рода: закольматированный участок контакта грунта и водного тела.



## 2.2. Перенос растворенных веществ в грунтовых водах

Моделирование распространения загрязнений в грунтовых водах может быть успешным только в случае правильного понимания механизмов, которые определяют движение растворенных веществ в потоке грунтовых вод.

В действительности эти процессы могут оказаться крайне сложными и являющимися в настоящее время предметом интенсивных исследований. Однако, они могут на макроскопическом уровне быть записаны через известные математические формулировки.

В основном выделяют следующие процессы, влияющие на перенос растворенных веществ:

- 1) диффузия - движение ионов, молекул и комплексных соединений на основе броуновского движения из области с высокой концентрацией к области с более низкой концентрацией,
- 2) конвекция (часто используется термин *адвекция*) - перенос растворенных веществ потоком жидкости,
- 3) дисперсия - разделение фильтрующегося потока, обусловленное структурой порового пространства, уменьшает концентрацию и увеличивает объем облака загрязнения,
- 4) физико-химические и биологические процессы, такие как ионный обмен, радиоактивный распад, сорбция, разложение бактериями и др.

### 2.2.1 Диффузия

Диффузия растворенного вещества в воде описывается законом Фика. В одномерной формулировке первый закон Фика выражается как:

$$N = -D_m * \frac{dC}{dx},$$

где  $N$  - поток растворенного вещества на единицу площади в единицу времени [кг/м<sup>2</sup>\*с],  $D_m$  - коэффициент молекулярной диффузии [м<sup>2</sup>/с],  $C$  - концентрация вещества [кг/м<sup>3</sup>],  $dC/dx$  - градиент концентрации [кг/м<sup>3</sup>\*м].

Соответственно второй закон Фика:

$$\frac{dC}{dt} = -D_m * \frac{d^2C}{dx^2},$$

где  $dC/dt$  - изменение концентрации во времени [кг/м<sup>3</sup>\*с].

Коэффициент диффузии электролитов  $D_m$  в воде лежит в пределах от  $1 \cdot 10^{-9}$  м<sup>2</sup>/с до  $2 \cdot 10^{-9}$  м<sup>2</sup>/с.

### **Диффузия в пористой среде**

В пористой среде диффузионные процессы замедляются, так как увеличивается путь молекул и ионов в жидкой фазе в результате их движения по извилистым поровым каналам, вокруг отдельных частиц. Кроме того на снижение скорости диффузии оказывает наличие тупиковых пор и защемленного воздуха. Для того чтобы учесть влияние этих факторов вводят эффективный коэффициент диффузии:

$$D^* = \gamma_i * D_m.$$

Эмпирический коэффициент  $\gamma_i$  объединяет все факторы уменьшающие коэффициент диффузии.

Часто эффективный коэффициент диффузии определяют как произведение коэффициента диффузии и пористости рассматриваемого грунта:

$$D^* = \gamma_i * D_m.$$

При этом не всегда делают различие между общей и эффективной пористостью, хотя это различие может быть значительным.

Следует отметить, что механизм диффузии определяет перенос растворенных веществ, при отсутствии потока грунтовых вод. Так в грунтах с низкой проводимостью вклад диффузии в транспорт растворенных веществ, значительно превосходит действие конвекции.

#### **2.2.2. Конвекция**

Конвекцией называют перенос растворенных веществ потоком фильтрующейся жидкости при скорости равной действительной скорости фильтрации. Действительная скорость фильтрации выше, чем скорость фильтрации, определяемая законом Дарси. В общем, скорость конвекции равна:

$$V_a = \frac{V}{n_e} = \frac{k \text{ grad } h}{n_e},$$

где  $V_a$  – действительная скорость фильтрации,

$V$  – скорость фильтрации, в соответствии с законом Дарси,

$n_e$  – эффективная пористость.

