

Міністерство освіти і науки України  
Національний технічний університет України «КПІ»  
Хіміко-технологічний факультет НТУУ «КПІ»

# КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В ХІМІЇ, ТЕХНОЛОГІЯХ І СИСТЕМАХ СТАЛОГО РОЗВИТКУ

Київ 13-15 травня 2014 року

## ЗБІРНИК НАУКОВИХ СТАТЕЙ

Четвертої міжнародної  
науково-практичної конференції



Київ – 2014

УДК 004.94(082)  
ББК 32.97я43  
К63

Друкується за рішенням Вченої Ради Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут» Міністерства освіти і науки України

**Відповідальні за випуск**

Т.В. Бойко  
Ю.О. Безносик

**Редакційна колегія**

Кандидат технічних наук, доцент Бойко Т.В.  
Кандидат технічних наук, доцент Безносик Ю.О.  
Кандидат технічних наук, доцент Бугаєва Л.М.

**Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку – КМХТ-2014:** Збірник наукових статей Четвертої міжнар. наук.-практ. конф. – Київ: НТУУ «КПІ», 2014 – 326 с.

ISBN 978-617-696-221-2

Збірник містить наукові статті Четвертої міжнародної науково-практичної конференції «Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку – КМХТ-2014» за такими основними напрямками: комп'ютерна підтримка виробничих процесів, комп'ютерне моделювання хіміко-технологічних та біохімічних процесів і систем, комп'ютерне моделювання в хімії та комп'ютерні методи синтезу нових речовин, комп'ютерне моделювання природоохоронних процесів, сталий розвиток регіонів, комп'ютерно-інформаційні технології в багаторівневій вищій освіті.

Доповіді рецензовані і редаговані Програмним комітетом конференції КМХТ-2014.

ISBN 978-617-696-221-2

© Автори тез доповідей, 2014  
© Національний технічний університет України  
«КПІ», укладання, оформлення, 2014

УДК 504.064

**ВИРІШЕННЯ ЗАДАЧИ ФІЛЬТРАЦІЇ ДЛЯ МОДЕЛІ ПРОГНОЗУВАННЯ  
МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЮЮЧИХ РЕЧОВИН В ҐРУНТІ**

**Бойко Т.В., Запорожець Ю.А., Брановицька С.В.**

**РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ФИЛЬТРАЦИИ ДЛЯ МОДЕЛИ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ  
МИГРАЦИИ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ В ПОЧВЕ**

**Бойко Т.В., Запорожец Ю.А., Брановицкая С.В.**

**SOLVING THE PROBLEM OF FILTERING PREDICTION MODEL FOR  
MIGRATION OF POLLUTANTS IN SOIL**

**Boyko T., Zaporozhets J., Branovytskaya S.**

**НТУУ «КПІ», м.Київ Україна**

[kxtp@list.ru](mailto:kxtp@list.ru)

*Проведено систематизацію даних по геологічним та гідрогеологічним умовам, що дозволило виділити на території України окремі області основних схем геофільтрації. Використання математичного моделювання, з урахуванням схем геофільтрації, дає змогу оцінити забруднення ґрунтів в процесі фільтрації стічних вод з урахуванням складних процесів фізико-хімічної взаємодії.*

**Ключові слова:** ґрунти, математичне моделювання, фільтраційний процес, масообмін, кінетичні рівняння, забруднюючі речовини.

*Проведено систематизацию данных по геологическим и гидрогеологическим условиям, что позволило выделить на территории Украины отдельные области основных схем геофильтрации. Использование математического моделирования, с учетом схем геофильтрации, дает возможность оценить загрязнение грунтов в процессе фильтрации сточных вод с учетом сложных процессов физико-химического взаимодействия.*

**Ключевые слова:** почвы, математическое моделирование, фильтрационный процесс, массообмен, кинетические уравнения, загрязняющие вещества.

*A systematization of data on the geological and hydrogeological conditions, which helps to make the territory of Ukraine distinct areas of basic schemes heofiltratsiyi. Using mathematical modeling to each of the areas heofiltratsiyi will help assess the soil during filtration of wastewater based on complex processes of physical and chemical interactions.*

**Keywords:** soils, mathematical modeling, the filtration process, mass transfer, kinetic equation, the pollutants.

## **1. Вступ**

В наш час в навколишньому середовищі присутня велика кількість шкідливих речовин які мають негативний вплив на довкілля. Але шляхи їх потрапляння і вплив на окремі складові навколишнього середовища відрізняються. У зв'язку з тим, що розвиток людини невід'ємно пов'язаний з використанням водної екосистеми, треба звернути більшу увагу на захист, а також очищення вже забрудненої гідросфери. Ступінь забруднення водних об'єктів та кількісна оцінка забруднення, а також

динаміка показників забруднення, головним чином залежить від антропогенного навантаження на навколишнє середовище, а також процесів взаємодії різних компонентів екосистеми із зовнішніми природними факторами.

