

УДК 519.6

В.А. Богаенко, В.М. Булавацкий, В.В. Скопецкий

Математическое моделирование динамики геохимических процессов загрязнения водоносных горизонтов

На основе метода конформных отображений рассмотрена задача моделирования диффузии загрязнений из поверхностных накопителей с учетом реакций, протекающих в почве. Для численного решения использована локально-одномерная схема А.А. Самарского. Предложен эффективный параллельный алгоритм решения задачи.

On the basis of the conformal mapping method, the problem of simulating the pollution diffusion from the surface accumulators with account to the reactions in the ground is considered. A local-one-dimensional A.A. Samarskijs' scheme is used for the numerical solution. An efficient parallel algorithm of the problem solving is presented.

На основі методу конформних відображень розглянуто задачу моделювання дифузії забруднень з поверхневих накопичувачів з урахуванням хімічних реакцій, що відбуваються в ґрунті. Для чисельного розв'язання використано локально-одновимірну схему А.А. Самарського. Наведено ефективний паралельний алгоритм розв'язання задачі.

Введение. С ростом темпов производства и, соответственно, количества вредоносных отходов, которые хранятся в поверхностных накопителях, возникает проблема моделирования влияния содержащихся в них веществ на окружающую среду. В частности, важным является вопрос изменения химического состава грунтов под действием кислотных и щелочных растворов, которые диффундируют из хранилищ промышленных отходов. Рассматривается задача моделирования фильтрационно-конвективной диффузии таких растворов с учетом некоторых химических реакций, происходящих в грунтах под их действием, и дальнейшей диффузии растворимых результатов этих реакций. Предлагается последовательный и параллельный алгоритмы решения таких задач.

Моделирование плановой напорной фильтрации из хранилища промышленных отходов к водозаборам

Рассмотрим задачу плановой напорной фильтрации из хранилища промстоков к бесконечному водозабору (реке, дренажному каналу и др.). В этом случае область фильтрации G_z в физической плоскости имеет вид, представленный на рис. 1.

Считая режим фильтрации установившимся, имеем уравнение [1]

$$\operatorname{div} \vec{q} = 0, \quad (1)$$

где \vec{q} – вектор фильтрационного расхода, который определяется соотношением $\vec{q} = \operatorname{grad} \varphi$, $\varphi = -\kappa T \left(\frac{p}{\rho g} - z \right)$ – потенциал фильтрации, κ – коэффициент фильтрации, T – мощность напорного водоносного пласта, p – давление, ρ – плотность жидкости, g – ускорение свободного падения.

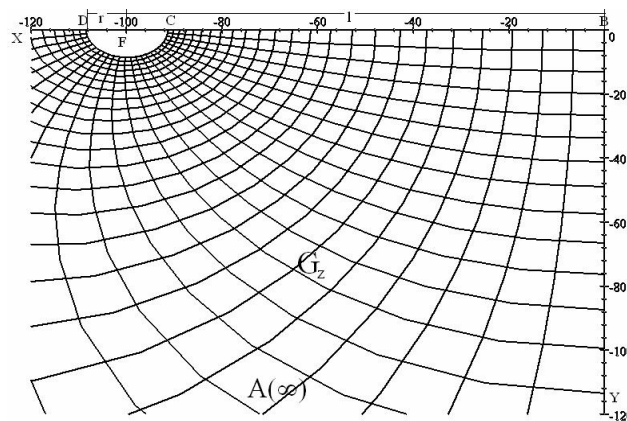


Рис. 1. Область фильтрации G_z

Краевые условия в рассматриваемом случае записываются в виде [2]

$$\varphi|_{CD} = 0, \varphi|_{AB} = \varphi_0, \psi|_{CB} = Q, \psi|_{AD} = 0, \quad (2)$$

где $\varphi_0 = \kappa HT$, H – действующий напор, ψ – функция тока, Q – полный фильтрационный расход.