### 2.2.3. Дисперсия

Когда загрязненные воды просачиваются через пористую среду, они смешиваются с чистыми грунтовыми водами. Процесс, который ведет к разбавлению загрязненных вод, называется дисперсией. Различают продольную и поперечную дисперсию. Продольная дисперсия происходит в направлении фильтрационного потока. Поперечной дисперсией обозначают смешение в направлении перпендикулярном направлению фильтрационного потока.

Расширение облака загрязнений в потоке грунтовых вод вызвано двумя причинами. Первая определяется тем, что молекулы или ионы растворенного вещества в пористой среде проходят пути различной длины, вследствие строения структуры порового пространства. Этот процесс называют механической дисперсией. Другой причиной является молекулярная диффузия в направлении уменьшения концентрации растворенного вещества. Комбинацию этих двух процессов называют гидродинамической дисперсией.

Механическая дисперсия может быть продольной и поперечной. Причинами дисперсии служат следующие факторы:

- а) скорость течения жидкости в широких поровых каналах выше, чем в узких,
- б) в поровом канале скорость течения жидкости в середине выше, чем у стенок капилляра, что объясняется силами трения,
- в) молекулы и ионы растворенного вещества проходят в поровом пространстве различные пути,
- г) пересечения и повороты поровых каналов вызывают локальные потоки, которые могут отклоняться от направления потока грунтовых вод на угол до  $180^\circ$ .

Продольную и поперечную дисперсию определяют соответственно как:

$$D'_L = \alpha_L |V_a|, \quad [m^2/c]$$
$$D'_T = \alpha_T |V_a|, \quad [m^2/c]$$

где  $\alpha_L$ ,  $\alpha_T$  – шаг соответственно продольной и поперечной дисперсии [м],  $V_a$  – действительная скорость фильтрации

### **Гидродинамическая дисперсия**

В текущей воде нельзя различить процессы механической дисперсии и диффузии. Поэтому вводят коэффициенты продольной и поперечной гидродинамической дисперсии  $D_L$  и  $D_T$ , которые объединяют эффекты молекулярной диффузии и механической дисперсии:

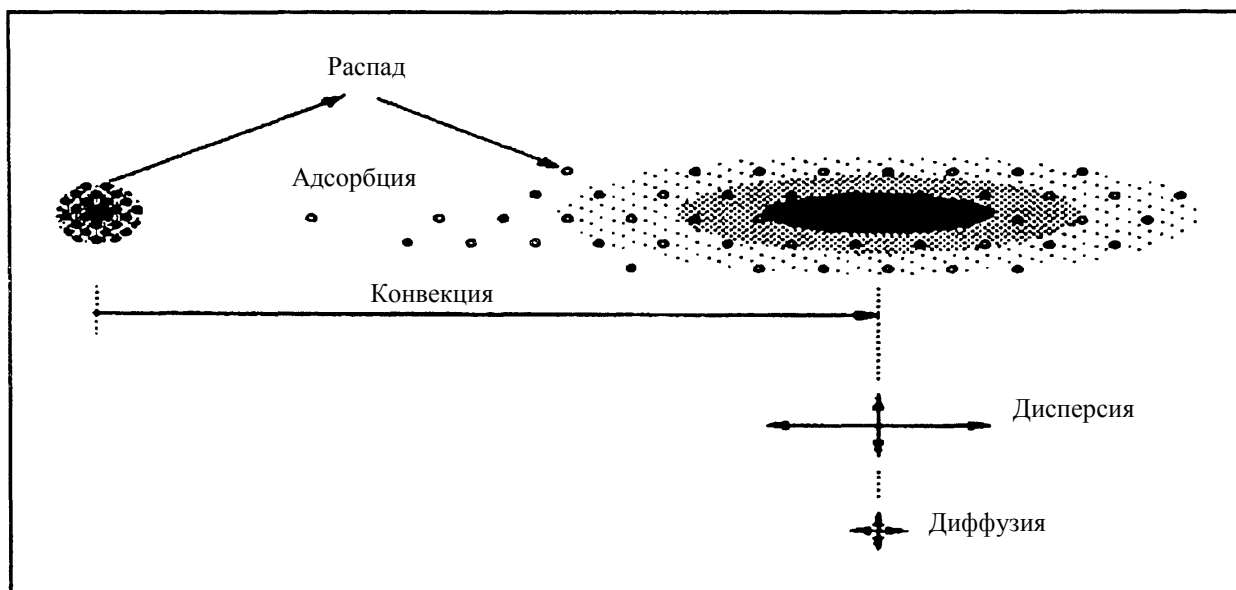
$$\begin{aligned} D_L &= \alpha_L |V_a| + D_m, & [M^2/c] \\ D_T &= \alpha_T |V_a| + D_m, & [M^2/c] \end{aligned}$$

