

ОДНОМЕРНАЯ МОДЕЛЬ РАСПРОСТРАНЕНИЯ НЕСМЕШИВАЮЩИХСЯ С ВОДОЙ ОРГАНИЧЕСКИХ ЗАГРЯЗНЕНИЙ В ЗОНЕ АЭРАЦИИ¹

© 2007 М.Н. Бардина²

В работе исследуются одномерные задачи о вертикальных потоках. Построено несколько точных решений методами бегущей волны, разделения переменных, подобия и другими. Полученные аналитические решения позволяют делать выводы общего характера, прогнозировать динамику процессов, могут быть использованы в качестве основы для "тестовых" задач при проверке корректности и оценке точности численных методов.

Введение

Жидкие неводные загрязнители (NAPL) составляют специфический класс загрязнителей грунтовых вод. Будучи жидкими и образуя отдельную фазу, не смешивающуюся с водой и воздухом, NAPL способны к самостоятельному перемещению в почве, а не только к пассивному переносу потоками грунтовых вод как большинство химических и радиоактивных загрязнителей. Это определяет их специфику и заставляет выделить в особый класс [1–4].

В последние годы проблемы загрязнения грунтовых вод органическими жидкостями привлекают все большее внимание специалистов по подземной гидромеханике и математическому моделированию. Отечественная школа подземной гидравлики занимает ведущее место в мире с тех пор, как начало решения некоторых важных практических задач было положено в трудах академика Лейбензона Л.С. [5]. Однако, круг специалистов в области математического моделирования переноса органических жидкостей грунтовыми водами в Российской Федерации пока недостаточно широк. Из отечественных исследователей активная работа в этом направлении ведется

¹Представлена доктором физико-математических наук профессором В.И. Астафьевым.

²Бардина Марина Николаевна (appmath@mrsu.ru), кафедра прикладной математики Мордовского государственного университета, 430000, г. Саранск, ул. Большевикская, 68.

Ентовым В.М. [1–4], Мироненко В.А. [6–10], Дерюгиным Ю.Н. [11], Костериным А.В. [11].

Сравнительно разработанной является методика предсказания пассивного переноса продуктов растворения первичного загрязнения потоком воды. Иначе дело обстоит с анализом гидродинамической стадии процесса, первичного проникновения органической жидкости в ненасыщенную зону и грунтовые воды и растеканием вдоль водоупора или на поверхности воды [1–4].

Имеется несколько подходов к решению указанной задачи. Универсальный метод приводит к сложной и, как правило, трехмерной задаче, подлежащей численному решению. При этом возникают трудности в связи с определением адекватных и детальных исходных данных. Другой подход основан на выделении ключевых элементов исследуемого класса явлений и расщеплении полной задачи на несколько подзадач. Многие важные выводы удастся сделать на основе качественных оценок и простых аналитических решений [4].

Для построения точных решений нелинейных уравнений математической физики разработан ряд методов, основанных на переходе к новым переменным (зависимым и независимым). При этом обычно ставится цель: найти новые переменные, число которых меньше, чем число исходных переменных. Переход к таким переменным приводит к более простым уравнениям. В частности, поиск точных решений с частными производными с двумя независимыми переменными сводится к исследованию обыкновенных дифференциальных уравнений (или систем таких уравнений). Естественно, при указанной редукции решения обыкновенных дифференциальных уравнений дают не все решения исходного уравнения с частными производными, а лишь класс решений, обладающих некоторыми специальными свойствами. Наиболее распространенными классами точных решений, которые описываются обыкновенными дифференциальными уравнениями, являются решения типа бегущей волны и автомодельные решения. Существование этих решений обычно (но не всегда) обусловлено инвариантностью рассматриваемых уравнений относительно преобразований сдвига и растяжения-сжатия [12].

1. Модельное уравнение

Для описания модели использованы следующие обозначения: m – пористость породы; k – абсолютная проницаемость породы; f_w , f_o – относительные фазовые проницаемости; μ_w , μ_o – вязкости флюидов; P_{cw} , P_{co} – фазовые давления; ρ_w , ρ_o – плотности флюидов; g – ускорение силы тяжести; z – вертикальная координата; S_w и S_o – насыщенности воды и углеводорода соответственно; q_w и q_o – фазовые скорости.