Процеси надходження та забруднення шкідливими речовинами поверхневих та ґрунтових вод мають суттєву різницю. Так скидання промислових або побутових стічних вод веде до забруднення річок та озер. Потрапляння промислових стоків в поверхневі води в ряді випадків ведуть до забруднення ґрунтів та ґрунтових вод за механізмом процесу міграції стічних вод. Таким чином вивчення шляхів впливу фільтраційних процесів зводиться до розгляду відповідних крайових завдань фільтрації й конвективної дифузії.

### **2. Аналіз літературних даних і постановка проблеми**

Основи загальної концепції впливу на складові навколишнього природного середовища, зокрема на ґрунти та ґрунтові води (підземну гідросферу) були представлені в середині минулого століття в працях Абрамова С.К. [1], Лаврика В.І [2,6], та інших. Їхню роботу було узагальнено в працях Абрамова І.Б. [3] наприкінці минулого століття. Починаючи з даного моменту, у зв'язку з інтенсивним освоєнням територій промисловою та міською забудовою, розширюються масштаби прояву негативного впливу процесів і явищ, а також об'єм нанесеної шкоди. Внаслідок чого виникає проблема вивчення процесів впливу та змін, які виникають на територіях, для розробки захисних мір з максимальним врахуванням різновиду природних та техногенних факторів.

Таким чином для оцінки впливу промисловості на процеси порушення існуючого і формування нового гідродинамічного і гідро-геохімічного режимів підземних вод, потрібно дослідити основні характеристики будови ґрунтів [2]. Що дозволить розділити території по типу схем фільтраційних умов, що в свою чергу, дає можливість передбачити можливість зміни властивостей ґрунтів і стану підземних вод. Систематизація даних по геологічним та гідрогеологічним умовам дозволяє на території України виділити чотири області та в середині них, тобто сумарно, дев'ять районів, основних схем геофільтрації [3], побудова математичної моделі фільтраційного процесу до кожного типу дасть змогу оцінити забруднення ґрунтів та ґрунтових вод в процесі фільтрації стічних вод. В області математичного моделювання фільтраційних процесів можливо виділити роботи Олійника А.Я. [7].

Фільтрація розчинів в ґрунтах супроводжується важкими процесами фізико-хімічної взаємодії, результатом чого є поглинання компонентів розчину твердою фазою (сорбція, іонний обмін, засолення, коагуляція), чи навпаки його збагаченням (десорбція, розчинення, суфозія) за рахунок твердої фази.

Отже за допомогою математичного моделювання вирішується процес розповсюдження та впливу стічних вод на стан ґрунтів в процесі фільтрації. Вирішення даної проблеми дає можливість представити вплив техногенного навантаження на ґрунти, а саме отримати об'єктивне уявлення про процес розповсюдження забруднень, стічних вод, в глибокозалегаючих горизонтах.

### **3. Математичне моделювання міграції забруднюючих величин у ґрунтах**

Процес масоперенесення розчинених речовин у ґрунтах [3, 10] описуються математичною моделлю взаємодії між ґрунтами та стічними забруднюючими водами під час фільтраційних процесів. Даний фільтраційний процес описується рівняннями матеріального балансу, а також рівнянь кінетики і вирішуються за допомогою систем

диференційних рівнянь у частинних похідних другого порядку зі змінними коефіцієнтами, яка у випадку тривимірної плоско-вертикальної (профільної) сталої фільтрації за умови сталості коефіцієнта конвективної дифузії має такий вигляд (1)-(2):

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0, \quad v_x = \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad v_y = \frac{\partial \varphi}{\partial y}, \quad v_z = \frac{\partial \varphi}{\partial z}, \quad \varphi = -\chi h, \quad h = \frac{p}{\rho g} - \gamma \quad (1)$$

