

В. Г. РУМЫНИН

ТЕОРИЯ И МЕТОДЫ
ИЗУЧЕНИЯ ЗАГРЯЗНЕНИЯ
ПОДЗЕМНЫХ ВОД



«НАУКА»

Санкт-Петербургский государственный университет
Институт наук о Земле

Российская академия наук
Институт геоэкологии им. Е. М. Сергеева
Санкт-Петербургское отделение

В. Г. Румынин

ТЕОРИЯ И МЕТОДЫ
ИЗУЧЕНИЯ ЗАГРЯЗНЕНИЯ
ПОДЗЕМНЫХ ВОД

Учебник для вузов

Санкт-Петербург
«Наука»
2020

УДК 556.3

ББК 26.35

Р86

Румынин В. Г. Теория и методы изучения загрязнения подземных вод: Учебник для вузов. — СПб.: Наука, 2020. — 559 с.

ISBN 978-5-02-040326-0

Учебник способствует развитию навыков и компетенций в области изучения и прогнозирования процессов миграции загрязняющих веществ в подземной гидросфере. Повышенное внимание уделено эффективным подходам, позволяющим учесть в транспортных моделях физико-химические процессы, влияющие на скорость переноса загрязнений в пластовых условиях, математической формализации миграции рассолов, контролируемой плотностной конвекцией, двухфазной фильтрации (в связи с загрязнением подземных вод жидкими углеводородами), формированию природных гидрогеохимических границ и закономерностей их смещения под влиянием водоотбора. Теоретические разделы сопровождаются многочисленными примерами из практики гидрогеологических работ на конкретных объектах, находящихся в стадиях проектирования, инженерно-геологических изысканий и эксплуатации (водозаборы подземных вод, горнодобывающие предприятия, предприятия по производству и обращению с радиоактивными материалами и др.).

Для студентов-гидрогеологов, учебник будет также полезен научным работникам и специалистам-практикам.

Рецензенты:

проф. Поздняков С. П. — кафедра гидрогеологии МГУ
проф. Титов К. В. — кафедра геофизики ИЮЗ СПбГУ

ISBN 978-5-02-040326-0

© Румынин В. Г., 2020
© Издательство «Наука», редакционно-издательское оформление, 2020

ВВЕДЕНИЕ

Изучение загрязнения подземных вод не теряет своей актуальности уже на протяжении многих десятилетий и во многом определяет прогресс в гидрогеологии. Последнее объясняется широким спектром физических (гидродинамических) и физико-химических механизмов, контролирующих масштабы этого явления, разнообразием природной (геологической) обстановки и условий техногенеза, что обеспечивает вовлечение в орбиту научного поиска ученых — представителей самых разных (не только геологических) областей знаний. Подтверждение тому — десятки международных журналов, издаваемых различными научными сообществами, где можно встретить освещение самых разных аспектов данной проблемы.

Целью настоящего учебника, сопровождающего лекционный курс для магистрантов геологического профиля, является получение навыков количественных оценок и прогнозирования загрязнения (в более широком смысле — изменения качества) подземных вод в условиях техногенеза. Учебный курс опирается на знания студентов, полученные в рамках таких учебных дисциплин, как «Динамика подземных вод» («Подземная гидрогеодинамика»), «Моделирование геомиграционных процессов», «Гидрогеохимия», «Региональная гидрогеология». Потому собственно основам теории миграции подземных вод здесь уделяется внимание лишь в той мере, в которой отдельные разделы этой теории не находят, с точки зрения автора, должного отражения в фундаментальных учебниках для гидрогеологов по упомянутым дисциплинам (Bear, 1972; Боровский и др., 1989; Шестаков, 1995; Мироненко, 1996; Крайнов, Швец, 1980; Кирюхин, Толстихин, 1987; Appelo, Postma, 2005; Лехов, 2010).

С этих позиций в настоящей работе повышенное внимание уделено описанию и математической формализации миграции рассолов, контролируемой плотностной конвекцией, двухфазной фильтрации (в связи с загрязнением подземных вод жидки-

ми углеводородами), физико-химических преобразований техногенных растворов в пластовых условиях.