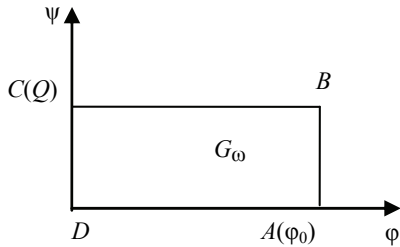


Рис. 2. Область комплексного потенциала течения G_ω

Решение краевой задачи плановой фильтрации (1), (2) находится путём конформного отображения области изменения комплексного потенциала течения G_ω (рис. 2) на область фильтрации G_z . В результате получаем характеристическую функцию течения в виде [2]:

$$z = \sqrt{l^2 - r^2} th \frac{\pi}{2Q} (\omega - \varphi_0 - iQ), \quad (3)$$

где $Q = \frac{\pi\varphi_0}{\ln\left(\frac{l + \sqrt{l^2 + r^2}}{r}\right)}$, $\omega = \varphi + i\psi$.

Разделяя в соотношении (3) мнимую и действительную части, получаем [2]:

$$x = \frac{l_*}{2} \frac{sh \frac{\pi}{Q} (\varphi - \varphi_0)}{ch^2 \frac{\pi}{2Q} (\varphi - \varphi_0) - \cos^2 \frac{\pi\psi}{2Q}},$$

$$y = -\frac{l_*}{2} \frac{\sin \frac{\pi\psi}{Q}}{ch^2 \frac{\pi}{2Q} (\varphi - \varphi_0) - \cos^2 \frac{\pi\psi}{2Q}},$$

где $l_* = \sqrt{l^2 - r^2}$.

Для определения скорости фильтрации дифференцируем соотношение (3). В результате

имеем $\left| \frac{dz}{d\omega} \right| = \frac{l_0}{\sin^2 \frac{\pi\psi}{2Q} + sh^2 \frac{\pi(\varphi - \varphi_0)}{2Q}}$, где

$$l_0 = \frac{\pi}{2Q} \sqrt{l^2 - r^2}.$$

Введя обозначения $q^2(\varphi, \psi) = T^2 v^2(\varphi, \psi) = \left| \frac{dz}{d\omega} \right|^2$, получаем [2]:

$$R^2(\varphi, \psi) = \frac{1}{q^2(\varphi, \psi)} = \frac{l_0^2}{\left(\sin^2 \frac{\pi\psi}{2Q} + sh^2 \frac{\pi(\varphi - \varphi_0)}{2Q} \right)^2}.$$

Введем в рассмотрение безразмерные переменные и параметры соотношениями

$$x' = \frac{x}{r}, \quad y' = \frac{y}{r}, \quad \varphi' = \frac{\varphi}{\varphi_0}, \quad (4)$$

$$\psi' = \frac{\psi}{\varphi_0}, \quad l' = \frac{l}{r}, \quad \tilde{q} = \frac{Q}{\varphi_0}.$$

Опуская в дальнейшем знак «штрих» над безразмерными величинами, запишем характеристическую функцию течения в безразмерном виде

$$x = \frac{\sqrt{l^2 - 1}}{2} \frac{sh \frac{\pi}{\tilde{q}} (\varphi - 1)}{ch^2 \frac{\pi}{2\tilde{q}} (\varphi - 1) - \cos^2 \frac{\pi\psi}{2\tilde{q}}},$$

$$y = -\frac{\sqrt{l^2 - 1}}{2} \frac{\sin \frac{\pi\psi}{\tilde{q}}}{ch^2 \frac{\pi}{2\tilde{q}} (\varphi - 1) - \cos^2 \frac{\pi\psi}{2\tilde{q}}},$$

где $\tilde{q} = \frac{\pi}{\ln(l + \sqrt{l^2 + 1})}$.

При этом в безразмерных переменных (4) величина $R^2(\varphi, \psi)$ приобретает вид

$$R^2(\varphi, \psi) = \alpha^2 f(\varphi, \psi),$$

где

$$f(\varphi, \psi) = \frac{1}{\left(\sin^2 \frac{\pi\psi}{2\tilde{q}} + sh^2 \frac{\pi(\varphi - 1)}{2\tilde{q}} \right)^2}, \quad (5)$$

$$\alpha = \frac{\pi r \sqrt{l^2 - 1}}{2\varphi_0 \tilde{q}}.$$

Математическая модель динамики геохимических процессов загрязнения

Построим математическую модель, базируясь на следующих допущениях:

• Хранилище промышленных стоков заполнено реагентами – химически активными веществами (растворами кислот, щелочей и др.), которые, фильтруясь в грунтовом массиве, вступают в химическую реакцию с материалом матрицы пласта. Вследствие чего происходит высвобождение активного рудного компонента, который, попадая в грунтовые воды, загрязняет их. Скорость реакции высвобождения активного компонента пропорциональна его концентрации в массиве и концентрации реагента [3].