Рассмотрена двухфазная фильтрация в зоне аэрации. В основе описания

лежат уравнения сохранения масс и обобщенный закон Дарси для каждой из фаз [1], [2], [11], [13–16].

$$\begin{aligned} \frac{\partial m S_W}{\partial t} + \frac{\partial q_W}{\partial z} &= 0, \quad q_W = -\frac{k f_W(S)}{\mu_W} \text{grad } P_W, \\ \frac{\partial (1-m) S_O}{\partial t} + \frac{\partial q_O}{\partial z} &= 0, \quad q_O = -\frac{k f_O(S)}{\mu_O} \text{grad } P_O, \end{aligned} \quad (1.1)$$

Фазовые давления связаны соотношением на капиллярном скачке

$$P_W = P_{CW} + \rho_W g z. \quad (1.2)$$

Основные движущие силы: сила тяжести, сила трения, выраженная через обобщенный закон Дарси и капиллярные скачки.

Обычно при расчете многофазной фильтрации давление выражают некоторой аппроксимирующей функцией, в настоящей работе была выбрана функция Ван-Генухтена

$$P_{CW} = \frac{1}{\alpha} (1 - S_W^\beta)^\gamma, \quad (1.3)$$

где $\beta = \frac{n-1}{n}$ и $\gamma = \frac{n}{n-1}$, причем α и n — некоторые постоянные, зависящие от параметров породы. Константа $n \approx 1 \div 5$ для подавляющего числа образцов грунта, а константа α определяется соотношением Леверетта

$$\alpha \sim \frac{1}{\sigma} \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad (1.4)$$

где σ — коэффициент поверхностного натяжения.

Относительная фазовая проницаемость имеют сложную зависимость и для ее аппроксимации возьмем функцию, предложенную в работах Баренблатта-Ентова [1]–[3]:

$$f_W = S_W^\lambda. \quad (1.5)$$

С учетом введенных соотношений (1.2)–(1.5) закон изменения водонасыщенности (1.1) запишется в виде

$$\frac{\partial m S_W}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \frac{k S_W^\lambda}{\mu_W} \left[\frac{\partial}{\partial z} \left\{ \frac{1}{\alpha} (S_W^\beta - 1)^\gamma \right\} + \rho_W g \right]. \quad (1.6)$$

Преобразуя уравнение (1.6), получаем следующую нелинейную зависимость

$$\begin{aligned} \frac{\partial m S_W}{\partial t} &= \frac{k \beta \gamma (\lambda + \beta - 1)}{\mu_W \alpha} S_W^{\lambda + \beta - 2} (S_W^\beta - 1)^{\gamma - 1} \left(\frac{\partial S_W}{\partial z} \right)^2 + \\ &+ \frac{k \beta^2 \gamma (\gamma - 1)}{\mu_W \alpha} S_W^{\lambda + 2\beta - 2} (S_W^\beta - 1)^{\gamma - 2} \left(\frac{\partial S_W}{\partial z} \right)^2 + \\ &+ \frac{k \beta \gamma}{\mu_W \alpha} S_W^{\lambda + \beta - 1} (S_W^\beta - 1)^{\gamma - 1} \frac{\partial^2 S_W}{\partial z^2} + \\ &+ \frac{k \rho_W g \lambda}{\mu_W} S_W^{\lambda - 1} \frac{\partial S_W}{\partial z}. \end{aligned} \quad (1.7)$$

В следующих разделах настоящей статьи приведены точные решения модельного уравнения (1.7) и его численный анализ.