В результате гидродинамической дисперсии контур загрязнения, по мере удаления от источника, увеличивается, а максимальная концентрация уменьшается. При этом продольная дисперсия больше, чем поперечная, что вызывает большее растягивание контура загрязнения в направлении потока грунтовых вод по сравнению с перпендикулярным.

Величина шага гидродинамической дисперсии зависит от гранулометрического состава грунтов, слагающих водоносный горизонт и от масштаба в котором рассматривается процесс фильтрации. Величина шага гидродинамической дисперсии изменяется от 0,01м до 10м. Отношение значений продольной и поперечной дисперсии составляет:

$$\frac{\alpha_T}{\alpha_L} = \frac{1}{5} \div \frac{1}{10}.$$





#### 2.2.4. Коэффициент уменьшения

Просачивающиеся и фильтрующиеся загрязненные подземные воды содержат консервативные и неконсервативные вещества. Консервативные субстанции не вступают в реакции с водовмещающими породами и другими растворенными веществами, они, также, не подвержены биологическому разложению и радиоактивному распаду. В качестве примера консервативного вещества можно привести анионы  $Cl^-$ . Консервативные вещества часто используют как метки в фильтрационных экспериментах.

Неконсервативные вещества могут участвовать в физико- химических реакциях, биологических или радиоактивных процессах, которые изменяют концентрацию веществ в просачивающихся водах. Можно назвать следующие химические реакции: ионный обмен, растворение – осаждение, окислительно – восстановительные. Биологическое разложение и радиоактивный распад имеют одинаковое математическое описание.

#### **Ионный обмен**

Частицы твердой фазы имеют, как правило отрицательный заряд поверхности. Это приводит к образованию вокруг частиц двойного электрического слоя, заполненного катионами раствора (положительно

заряженные ионы). Катионы в двойном слое могут замещаться или обмениваться на другие катионы, введенные в раствор. Общее число зарядов обменных катионов приблизительно постоянно, не зависит от вида присутствующего катиона и является свойством грунта, называемым емкостью катионного обмена. Ее выражают в миллиэквивалентах на грамм почвы.

В естественных условиях емкость катионного обмена практически никогда не бывает насыщена каким-либо одним ионом. Состав обменного комплекса зависит от концентрации и состава окружающего раствора. Эту зависимость выражают в виде уравнения:

$$\frac{S_A^{1/m}}{S_B^{1/n}} = K_{AB} \frac{a_{A^{m+}}^{1/m}}{a_{B^{n+}}^{1/n}},$$

где  $S_A$ ,  $S_B$  – концентрация катионов А и В с валентностью  $m$  и  $n$  в обменном комплексе,

$a_A$ ,  $a_B$  – активность катионов А и В в растворе ,

$K_{AB}$  – активность катионов А и В в растворе,

$$a_i = C_i f_i ,$$

$a_i$ ,  $C_i$ ,  $f_i$ , - соответственно активность, концентрация в растворе и коэффициент активности  $i$ -го иона.