• В математической модели массообменные процессы учитываются следующим образом: одновременно с химической реакцией происходит адсорбция высвобожденного активного компонента твердой фазой, уравнения кинетики которой берется в виде [4]:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \beta(\sigma C - \alpha N),$$

где C , N – концентрация загрязнений соответственно в жидкой и твердой фазах, α , β – кинетические коэффициенты, σ – активная пористость среды.

• Рассматриваемый процесс миграции загрязнений из хранилища промстоков происходит в поле скоростей установившейся плановой напорной фильтрации.

С учетом указанных выше допущений, система уравнений математической модели процесса запишется в следующем виде:

$$\begin{aligned} \sigma \frac{\partial C_1}{\partial t} &= D_1 \left(\frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_1}{\partial y^2} \right) - \\ &- v_x \frac{\partial C_1}{\partial x} - v_y \frac{\partial C_1}{\partial y} - \mu_1 C_m C_1, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \sigma \frac{\partial C_2}{\partial t} &= D_2 \left(\frac{\partial^2 C_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_2}{\partial y^2} \right) - \\ &- v_x \frac{\partial C_2}{\partial x} - v_y \frac{\partial C_2}{\partial y} + \mu_2 C_m C_1 - \frac{\partial N}{\partial t}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} = -\beta \sigma C_m C_1, \quad (8)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \beta_* (\sigma C_2 - \alpha_* N), \quad (9)$$

где C_1 , C_2 – соответственно концентрации реагента и высвобожденного (активного) компонента в жидкой фазе; C_m – концентрация активного компонента в твердой фазе (физическом пространстве); N – концентрация адсорбированного вещества в твердой фазе; $\mu_1 = v_1 \beta \sigma$, $\mu_2 = v_2 \beta \sigma$; β – константа скорости химической реакции; σ – пористость среды; $v_1 = \frac{v_r R}{v_m M}$,

$v_2 = \frac{v_p P}{v_m M}$, M – грамм-молекула активного компонента (минерала) в твердой фазе; R , P – соответственно реагента и активного компонента в жидкой фазе; v_r , v_p , v_m – стехиометрические коэффициенты; $\vec{v} = \{v_x, v_y\}$ – вектор скорости фильтрации; D_1 , D_2 – коэффициенты конвективной диффузии для реагента и активного компонента соответственно; β_* – коэффициент скорости адсорбции; α_* – коэффициент равновесного адсорбционного распределения [4].

В рамках постановки краевой задачи геохимической миграции будем считать заданными:

- $\tilde{C}_1(t)$ – концентрацию загрязнений на выходе из хранилища промышленных стоков;
- $C_m^{(0)}(x, y)$ – начальную концентрацию активного компонента в твердой фазе;
- $N^{(0)}(x, y)$ – начальную концентрацию адсорбированного вещества в твердой фазе.

С учетом указанного выше, краевые условия для системы (6)–(9) будут иметь вид

$$C_1|_{CD} = \tilde{C}_1(t), \quad \frac{\partial C_1}{\partial \vec{n}} \Big|_{AB, AD, BC} = 0, \quad (10)$$

$$C_1(x, y, 0) = 0,$$

$$C_2|_{CD} = 0, \quad \frac{\partial C_2}{\partial \vec{n}} \Big|_{AB, AD, BC} = 0, \quad C_2(x, y, 0) = 0, \quad (11)$$

$$\begin{aligned} C_m(x, y, 0) &= C_m^{(0)}(x, y), \\ N(x, y, 0) &= N^{(0)}(x, y), \end{aligned} \quad (12)$$

где \vec{n} – вектор нормали к границе области G_z ; $\tilde{C}_1, C_m^{(0)}, N^{(0)}$ – заданные функции (не ограничивая общности, в дальнейшем будем считать $\tilde{C}_1, C_m^{(0)}, N^{(0)} = \text{const}$).

Методика численного решения краевой задачи

Поскольку рассматриваемая краевая задача (6)–(12) определена в неканонической области, эффективным способом ее решения является переход к области изменения комплексного потенциала течения G_ω , которая в данном случае является канонической областью – прямоугольником (рис. 2).