2. Построение решения в общем случае

Для определения точных решений поставленной задачи использовался метод бегущей волны [12], а именно представление водонасыщенности в следующем виде $S_W = S_W(\xi)$, где $\xi = z - Dt$. Для указанных зависимостей решениями будут являться следующие выражения

$$\xi = \xi_0 + \int_{\xi_0}^{\xi} \frac{S_W^{\lambda+\beta-1} dS_W}{(1 - S_W^\beta)^{1-\gamma} (a_0 + a_1 S_W + a_2 S_W^\lambda)},$$

где для краткости введены обозначения

$$a_0 = \Psi_{W0} S_{W0}^{\lambda+\beta-1} (1 - S_{W0}^\beta)^{\gamma-1},$$

$$a_1 = \frac{Dm\mu_W\alpha}{k\beta\gamma}, \quad a_2 = \frac{\rho_W g\alpha}{\beta\gamma}.$$

Пусть также

$$I = \int \frac{S_W^{\lambda+\beta-1} dS_W}{(1 - S_W^\beta)^{1-\gamma} (a_0 + a_1 S_W + a_2 S_W^\lambda)}. \quad (2.8)$$

Аналитические решения были найдены в нескольких частных случаях. Приведем некоторые из них.

2.1. $\lambda = 0, n = 2$.

Тогда интеграл решения определяется формулой

$$I = -\frac{1}{a_1} \ln |a_0 + a_2 + a_1 S_W| + \begin{cases} \frac{2}{\sqrt{a_1(a_0 + a_2)}} \arctg \sqrt{\frac{a_1}{a_0 + a_2}} S_W, & \text{если } \frac{a_0 + a_2}{a_1} > 0; \\ \frac{1}{\sqrt{-a_1(a_0 + a_2)}} \ln \left| \frac{\sqrt{S_W} - \sqrt{-\frac{a_0 + a_2}{a_1}}}{\sqrt{S_W} + \sqrt{-\frac{a_0 + a_2}{a_1}}} \right|, & \text{если } \frac{a_0 + a_2}{a_1} < 0; \\ -\frac{2}{a_1 \sqrt{S_W}}, & \text{если } \frac{a_0 + a_2}{a_1} = 0. \end{cases}$$

2.2. $\lambda = \frac{1}{2}$, $n = 2$.

Из зависимости (2.8) следует, что

$$I = -\frac{2}{a_1} \sqrt{S_W} + \frac{a_1 - a_2}{a_1^2} \ln \left| \frac{S_W + a_2 \sqrt{S_W} + a_0}{a_1} \right| +$$

$$+ 2 \frac{-2a_0a_1 - a_1a_2 + a_2^2}{a_1^2} \times$$

$$\times \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{4a_0a_1 - a_2^2}} \arctg \frac{2a_1 \sqrt{S_W} + a_2}{\sqrt{4a_0a_1 - a_2^2}}, \\ \text{если } \frac{4a_0a_1 - a_2^2}{4a_1^2} > 0; \\ \frac{1}{2\sqrt{-4a_0a_1 + a_2^2}} \ln \left| \frac{2a_1 \sqrt{S_W} + a_2 - \sqrt{-4a_0a_1 + a_2^2}}{2a_1 \sqrt{S_W} + a_2 + \sqrt{-4a_0a_1 + a_2^2}} \right|, \\ \text{если } \frac{4a_0a_1 - a_2^2}{4a_1^2} < 0; \\ -\frac{1}{2a_1 \sqrt{S_W} + a_2}, \text{ если } \frac{4a_0a_1 - a_2^2}{4a_1^2} = 0. \end{cases} \quad (2.9)$$

2.3. $a_0 = 0$.

Равенство нулю постоянной a_0 означает, что заданы нулевые или единичные начальные данные по водонасыщенности. Тогда интеграл (2.8) значительно упрощается

$$I = \int \frac{S_W^{\lambda+\beta-2}}{(1 - S_W^\beta)^{1-\gamma} (a_1 + a_2 S_W^{\lambda-1})} dS_W$$

и данный случай допускает еще несколько вариантов. Так, если $\lambda = 1$, то

$$I = -\frac{1}{\beta\gamma(a_1 + a_2)} (1 - S_W^\beta)^\gamma.$$

При $\lambda = 2$, $n = 2$ имеем

$$I = \frac{2}{a_2} \sqrt{S_W} - \frac{1}{a_2} S_W + \frac{a_1}{a_2^2} \ln(a_1 + a_2 S_W) -$$

$$- \begin{cases} \sqrt{\frac{a_1}{a_2^3}} \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{a_2}{a_1}} S_W, & \text{если } \frac{a_1}{a_2} > 0; \\ \sqrt{-\frac{a_1}{a_2^3}} \frac{1}{2} \ln \left| \frac{\sqrt{S_W} - \sqrt{-\frac{a_1}{a_2}}}{\sqrt{S_W} + \sqrt{-\frac{a_1}{a_2}}} \right|, & \text{если } \frac{a_1}{a_2} < 0; \\ -\frac{2a_1}{a_2^2} \frac{1}{\sqrt{S_W}}, & \text{если } \frac{a_1}{a_2} = 0. \end{cases}$$