В методическом плане изучение загрязнения подземных вод включает: мониторинг состояния водных объектов (подземных и связанных с ними поверхностных вод) и тенденций изменения в них качества воды, определение интенсивности поступления загрязняющих веществ в водоносные горизонты, выявление механизмов, контролирующих развитие полей загрязнения, опытное изучение соответствующих параметров (фильтрационных, миграционных), прогнозирование изменения качественного состава воды, а также разработку водоохраных мероприятий. В настоящей работе перечисленные аспекты тесно увязаны с характером возможного техногенного воздействия на водоносные горизонты. В свете сказанного весь материал учебника сгруппирован и распределен по четырем разделам, посвященным:

1) оценке защищенности подземных вод на водозаборах от техногенного (антропогенного) загрязнения и прогнозированию изменения качества откачиваемых вод при смещении естественных гидрохимических границ под влиянием водоотбора;

2) изучению загрязнения подземных вод в горнодобывающих районах (эксплуатационный и постэксплуатационный периоды — ликвидация шахт), а также в районах нефтедобычи;

3) анализу механизмов, определяющих загрязнение подземных вод жидкими углеводородами — как легкими (LNAPL), так и тяжелыми (DNAPL);

4) исследованию радиоактивного загрязнения подземных вод, имеющему место в районах размещения «исторических» отходов предприятий ядерно-технологического цикла или в областях потенциального воздействия на окружающую среду радиоактивных выбросов с аварийных энергоблоков на АЭС, а также геомиграции радионуклидов в связи с обоснованием долговременной безопасности изоляции РАО в геологических формациях.

Учебник иллюстрируется многочисленными примерами, связанными с анализом как типовых, так и уникальных ситуаций, отвечающих условиям воздействия на подземные воды, почвы и водные объекты. Особое внимание уделено результатам экспериментального изучения отдельных механизмов и параметров переноса вещества в водоносных горизонтах и зоне аэрации — как в лабораторных условиях, так и на специализированных полигонах — полевой масштаб.

Автор искренне признателен за помощь в составлении ряда разделов учебника своим коллегам, научным сотрудникам Ин-

ститута геоэкологии им. Е. М. Сергеева РАН и Института наук о Земле СПбГУ: А. А. Шварцу (гл. 1, 17, 18), Л. Н. Синдаловскому (гл. 4, 6, 9, 14, 17, 18), А. М. Никуленкову (гл. 6, 9, 15, 17), П. Г. Лесковой (гл. 2, 17), К. В. Владимирову (гл. 7), С. Э. Макашову (гл. 10), В. К. Учаеву (гл. 12), К. Б. Розову (гл. 17) и В. А. Ерзовой (гл. 8).

Часть I

ОСНОВНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ О ЗАГРЯЗНЕНИИ ПОДЗЕМНЫХ ВОД, УСЛОВИЯХ И ПРОЦЕССАХ, ЕГО КОНТРОЛИРУЮЩИХ

Традиционно знакомство с проблемой загрязнения подземных вод отталкивается от типизации гидрогеоэкологических условий распространения и эксплуатации подземных вод, которая базируется на общих представлениях о характере потенциальных источников загрязнения и видах содержащихся в них веществ, критериях загрязнения, особенностях миграционного процесса, который в значительной степени зависит от литотипа и структуры водовмещающих пород. Одна из первых типизаций «условий загрязнения подземных вод в районах их эксплуатации» представлена в работах Е. Л. Минкина (1967; 1972). В этой типизации учтены характер источника химического загрязнения и пути проникновения загрязняющих веществ в подземные воды, также нашли отражение общие гидрогеологические закономерности и граничные условия, определяющие возможность ЗПВ. В ряде работ В. М. Гольдберга (1976), Ф. М. Бочевера, А. С. Орадовской и Н. Н. Лапшина (Бочеве́р и др., 1979; Лапшин, Орадовская, 1983; Орадовская Лапшин, 1987), В. А. Мироненко (Мироненко, Румынин, 1998, 1999), В. М. Шестакова (Шестаков и др., 2009) и многих других авторов так или иначе также затрагиваются вопросы типизации загрязнения подземных вод. В этих работах, увидевших свет в последней четверти прошлого века, дается углубленное описание процессов загрязнения подземных вод и показано, что их особенности определяются как видом антропогенной деятельности (промышленной, сельскохозяйственной, характером урбанизации территорий), так и геолого-гидрогеологическими условиями территорий, где такие процессы наблюдаются.