Вводя безразмерные величины соотношениями:

$$\begin{aligned} t' &= \frac{t}{t_*}, \quad C_1' = \frac{C_1}{\tilde{C}_1}, \quad C_2' = \frac{C_2}{\tilde{C}_1}, \\ N' &= \frac{N}{\tilde{C}_1}, \quad C_m' = \frac{C_m}{C_m^{(0)}}, \end{aligned} \quad (13)$$

с учетом работы [5], в результате простых, но громоздких преобразований можно показать, что рассматриваемая краевая задача в безразмерных переменных (4), (13) приобретает вид:

$$f(\varphi, \psi) \frac{\partial C_1}{\partial t} = d_1 \left(\frac{\partial^2 C_1}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 C_1}{\partial \psi^2} \right) - \quad (14)$$

$$-a_1 \frac{\partial C_1}{\partial \varphi} - b_1 f(\varphi, \psi) C_m C_1,$$

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} = -\delta C_m C_1, \quad (15)$$

$$f(\varphi, \psi) \frac{\partial C_2}{\partial t} = d_2 \left(\frac{\partial^2 C_2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 C_2}{\partial \psi^2} \right) - a_1 \frac{\partial C_2}{\partial \varphi} + \quad (16)$$

$$+ b_2 f(\varphi, \psi) C_m C_1 - \frac{f(\varphi, \psi)}{\sigma} \frac{\partial N}{\partial t},$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \gamma (\sigma C_2 - \alpha_* N), \quad (17)$$

$$C_1|_{\varphi=0} = 1, \quad \frac{\partial C_1}{\partial \varphi} \Big|_{\varphi=1} = 0, \quad \frac{\partial C_1}{\partial \varphi} \Big|_{\varphi=0, \psi=\tilde{q}} = 0, \quad (18)$$

$$C_1(\varphi, \psi, 0) = 0,$$

$$C_2|_{\varphi=0} = 0, \quad \frac{\partial C_2}{\partial \varphi} \Big|_{\varphi=1} = 0, \quad \frac{\partial C_2}{\partial \varphi} \Big|_{\varphi=0, \psi=\tilde{q}} = 0, \quad (19)$$

$$C_2(\varphi, \psi, 0) = 0,$$

$$C_m(\varphi, \psi, 0) = 1, \quad N(\varphi, \psi, 0) = N^{(0)}, \quad (20)$$

$$\text{где } d_1 = \frac{D_1 t_*}{\sigma \alpha^2 \varphi_0^2}, \quad d_2 = \frac{D_2 t_*}{\sigma \alpha^2 \varphi_0^2}, \quad a_1 = \frac{t_*}{\sigma \alpha^2 \varphi_0 T},$$

$$b_1 = \frac{\mu_1 t_* C_m^{(0)}}{\sigma}, \quad b_2 = \frac{\mu_2 t_* C_m^{(0)}}{\sigma}, \quad \delta = \beta t_* \tilde{C}_1, \quad \gamma = \beta_* t_*,$$

а функция $f(\varphi, \psi)$ задается соотношением (5).

Отметим, что в безразмерных переменных (4) область сведенного комплексного потенциала течения G_ω имеет вид прямоугольника (рис. 3).

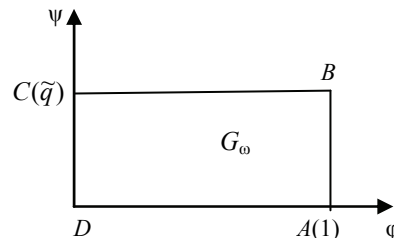


Рис. 3. Область сведенного комплексного потенциала течения

Решение краевой задачи (14)–(20) эффективно искать в два этапа: сначала решается краевая задача (14), (15), (18), (20), а затем – краевая задача (16), (17), (19), (20).

Ниже приводятся конечно-разностные решения указанных краевых задач, которые базируются на применении локально-одномерного метода А.А. Самарского [6].