Положим $a_2 = 0$, $\lambda = l\beta + 1$, где $l > 0$ — целое. Если n — рациональное число, справедливо соотношение

$$I = -\frac{1}{a_1} \sum_{i=0}^l C_l^i (-1)^i \frac{\gamma}{i + \gamma} (1 - S_W^\beta)^{i+\gamma}.$$

Также рассмотрен вопрос построения автомодельных решений $S_W(z, t) = S_W(\xi)$, где $\xi = z^a t^b$. В общем случае задача сводится к поиску интеграла

$$I = \int \frac{S_W^{\lambda+\beta-1}}{(1 - S_W^\beta)^{-\gamma+1} (a_0 + a_2 S_W^\lambda)} dS_W, \quad (2.10)$$

не разрешимого в квадратурах. Придавая отдельным постоянным конкретные фиксированные значения, можем найти частные решения исходной задачи. Не смотря на то, что интеграл (2.10) является следствием (2.8) при $a_1 = 0$, решения второго не являются следствиями первого, поскольку большинство из них не определено при $a_1 = 0$.

3. Аналитические решения частных задач

Исследуем теперь частный случай задачи, когда *относительная фазовая проницаемость является постоянной* $f_W = f_W$ и *давление — линейным относительно насыщенности* $P_{CW} = C_W(1 - S_W)$. При таких зависимостях получаем следующее уравнение

$$\frac{\partial m S_W}{\partial t} = -\frac{k f_W C_W}{\mu_W} \frac{\partial^2 S_W}{\partial z^2}. \quad (3.11)$$

Данное выражение является классическим в уравнениях математической физики и других разделах математики. Это уравнение обладает большим запасом точных решений, разобранных многими авторами. Ниже приведены лишь два наиболее важных.

Построение решения задачи (3.11) в виде бегущей волны дает следующую явную зависимость неизвестной функции от переменной ξ

$$S_W = -\frac{k f_W C_W \Psi_{W0}}{m D \mu_W} + S_{W0} + \frac{k f_W C_W \Psi_{W0}}{m D \mu_W} e^{\frac{m D \mu_W}{k f_W C_W} (\xi - \xi_0)}.$$

Автомодельное решение имеет вид

$$S_W = S_{W0} + \Psi_{W0} \sqrt{\xi_0} \int_{\xi_0}^{\xi} \frac{1}{\sqrt{\xi}} e^{\frac{m \mu_W}{4 k f_W C_W} (\xi - \xi_0)} d\xi, \quad \xi = \frac{z^2}{t}.$$

Предположим теперь, что *относительная фазовая проницаемость является линейной величиной относительно насыщенности* $f_W = S_W$ и, что *давление — линейное относительно насыщенности* $P_{CW} = C_W (1 - S_W)$. При таких зависимостях получаем нелинейное уравнение относительно насыщенности воды

$$\frac{\partial m S_W}{\partial t} = -\frac{k C_W}{\mu_W} \left(\frac{\partial S_W}{\partial z} \right)^2 - \frac{k C_W}{\mu_W} S_W \frac{\partial^2 S_W}{\partial z^2} + \frac{k \rho_W g}{\mu_W} \frac{\partial S_W}{\partial z}.$$

Метод бегущей волны дает неявную зависимость насыщенности от переменной ξ :

$$\begin{aligned} \xi = & \xi_0 + \frac{k C_W}{\rho_W g k + m D \mu_W} (S_W - S_{W0}) - \\ & - \frac{k C_W \Psi_{W0} S_{W0}}{(\rho_W g k + m D \mu_W)^2} \ln |\Psi_{W0} S_{W0} + (\rho_W g k + m D \mu_W) S_W| + \\ & + \frac{k C_W \Psi_{W0} S_{W0}}{(\rho_W g k + m D \mu_W)^2} \ln |\Psi_{W0} S_{W0} + (\rho_W g k + m D \mu_W) S_{W0}|. \end{aligned}$$