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

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

де  $D$  - коефіцієнт конвективної дифузії, м<sup>2</sup>/доб;  $c(x,y,z,t)$  й  $N(x,y,z,t)$  - концентрація речовин, загальний солівміст, що дифундують, відповідно у рідкій і твердій фазах, г/л;  $v_x(x,y,z,t)$ ,  $v_z(x,y,z,t)$  і  $v_y(x,y,z,t)$  – профіль вектора швидкості фільтрації, м/доб;  $t$  – час, доб;  $\sigma$  - пористість ґрунту, б/р;  $\alpha$ -константа масообміну, б/р;  $\beta$  - коефіцієнт розподілу речовини між рідкою й твердою фазами в умовах рівноваги за законом лінійної ізотерми Генрі, б/р;  $\varphi(x,y,z,t)$  - потенціал швидкості фільтрації;  $\chi$  - коефіцієнт фільтрації, м/доб;  $h$ - напір, м;  $p$ -тиск, (м<sup>2</sup>кг/м·с<sup>2</sup>);  $\rho$  – густина, кг/м<sup>3</sup>;  $\gamma$  - константа швидкості масообміну, б/р;  $g$  - прискорення сили ваги, м/с<sup>2</sup>.

При побудові імітаційної математичної моделі масопереносу розчинених речовин, як правило, використовуються досить складні математичні методи. Для спрощення розрахунку системи рівнянь (1)-(2) вдаються до зменшення розмірності шляхом усереднення шуканих величин (концентрації, швидкостей тощо) по одній координаті. Вертикальне усереднення по координаті  $z$  спрощує рівняння (1)-(2) до двовимірної «профільної» моделі, яка дає змогу оцінити розповсюдження стоків у глиб ґрунтів[5].

Для досліджувальних умов процесу необхідні початкові і граничні умови представлені рівняннями (3)-(5):

$$\text{при } t=0 \quad c(x,y,t_0) = c_0(x,y), \quad v(x,y,t_0) = 0, \quad (3)$$

$$\text{при } x=0 \quad c(x,y,t)|_{x=x_1} = c_0(y,t), \quad v(x,y,t)|_{x=x_1} = 0, \quad (4)$$

$$\text{при } x=L \quad \frac{\partial c}{\partial y} |_{y=L} = 0, \quad (5)$$

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

У зв'язку з різними типами ґрунтів та їх властивостей [4,10], змінюється процес взаємодії флюїду (забруднюючої речовини) з ґрунтами. Даний процес описуються рівняннями кінетики масообміну та використовується одне з трьох рівнянь: процес кристалізації або розчиненні компонентів породи у фільтрівній воді; процес нерівномірної не оборотної сорбції або десорбції; процес рівноважної сорбції або десорбції [11].

Таким чином при вирішенні системи рівнянь (1)-(5), яка описує рух рідини в ґрунтах, виникає складність яка пов'язана з властивостями та структурою ґрунтів і

процесів взаємодії зі стічними водами. Що приводить до складності побудови математичної моделі та врахування граничних умов.

#### 4. Результати досліджень

Математична модель (1)-(5) з крайовими умовами вирішувалась за допомогою методу сіток в середовищі Microsoft Excel. Отримані результати представлено на рис. 1.