Рассматривая задачу (14), (15), (18), (20) и применяя к ней локально-одномерную схему [6], имеем совокупность следующих одномерных задач:

$$\frac{1}{2} f(\varphi, \psi) \frac{\partial C_1^{(1)}}{\partial t} = d_1 \frac{\partial^2 C_1^{(1)}}{\partial \varphi^2} - \quad (21)$$

$$-a_1 \frac{\partial C_1^{(1)}}{\partial \varphi} - \frac{1}{2} b_1 f(\varphi, \psi) C_m^{(1)} C_1^{(1)},$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial C_m^{(1)}}{\partial t} = -\frac{1}{2} \delta C_m^{(1)} C_1^{(1)}, \quad (22)$$

$$C_1^{(1)}|_{\varphi=0} = 1, \quad \frac{\partial C_1^{(1)}}{\partial \varphi} \Big|_{\varphi=1} = 0,$$

$$C_1^{(1)}(\varphi, \psi, 0) = 0, \quad C_m^{(1)}(\varphi, \psi, 0) = 1,$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} f(\varphi, \psi) \frac{\partial C_1^{(2)}}{\partial t} = \\ & = d_1 \frac{\partial^2 C_1^{(2)}}{\partial \psi^2} - \frac{1}{2} b_1 f(\varphi, \psi) C_m^{(2)} C_1^{(2)}, \end{aligned} \quad (23)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial C_m^{(2)}}{\partial t} = -\frac{1}{2} \delta C_m^{(2)} C_1^{(2)}, \quad (24)$$

$$\begin{aligned} & \left. \frac{\partial C_1^{(2)}}{\partial \psi} \right|_{\psi=0, \psi=\tilde{q}} = 0, \quad C_1^{(2)} \Big|_{t=t_k+\frac{\tau}{2}} = \\ & = C_1^{(1)} \Big|_{t=t_k+\frac{\tau}{2}}, \quad C_m^{(2)} \Big|_{t=t_k+\frac{\tau}{2}} = C_m^{(1)} \Big|_{t=t_k+\frac{\tau}{2}}. \end{aligned}$$

Введем в области сведенного комплексного потенциала течения G_ω сетку:

$$\begin{aligned} \varphi_i &= (i-1)h_1, \quad i = \overline{1, m+1}, \quad \psi_j = (j - \frac{3}{2})h_2, \\ j &= \overline{1, n+1}, \quad \tau_k = \tau k, \quad k = \overline{0, s}, \end{aligned}$$

где h_1, h_2, τ – шаги сетки, причем $h_1 = \frac{2}{2m-1}$,

$$h_2 = \frac{\tilde{q}}{n-1}.$$

С учетом обозначений $C = C^k, \bar{C} = C^{k+\frac{1}{2}}, \hat{C} = C^{k+1}, t_{k+\frac{1}{2}} = t_k + \frac{\tau}{2}$ аппроксимируем уравнения (21)–(24) следующими конечно-разностными схемами:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} f(\varphi, \psi) C_{1_t} = d_1 \bar{C}_{1_{\varphi}} - \\ & - a_1 \bar{C}_{1_{\varphi}} - \frac{1}{2} b_1 f(\varphi, \psi) \bar{C}_m \bar{C}_1, \end{aligned} \quad (25)$$

$$C_{m_t} = -\delta \bar{C}_m C_1, \quad (26)$$

$$\frac{1}{2} f(\varphi, \psi) \bar{C}_1 = d_1 \hat{C}_{1_{\psi}} - \frac{1}{2} b_1 f(\varphi, \psi) \hat{C}_m \hat{C}_1, \quad (27)$$

$$\bar{C}_{m_t} = -\delta \hat{C}_m \bar{C}_1. \quad (28)$$

Раскрывая в (25), (26) конечно-разностные операторы и сводя подобные члены, получаем систему:

$$A \bar{C}_{1_{i+1, j}} - B_{ij} \bar{C}_{1_{ij}} + S \bar{C}_{1_{i-1, j}} = \Phi_{ij}, \quad i = \overline{2, m}, \quad j = \overline{1, n}, \quad (29)$$

$$\text{где } A = \frac{1}{h_1} \left(\frac{d_1}{h_1} - \frac{a_1}{2} \right), \quad S = \frac{1}{h_1} \left(\frac{d_1}{h_1} + \frac{a_1}{2} \right), \quad \Phi_{ij} = -\frac{f_{ij}}{2\tau} C_{1_{ij}},$$