Коэффициент активности  $f$  определяется из уравнения:

$$\lg f_i = - \frac{A z_i^2 \sqrt{I}}{1 + a_i^0 B \sqrt{I}} + CI ,$$

$z$  заряд иона,

$A$  и  $B$  – коэффициенты, зависящие от температуры и давления ( $A \approx 0,5$ ;  $B \approx 0,33e-8$ ),

$I$  – ионная сила раствора,

$a^{\circ}$  – эффективный радиус иона,

$c$  – коэффициент, зависящий от гидратации, диэлектрической постоянной раствора и других факторов.

Ионная сила  $I$  это мера минерализации раствора. Ее определяют как:

$$I = 0.5 \sum_{i=1}^n C_i z_i^2,$$

где  $c_i$  – концентрация,

$z_i$  – заряд иона,

$n$  – количество видов ионов в растворе.

### **Сорбция**

Для многих веществ, растворенных в грунтовых водах, сорбционно-десорбционные процессы между жидкой и твердой фазами грунта имеют важное значение.

Сорбция снижает и замедляет распространение облака загрязнения в подземных водах.

Адсорбция описывает процесс, при котором вещества фиксируются на границе раздела двух фаз. Например на границе жидкость- твердая частица, жидкость- газ, жидкость- жидкость, газ- твердая частица.

Абсорбция характеризует процесс, при котором вещества из одной фазы переходят в другую. Например ионы из раствора мигрируют в кристаллическую решетку глинистых минералов.

Термин сорбция применяют, если разделить процессы адсорбции и абсорбции невозможно.

Процесс обратный сорбции, т.е. поступление ионов из твердой фазы или с границы раздела называют десорбцией.

### **Равновесная сорбция**

В большинстве моделей грунтовых вод исходят из того, что существует сорбционное равновесие в системе жидкость – твердая фаза. Это означает, что время, необходимое для адвекционного и дисперсионного массопереноса, много больше, чем время необходимое для сорбционных процессов. При этом возникает так называемое локальное равновесие между сорбированной и растворенной формами вещества в водоносом горизонте. Концентрацию вещества в сорбированном состоянии  $c_a$  можно выразить как функцию концентрации этого вещества в растворенном виде  $c$ :

$$C_a = f(C)$$

Функцию  $f(c)$  называют изотермой сорбции, которая характеризует равновесие между адсорбированным и растворенным веществом при постоянной температуре. Если существует линейная зависимость между концентрацией сорбированной субстанции и ее концентрацией в растворе, говорят о линейной функции изотермы сорбции (закон Генри). Эту концепцию можно использовать при небольшой концентрации, а в случае нелинейной равновесной сорбции применяют изотермы Фройндлиха и Лэнгмюра.

Для применения изотермы Фройндлиха должны быть известны коэффициент распределения и константа равновесия. Изотерма Лэнгмюра принимает во внимание ограниченность сорбционного пространства на поверхности твердых частиц.

Три выше названных изотермы приведены в таблице 3.

Таблица 3. Изотермы сорбции.

Изотермы для описания процессов сорбции	
Изотерма Генри	
$C_a = K_D C$	
Изотерма Фрейндлиха	
$C_a = K_F C^{n_F}$	
Линеаризованная изотерма Фрейндлиха	
$C_a = \log K_F + n_F \log C$	
Изотерма Лэнгмюра	
$\frac{C}{C_a} = \frac{1}{\alpha \beta} + \frac{C}{\beta} \quad \text{или} \quad C_a = \frac{\alpha \beta C}{1 + \alpha C}$	
<p><math>C_a</math> – масса вещества на единицу массы сорбента [мг/кг] (концентрация в сорбированной форме),</p> <p><math>C</math> – концентрация вещества в растворе в случае равновесия с сорбированным веществом [мг/л],</p> <p><math>K_D</math> – коэффициент распределения [л/кг] (= <math>K_F</math> в изотерме Фрейндлиха при <math>n_F = 0</math>),</p> <p><math>K_F</math> – коэффициент распределения [л/кг],</p> <p><math>n_F</math> константа равновесия [-],</p> <p><math>\alpha</math> – константа сорбции, определяемая энергией связи [л/мг],</p> <p><math>\beta</math> – максимально возможное количество сорбированного вещества [мг/кг].</p>	

Изотермы сорбции определяют замедление или фактор задержки  $R$  распространения концентрации в потоке:

$$R = 1 + \frac{1}{n_e} \rho_s \frac{\partial f(C)}{\partial C},$$

где  $\rho_s$  – плотность твердой фазы грунта.