Автомодельные решения вида $S_W = S_W(\xi)$, $\xi = z^a t^b$ приводят к решениям либо стационарного характера, либо постоянного. Обобщенные автомодельные решения вида $S_W = t^a \varphi(\xi)$, $\xi = z t^b$ дают следующие результаты

$$S_W = \frac{m \mu_W}{6 k C_W} \frac{z^2}{t} + \frac{\rho_W g}{3 C_W} z + \frac{k \rho_W^2 g^2}{6 m \mu_W C_W} t.$$

4. Численное решение модельного уравнения и параметрическая зависимость от коэффициентов

Проанализируем влияние тех или иных параметров фильтрационного процесса на протекание указанного процесса. Ниже приведены рисунки, отражающие важные особенности фильтрационного процесса.

В качестве тестовой решалась задача со следующими данными: вязкость воды $\mu_W = 0.001$ Н · с · м⁻², плотность воды $\rho_W = 1000$ кг · м⁻³, постоянная $m = 0.3$, начальные данные $\Psi_{W0} = 1$, $S_{W0} = 0.1$, абсолютная проницаемость

$k = 10^{-12}$ м², поверхностное натяжение $\sigma_{WA} = 2.5 \cdot 10^{-2}$ Н/м, скорость волны $D = 3.47 \cdot 10^{-5}$ м/с. Расчет проводился с шагом 0.01. Сравнение функций, аппроксимирующих относительную фазовую проницаемость, проиллюстрировано на рис.1. Расчет насыщенности воды для различной глубины зоны аэрации приведен на рис.2. Поведение профиля волны на глубине $L = 10$ м в зависимости от параметров n , λ и пористости породы m показано на рис.3. И наконец, расчет профиля на последовательные моменты времени — рис. 4.

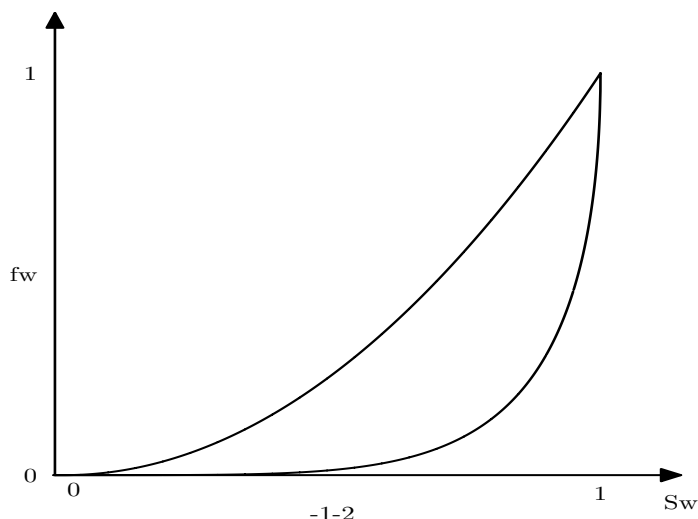


Рис. 1. Зависимость фазовой проницаемости от насыщенности воды в различных моделях: 1) модель Баренблатта—Ентова; 2) модель Фелми

5. Заключение

В настоящей статье рассмотрена задача движения не смешивающихся с водой органических загрязнителей как задача теории фильтрации. Было построено несколько частных решений для задачи, записанной в общем виде методами бегущей волны и подобия (автомодельные решения), а также решения для задач, записанных в двух конкретных случаях. При этом применялись методы бегущей волны, подобия и другие. Численный анализ модельного уравнения с использованием метода Рунге—Кутты 4 порядка дал результаты, хорошо соответствующие точным решениям.