$$B_{ij} = \frac{2d_1}{h_1^2} + \frac{f_{ij}}{2\tau} + \frac{b_1}{2} f_{ij} \frac{C_{m_{ij}}}{1 + \tau \delta C_{1_{ij}}}, \quad \bar{C}_{m_{ij}} = \frac{C_{m_{ij}}}{1 + \tau \delta C_{1_{ij}}},$$

$$i = \overline{2, m}, \quad j = \overline{1, n}.$$

Решение системы уравнений (29) запишем в виде:

$$\bar{C}_{1_{ij}} = \alpha_{i+1, j} \bar{C}_{1_{i+1, j}} + \beta_{i+1, j}, \quad i = \overline{2, m}, \quad j = \overline{1, n},$$

$$\text{где } \alpha_{i+1, j} = \frac{A}{B_{ij} - \alpha_{ij} S}, \quad \beta_{i+1, j} = \frac{\alpha_{i+1, j}}{A} (S \beta_{ij} - \Phi_{ij}),$$

$$i = \overline{2, m}, \quad j = \overline{1, n}.$$

Стартовые значения прогоночных коэффициентов получаем с использованием граничных условий задачи. В результате имеем $\alpha_{2j} = 0, \beta_{2j} = 1, j = \overline{1, n}$.

Для начала обратного хода прогонки получаем соотношения

$$\bar{C}_{1_{m+1, j}} = \frac{\beta_{m+1, j}}{1 - \alpha_{m+1, j}}, \quad j = \overline{1, n}.$$

Таким образом, получается решение на полуцелом шаге по времени. Далее находим решение на целом шаге по времени.

Расписывая в (27), (28) разностные операторы и сводя подобные члены, получаем

$$P \hat{C}_{1_{i, j+1}} - Q_{ij} \hat{C}_{1_{ij}} + P \hat{C}_{1_{i, j-1}} = \Omega_{ij}, \quad i = \overline{2, m}, \quad j = \overline{1, n}, \quad (30)$$

$$\text{где } P = \frac{d_1}{h_2^2}, \quad \Omega_{ij} = -\frac{f_{ij}}{2\tau} \bar{C}_{1_{ij}}, \quad Q_{ij} = \frac{2d_1}{h_2^2} + \frac{f_{ij}}{2\tau} +$$

$$+ \frac{b_1}{2} f_{ij} \frac{\bar{C}_{m_{ij}}}{1 + \tau \delta \bar{C}_{1_{ij}}}, \quad \hat{C}_{m_{ij}} = \frac{\bar{C}_{m_{ij}}}{1 + \tau \delta \bar{C}_{1_{ij}}}.$$

Решение системы (30) запишем в виде

$$\hat{C}_{1_{ij}} = \tilde{\alpha}_{i, j+1} \hat{C}_{1_{i, j+1}} + \tilde{\beta}_{i, j+1}, \quad i = \overline{2, m}, \quad j = \overline{1, n},$$

$$\text{где } \tilde{\alpha}_{i, j+1} = \frac{P}{Q_{ij} - \tilde{\alpha}_{ij} P}, \quad \tilde{\beta}_{i, j+1} = \frac{\tilde{\alpha}_{i, j+1}}{P} (P \tilde{\beta}_{ij} - \Omega_{ij}),$$

$$i = \overline{2, m}, \quad j = \overline{1, n}.$$

Стартовые значения прогоночных коэффициентов: $\tilde{\alpha}_{i2} = 1, \tilde{\beta}_{i2} = 0, i = \overline{2, m}$.

Для начала обратного хода прогонки получаем соотношения

$$\hat{C}_{i,n+1} = \frac{\tilde{\beta}_{i,n+1}}{1 - \tilde{\alpha}_{i,n+1}}, \quad i = \overline{2, m}.$$

Этим заканчивается решение задачи (21)–(24) на целом шаге по времени.

Применяя аналогичным образом локально-одномерную схему А.А. Самарского [6] к задаче (16), (17), (19), (20), получаем решение задачи (14)–(20) на целом шаге по времени.