В случае линейной сорбции фактор задержки определяют как:

$$R = 1 + \frac{\rho_s K_D}{n_e}.$$

Во многих моделях при моделировании транспорта растворенных веществ используется концепция линейной сорбции. Применение изотерм Фрейндлиха и Лэнгмюра ведет к нелинейным транспортным уравнениям, что требует более сложных методов решения.

### **Радиоактивный распад, разложение бактериями и биохимические реакции**

Радиоактивный распад, разложение бактериями и биохимические реакции ведут к уменьшению концентрации вещества как в грунтовых водах, так и в сорбированном состоянии. Если  $N_0$  – первоначальная концентрация нуклидов, то число ядер  $N$ , которое останется после прохождения периода времени  $t$ , можно определить:

$$N = N_0 e^{-\lambda t}.$$

Характеристическая константа распада  $\lambda$  в единицах  $s^{-1}$  является постоянной для определенного нуклида. Часто используют в расчетах период полураспада  $T_{1/2}$ . Период полураспада – это время за которое исходное число ядер уменьшится в два раза в результате радиоактивного распада.  $\lambda$  и  $T$  связаны следующим соотношением:

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}.$$

Скорость, с которой уменьшается концентрация радиоактивного вещества в грунтовых водах, определяется как:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\lambda C.$$

### 2.2.5. Уравнения массопереноса в грунтовых водах.

Изменение концентрации  $C$  некоторого вещества в определенном объеме грунта  $V$ , через который двигаются грунтовые воды за время  $\Delta t$  зависит от концентрации этого вещества в момент времени  $t$  в объеме

$$K_x + \frac{\partial}{\partial x} K_x \Delta x \quad \text{в направлении оси } X$$

$$K_y + \frac{\partial}{\partial y} K_y \Delta y \quad \text{в направлении оси } Y$$

$$K_z + \frac{\partial}{\partial z} K_z \Delta z \quad \text{в направлении оси } Z.$$

Если  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = l$ , то количество растворенного вещества, поступающего в контрольный объем составит:

$$\begin{aligned} K_x - \left( K_x + \frac{\partial}{\partial x} K_x \right) + K_y - \left( K_y + \frac{\partial}{\partial y} K_y \right) + K_z - \left( K_z + \frac{\partial}{\partial z} K_z \right) = \\ = -\frac{\partial}{\partial x} K_x - \frac{\partial}{\partial y} K_y - \frac{\partial}{\partial z} K_z \end{aligned}$$

В грунтовых водах транспорт растворенных веществ, как было сказано выше, осуществляется в результате взаимодействия трех составляющих: диффузии, адвекции и дисперсии.

#### Диффузия

Вклад диффузии в массоперенос в направлении осей  $x$ -,  $y$ - и  $z$ -определяется

Первым законом Фика:

$$K_{x(\text{диф})} = -D \frac{\partial c}{\partial x}$$

$$K_{y(\text{диф})} = -D \frac{\partial c}{\partial y}$$

$$K_{z(\text{диф})} = -D \frac{\partial c}{\partial z}$$

## Адвекция

Конвекционная составляющая массопереноса является произведением концентрации раствора и скорости фильтрации:

$$K_{x(\text{конв})} = v_x c$$

$$K_{y(\text{конв})} = v_y c$$

$$K_{z(\text{конв})} = v_z c$$

## Механическая дисперсия

Транспорт раствора в пористой среде под действием механической дисперсии может быть представлен как:

$$K_{x(\text{мех.дисп.})} = -D_{xx} \frac{\partial n_e c}{\partial x} - D_{xy} \frac{\partial n_e c}{\partial y} - D_{xz} \frac{\partial n_e c}{\partial z}$$

$$K_{y(\text{мех.дисп.})} = -D_{yx} \frac{\partial n_e c}{\partial x} - D_{yy} \frac{\partial n_e c}{\partial y} - D_{yz} \frac{\partial n_e c}{\partial z}$$

$$K_{z(\text{мех.дисп.})} = -D_{zx} \frac{\partial n_e c}{\partial x} - D_{zy} \frac{\partial n_e c}{\partial y} - D_{zz} \frac{\partial n_e c}{\partial z}$$

Здесь  $D_{xx}$ ,  $D_{xy}$  и так далее – коэффициенты механической дисперсии. Так как в потоке грунтовых вод нельзя разделить вклад механической дисперсии и диффузии, вводят коэффициент гидродинамической дисперсии. В случае однородного потока грунтовых вод в направлении оси X можно записать для трехмерного водоносного горизонта:

$$K_{x(\text{гидромехдисп.})} = -D_L \frac{\partial c}{\partial x}$$

$$K_{y(\text{гидромехдисп.})} = -D_T \frac{\partial c}{\partial y}$$

$$K_{z(\text{гидромехдисп.})} = -D_T \frac{\partial c}{\partial z}$$

Таким образом, количество растворенного вещества, поступающее в контрольный объем составляет:

$$D_L \frac{\partial^2 n_e c}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 n_e c}{\partial y^2} + D_T \frac{\partial^2 n_e c}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial x} v_x c$$



## Изменение концентрации внутри контрольного объема

Концентрация внутри контрольного объема может изменяться вследствие физических, химических или биологических процессов. Эти процессы имеют большое значение для распространения загрязнений в грунтовых водах.

Если сорбция выражена линейным законом, то изменение концентрации в результате этого процесса может быть записана как:

$$\frac{\partial c}{\partial t}_{(сорб)} = -\frac{\rho_s K_D}{n_e} \frac{\partial c}{\partial t}.$$

Изменение концентрации раствора в объеме в результате радиоактивного распада или биологического разложения определяется уравнением:

$$\frac{\partial c}{\partial t}_{(расп)} = -\lambda \left( c + \frac{\rho_s K_D c}{n_e} \right).$$

При этом уравнение солетпереноса для однородного потока грунтовых вод в направлении оси  $X$  в трехмерном пористом пространстве имеет окончательный вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} = & D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_r \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - \frac{\partial v c}{\partial x n_e} - \\ & - \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\rho_s K_D c}{n_e} \right) - \lambda \left( c + \frac{\rho_s K_D c}{n_e} \right) \end{aligned}$$

или, вводя коэффициент замедления:

$$R \frac{\partial c}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_r \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - \frac{\partial v c}{\partial x n_e} - \lambda R c.$$

Для уравнений солетпереноса используют граничные условия первого или второго рода, т.е. граничные условия Дирихле или Ноймана.

### 3. Моделирование процессов переноса в грунтовых водах

Длительное время рассмотрение такой сложной задачи, как массоперенос в пористой среде, было ограничено возможностями которыми обладала высшая математика. Только в самой простой постановке могли быть рассмотрены некоторые задачи фильтрации и транспорта растворенных веществ. Однако, с развитием вычислительной техники появилась возможность математического моделирования сложных природно- антропогенных процессов, к которым относятся и задачи движения воды и солей в почво-грунтах.

Для решения уравнений влаго- солепереноса при заданных начальных и граничных условиях используют численные методы, а именно метод конечных элементов и метод конечных разностей. В последнее время создано большое количество математических моделей, использующих эти методы. Исследователь имеет возможность получить ряд последовательных значений давления или напора грунтовых вод и концентрации в узлах пространственной сетки. Таким образом, на основе полученных результатов, может быть принято оптимальное решение.