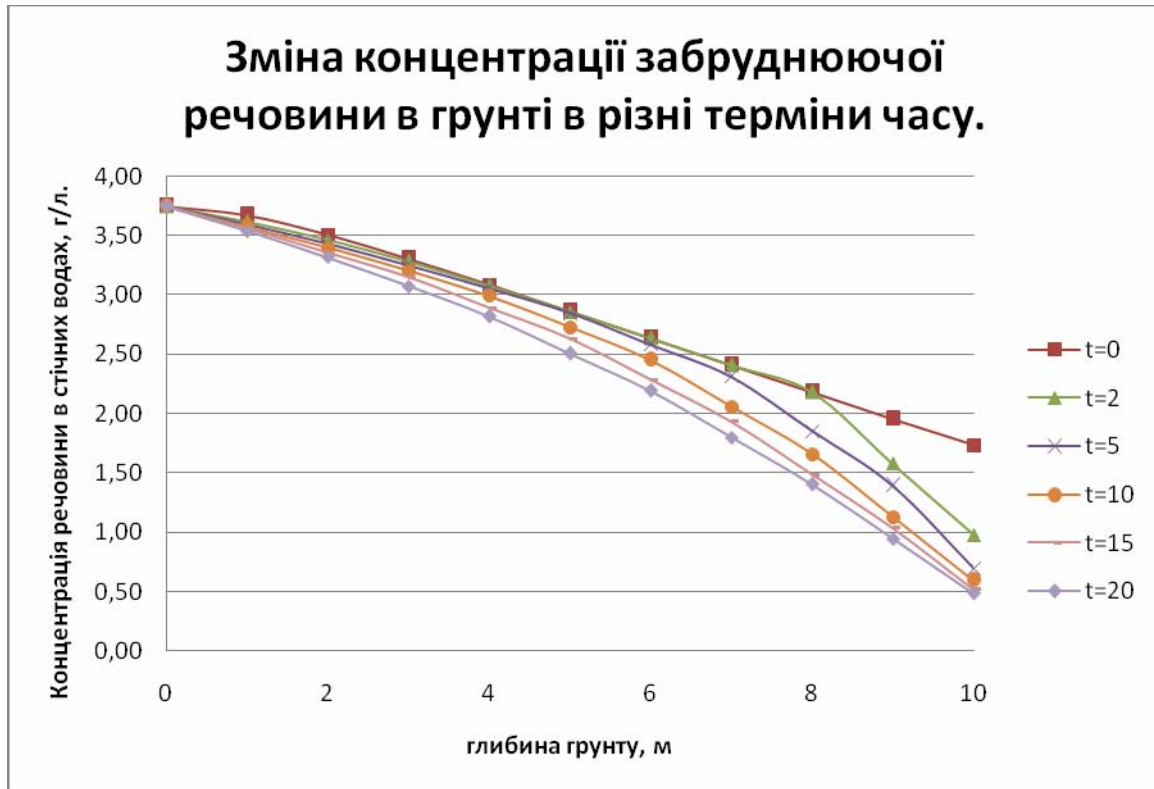


Рис. 1. Зміна концентрації забруднюючих речовин в потоці вздовж осі x за часом

Отримані результати дають можливість представити зміну концентрації забруднюючих речовин, а саме отримати об'єктивне уявлення про процес розповсюдження стічних вод у ґрунтах.

#### Висновки

Отже для оцінки впливу промисловості на ґрунти на території України виділити чотири області та в середині них, тобто сумарно, дев'ять районів, основних схем геофільтрації. Розділити території по типу схем фільтраційних умов, в свою чергу, дає можливість передбачити можливість зміни властивості ґрунтів і стану підземних вод.

Також було виділено, що процес фільтрації розчинів в ґрунтах супроводжується важкими процесами фізико-хімічної взаємодії.

Представлено математичну модель міграції стічних вод (1)-(5), яка дає об'єктивне уявлення про процес розповсюдження забруднень, в глибокозалягаючих горизонтах. Результати за даною моделлю представлено на рис. 1.

## Література

1. *Абрамов, С.К.* Защита территорий от затопления и подтопления. [Текст] / С.К. Абрамов, В.П. Небрига, А.В. Романов. – М.: Госстройиздат, 1961. – 221с.
2. *Лаврик, В.И.* Решение задачи массопереноса водорастворимых веществ в случае зависимости коэффициентов конвективной диффузии от скорости фильтрации [Текст] / В.И. Лаврик // Препринт 81.18. - К.: Ин-т. Математики АН УССР, 1981. - С. 3-24.
3. *Абрамов, И.Б.* Оценка воздействия на подземные воды промышленно-городских агломераций [Текст] / И.Б. Абрамов - Харьков, 2007. - 285с.
4. *Лаврик, В.И., Никифорович Н.А.* Вопросы математического моделирования процессов самоочищения подземных и поверхностных вод [Текст] / В.И. Лаврик // Гидромеханика. - Вып. 68.- К.: Наук. думка, 1994.- С. 36-40.
5. *Лаврик, В.И.* Методи математичного моделювання в екології [Текст] / В.И. Лаврик - Київ, 2002. - 204с.
6. *Лаврик, В.И.* Математическое моделирование в гидроэкологических исследованиях [Текст] / В.И. Лаврик, Н.А. Никифорович - Киев, 1998. - 287с.
7. *Олейник, А.Я.* Гидродинамическая модель фильтрования при очистке подземных вод от соединений железа [Текст] / А.Я. Олейник, С.К. Киселев // Прикладна гідромеханіка. - 1999. - №1 (73). - С. 20-25.
8. *Шестаков, В. М.* Гидрогеодинамика. [Текст] / В. М. Шестаков, М.: МГУ, 1995. - 368 с.
9. *Абрамов, І.Б.* Оцінювання хімічного ризику забруднення ґрунту на основі вирішення геофільтраційної задачі [Текст] / І.Б. Абрамов, Т.В. Бойко, Ю.А. Запорожець // Східно-європейський журнал передових технологій, Харків, 2012, №2/14 (56) – С. 24-26.
10. *Фрид, Ж.* Загрязнение подземных вод [Текст] / Ж. Фрид – М.: Недра, 1981.- 304 с.
11. *Бойко, Т. В.* Математичне моделювання міграції забруднюючих величин у ґрунтах [Текст] / Т. В. Бойко, А.О. Абрамова, Ю. А. Запорожець // Східно-європейський журнал передових технологій, Харків, 2013, №6/4 (66) – С. 14-16.