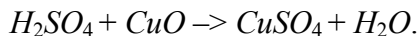
Параллельный алгоритм решения задачи

Для ускорения решения краевых задач (14), (15), (18), (20) и (16), (17), (19), (20) применим к ним с небольшими изменениями параллельный алгоритм с красно-черным распределением данных для систем с распределенной памятью [7]. При этом решение задачи (14)–(20) на целом шаге по времени, как и в случае последовательного алгоритма, получается путем решения сначала задачи (14), (15), (18), (20), а затем – (16), (17), (19), (20). Поскольку в такой ситуации перераспределения данных при использовании параллельных алгоритмов не требуется, характеристики параллельного алгоритма остаются неизменными.

Алгоритм был реализован и тестировался на кластерной системе СКИТ–3 Института кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины.

Результаты тестирования

В качестве тестовой взята задача диффузии раствора серной кислоты с учетом процесса вымывания из грунта оксида меди. Химическая реакция, происходящая при этом, имеет вид:



Исходные данные для тестовой задачи следующие: $r = 50$ м; $l = 1000$ м; $T = 10$ м; $\sigma = 0,2$; $H = 10$ м; $\kappa = 1$ м/сутки; $D_1 = 0,02$ м²/сутки; $D_2 = 0,01$ м²/сутки; $t_* = 10950$ суток ≈ 30 лет; $\nu_1 = 1,23$; $\nu_2 = 2,01$; $\beta = 0,01$ л/г*сутки; $\beta_* = 0,1$ сек⁻¹; $\tilde{C}_1 = 50$ г/л; $C_m^{(0)} = 15$ г/л; $N^{(0)} = 0$.

Время, потраченное на ее решение при размерности сетки в 9 млн точек, в зависимости от количества задействованных процессоров вместе с его теоретической оценкой, полученной согласно [7], представлено на рис. 4.

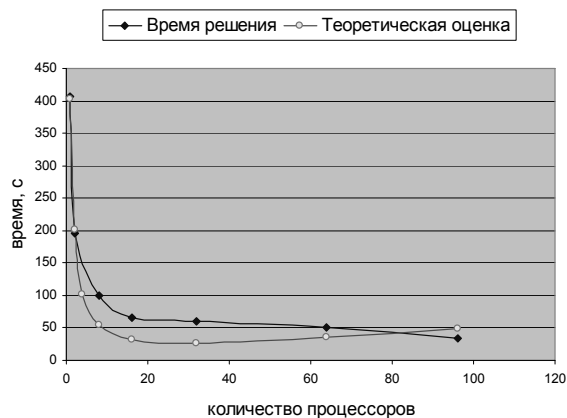


Рис. 4. Время решения задачи

Была проведена серия тестов, связанная с опеределением времени, за которое загрязняющие вещества (активный и высвобожденный компоненты) начнут попадать в водозабор, при изменении входных параметров. При проведении тестов считалось, что вещества попали в водозабор, когда значение безразмерной концентрации превышало 0,01. Полученные результаты приведены в таблице. Одно из полученных распределений концентрации загрязняющих вещества на прямой $\psi = 1$ в момент времени, когда они начинают попадать в водозабор, приведено на рис. 5.

Т а б л и ц а. Время, через которое загрязняющие вещества начнут попадать в водозабор

При отсутствии химической реакции	≈ 26 лет
Без изменений входных данных	≈ 29 лет
При $D_1 = 0,002$ м ² /сутки	≈ 42 года
При $D_1 = 0,2$ м ² /сутки	≈ 10 лет
При $\kappa = 2$ м/сутки	≈ 16 лет
При $\kappa = 0,5$ м/сутки	≈ 49 лет
При $\beta = 0,1$ л/г*сутки	≈ 34 года
При $\beta = 0,001$ л/г*сутки	≈ 27 лет
При $\frac{C_m^{(0)}}{C_1} = 0,3$	≈ 33 года
При $\frac{C_m^{(0)}}{C_1} = 0,075$	≈ 26 лет

Результаты расчетов на всей области в трехмерном виде приведены на рис. 6. Значения концентрации тут обозначены цветом и высотой.

Результаты расчетов на всей области в трехмерном виде приведены на рис. 6. Значения

ния концентрации тут обозначены цветом и высотой.