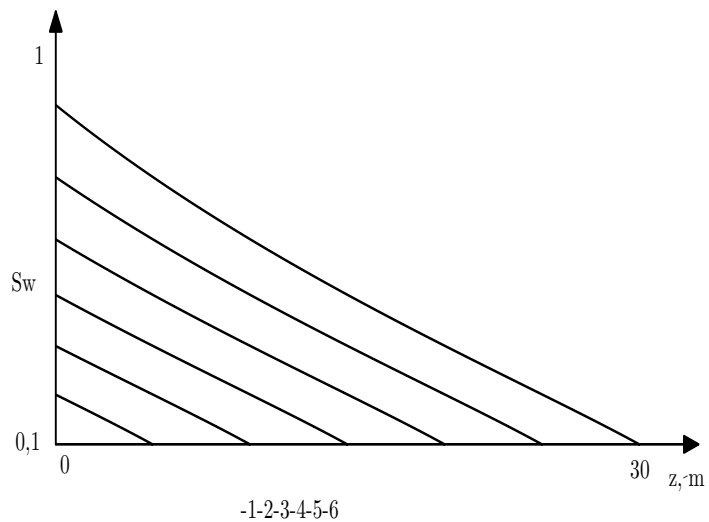


Рис. 2. Расчет насыщенности воды для различной глубины зоны аэрации для $m = 0.3$, $n = 2$, $\lambda = 2$, 1) $L = 5$, 2) $L = 10$, 3) $L = 15$, 4) $L = 20$, 5) $L = 25$, 6) $L = 30$

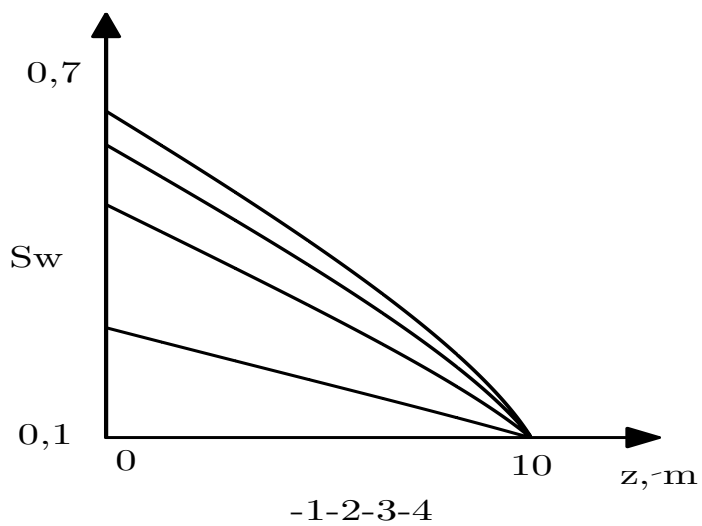


Рис. 3. Расчет насыщенности для $L = 10$ м в зависимости от n , 1) $n = 2$, 2) $n = 3$, 3) $n = 4$, 4) $n = 5$

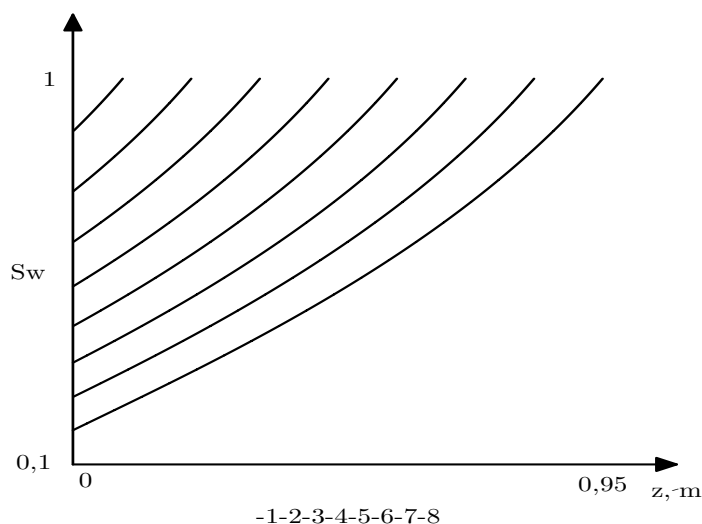


Рис. 4. Расчет профиля на последовательные моменты времени 1) $t = 1$ ч, 2) $t = 2$ ч, 3) $t = 3$ ч, 4) $t = 4$ ч, 5) $t = 5$ ч, 6) $t = 6$ ч, 7) $t = 7$ ч, 8) $t = 8$ ч, 9) $t = 9$ ч