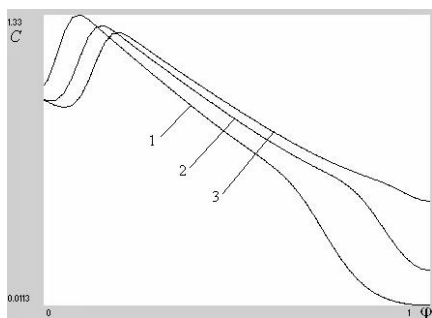


Рис. 5. Распределение концентрации загрязнений при $D_1 = 0,2 \text{ м}^2/\text{сутки}$ в моменты времени $t \approx$ (1) – 5 лет, (2) – 10 лет, (3) – 15 лет

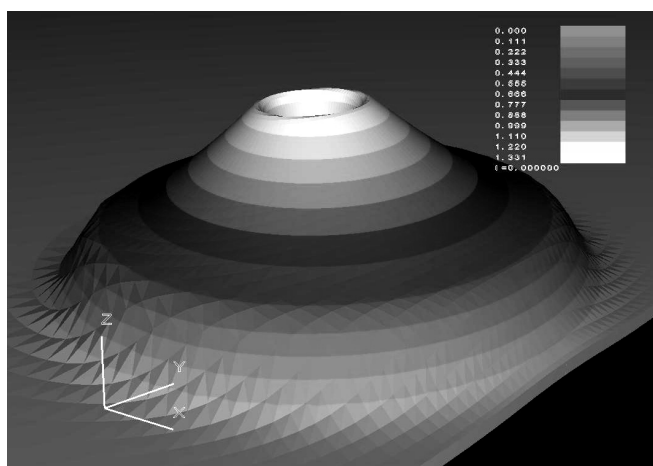


Рис. 6. Суммарная концентрация загрязняющих веществ в трехмерном виде в области фильтрации

Заключение. Исходя из полученных результатов, можно сделать следующие выводы.

Отношения концентраций активного компонента и реагента умеренно влияет на скорость достижения водозабора загрязняющими веществами. Двукратное его увеличение или уменьшение приводит к изменению времени, через которое загрязнения достигают водозабора, на 26,5% при увеличении и на 12,5% при уменьшении.

Диффузия в грунтах с большим коэффициентом фильтрации естественно протекает быстрее, чем в грунтах с меньшим его значением. Отметим, что согласно результатам моделирования, при высоком коэффициенте фильтра-

ции, в момент времени, когда активный компонент начнет попадать в водозабор, его доля в суммарном потоке загрязнений будет существенно меньшей, чем доля высвобожденного компонента.

Коэффициент диффузии высвобожденного компонента существенно влияет только на форму заднего фронта функции распределения его концентрации. Увеличение коэффициента диффузии будет слабо влиять на время, за которое высвобожденный компонент попадет в водозабор, но увеличит период времени, на протяжении которого он будет присутствовать в потоке загрязнений.

Изменения коэффициента диффузии активного компонента существенно влияет на время достижения им водозабора, но влияние на процесс диффузии высвобожденного компонента незначительно.

1. Полубаринова-Кочина П.Я. Теория движения грунтовых вод. – М.: Наука, 1977. – 664 с.
2. Лаврик В.И., Бомба А.Я. О приближенном решении одной краевой задачи конвективной диффузии при плановой напорной фильтрации // Математические методы исследования физических полей. – Киев: Ин-т математики АН УССР, 1980. – С. 26–36.
3. Шибанов А.В. О подземном растворении и извлечении веществ из руд в условиях плановой фильтрации // Фильтрационные расчеты водозаборных и дренажных систем. – М.: ВОДГЕО, 1981. – С. 119–126.
4. Вериги Н.Н., Шержуков Б.С. Диффузия и массообмен при фильтрации жидкостей в пористых средах // Развитие исследований по теории фильтрации в СССР (1917–1967). – М.: Наука, 1967. – С. 237–313.
5. Лаврик В.И., Фильчакова В.П., Яшин А.А. Конформные отображения физико-топологических моделей. – К.: Наук. думка, 1990. – 374 с.
6. Самарский А.А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1989. – 616 с.
7. Богаенко В.А., Булавацкий В.М., Скопецкий В.В. Параллельный алгоритм расчета фильтрационно-конвективной диффузии загрязнений из водоносных горизонтов // УСИМ. – 2008. – № 5. – С. 18–23.

Поступила 16.02.2009

Тел. для справок: (044) 526-4167 (Киев)

© В.А. Богаенко, В.М. Булавацкий, В.В. Скопецкий, 2009