Литература

- [1] Баренблатт, Г.И. Движение жидкостей и газов в природных пластах / Г.И. Баренблатт, В.М. Ентов, В.М. Рыжик. – М.: Недра, 1984. – 211 с.
- [2] Баренблатт, Г.И. Теория нестационарной фильтрации жидкости и газа / Г.И. Баренблатт, В.М. Ентов, В.М. Рыжик. – М.: Недра, 1972. – 288 с.
- [3] Ентов, В.М. К задаче о динамике тонкой оторочки в физико-химической подземной гидромеханике. ПММ
- [4] Гольдештейн, Р.В. Качественные методы в механике сплошных сред / Р.В. Гольдештейн, В.М. Ентов. – М.: Наука, 1989. – 224 с.
- [5] Маскет, М. Течение однородных жидкостей в пористой среде / М. Маскет. – М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2004. – 640 с.
- [6] МIRONENKO, В.А. Загрязнение подземными углеводородами / В.А. МIRONENKO, Н.С. Петров // Геоэкология. Инженерная геология. Гидрогеология. Геокриология. – 1995. – Вып. 1. – С. 3 - 27.
- [7] МIRONENKO, В.А. Проблемы гидрогеоэкологии. Том 1. Теоретическое изучение и моделирование геомиграционных процессов / В.А. МIRONENKO, В.Г. Румынин. – М.: Издательство Московского государственного горного университета, 1998. – 611 с.
- [8] МIRONENKO, В.А. Проблемы гидрогеоэкологии. Том 2. Опытные миграционные исследования / В.А. МIRONENKO, В.Г. Румынин. – М.: Издательство Московского государственного горного университета, 2002. – 394 с.

- [9] Мироненко, В.А. Динамика подземных вод / В.А. Мироненко. – М.: Издательство Московского государственного горного университета, 2001. – 519 с.
- [10] Мироненко, В.А. Основы гидрогеомеханики / В.А. Мироненко, В.М. Шестаков. – М.: Недра, 1974. – 296 с.
- [11] Дерюгин, Ю.Н. Математическое моделирование загрязнения грунтовых и подземных вод / Ю.Н. Дерюгин, А.В. Костерин // Вопросы Атомной Науки и Техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. – 1998. – Вып 4. – С. 26 - 30.
- [12] Полянин, А.Д. Методы решения нелинейных уравнений математической физики и механики / А.Д. Полянин, В.Ф. Зайцев, А.И. Журов. – М.: Физматлит, 2005. – 256 с.
- [13] Басниев, К.С. Нефтегазовая гидромеханика / К.С. Басниев, Н.М. Дмитриев, Г.Д. Розенберг. – М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2005. – 544 с.
- [14] Хасанов, М.М. Нелинейные и неравновесные эффекты в реологически сложных средах / М.М. Хасанов, Г.Т. Булгакова. – М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003. – 288 с.
- [15] Чарный, И.А. Подземная гидрогазодинамика / И.А. Чарный. – М.: Государственное научно-техническое издательство нефтяной и горно-топливной литературы, 1963. – 396 с.
- [16] Чарный, И.А. Подземная гидромеханика / И.А. Чарный. М.;Л.: ОГИЗ – Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1948. – 196 с.

Поступила в редакцию 13/XII/2006;

Paper received 13/XII/2006.

в окончательном варианте — 13/XII/2006.

Paper accepted 13/XII/2006.

ONE-DIMENSIONAL MODEL OF ORGANIC POLLUTION DISTRIBUTION NOT MIXING UP WITH WATER IN A ZONE OF AERATION³

© 2007 M.N. Bardina⁴

In the paper vertical streams one-dimensional problems are studied. Exact solutions are constructed by methods of a running wave, division of variables, similarity and others. The obtained analytical solutions permit to make conclusions of the common character, to predict dynamics of processes and can be used as a basis for "test" tasks for checking the correctness and to estimating of accuracy of numerical methods.

³Communicated by Dr. Sci. (Phys. & Math.) Prof. V.I. Astafjev.

⁴Bardina Marina Nickolaevna (appmath@mrsu.ru), Dept. of Applied Mathematics, Mor-dovian State University, Saransk, 430000, Russia.