Развитие гидрогеологической области знания в последние десятилетия, в частности теории миграции (макродисперсии)

вещества в подземных водах, показало, что такого рода типизация нуждается в дальнейшей детализации и расширении: более разнообразным оказывается сочетание факторов, определяющих процессы переноса вещества в подземной гидросфере, как природного, так и антропогенного характера. Стало очевидным, что пространственная изменчивость проницаемости и физико-химических свойств горных пород, а также проявление двойной пористости их трещиноватых разностей (Dagan, 1989, 2001; Neuman, 1990; Gelhar, 1993; Tsang et al., 1996) во многом определяют масштабы загрязнения подземных вод, что ранее не всегда принималось во внимание.

Глава 1

ФАКТОРЫ И КРИТЕРИИ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ ЗАГРЯЗНЕНИЕ ПОДЗЕМНЫХ ВОД

1.1. Качество подземных вод в контексте современного законодательства

Под загрязнением подземных вод понимается процесс ухудшения их исходного состава (микробного и/или химического), приводящий или потенциально способный привести к несоответствию показателей качества вод критериям действующих нормативных документов.

Понятие «загрязнение» относится прежде всего к подземным водам питьевого назначения. Загрязнение подземных вод может выразиться в повышении содержания природных компонентов, а также в появлении специфических веществ искусственного происхождения. Обычно выделяют две стадии загрязнения: начальную, когда содержания компонентов выше фонового, но ниже ПДК (предельно допустимые концентрации), и собственно загрязнение, когда концентрации отдельных компонентов превышают ПДК. По видам загрязнителей выделяют химическое, биологическое, радиоактивное и тепловое загрязнение, по масштабу — локальное и региональное. Поступать загрязнение в водоносный горизонт может практически со всех сторон: сверху, сбоку, снизу и непосредственно в пласт в результате закачки (Шварц, 1996).

С 1 января 2002 г. в России действуют «Санитарные правила и нормы СанПиН 2.1.4.1074-01» «Питьевая вода. Гигиениче-

ские требования к качеству воды централизованных систем питьевого водоснабжения. Контроль качества» (2001), где все показатели качества воды могут быть объединены в следующие 6 групп:

1) безопасность питьевой воды в эпидемическом отношении (определяется ее соответствием нормативам по микробиологическим и паразитологическим показателям, всего их 6);

2) максимально допустимые концентрации вредных химических веществ, наиболее часто встречающихся в природных водах, а также веществ антропогенного происхождения, получивших глобальное распространение, и общие показатели состава воды (рН, общая минерализация, жесткость, перманганатная окисляемость, 22 неорганических вещества и 6 органических);

3) максимально допустимые концентрации вредных химических веществ, поступающих и образующихся в воде во время ее обработки в системе водоснабжения (9 показателей);

4) органолептические свойства воды (4 показателя: запах, привкус, цветность, мутность);

5) радиационная безопасность питьевой воды (2 показателя — общая α -активность 0.2 Бк/л, общая β -активность 1 Бк/л); идентификацию присутствующих в воде радионуклидов и измерение их индивидуальных концентраций рекомендуется проводить при превышении нормативов общей активности, причем оценка обнаруженных концентраций проводится в соответствии с санитарными правилами СанПиН 2.6.1.2523-09 «Нормы радиационной безопасности (НРБ- 99/2009)»;

6) максимально допустимые концентрации вредных химических веществ, которые могут поступать в воду в результате хозяйственной деятельности человека (29 неорганических веществ и более тысячи органических).

СанПиНом 2.1.4.1074-01 установлено обязательное определение показателей из первых пяти групп и выборочное из шестой группы.

В перечне нормируемых показателей важным является показатель допустимого микробного (бактериального) загрязнения подземной воды, определяемый общим содержанием в ней бактерий (не более 100 в 1 мл) и количеством бактерий группы кишечной палочки (не более 3 в 1000 мл, что соответствует колииндексу не более 3). Следует заметить, что микробное загрязнение легко ликвидируется при организации централизованного водоснабжения широко известными методами обеззараживания. Наряду с этим в лимитирующие показатели качества вод включаются нормы (ПДК) содержания макро- и микрокомпонентов

(в том числе радиоактивных элементов), появление которых вероятно при бытовом, техногенном или сельскохозяйственном загрязнении подземных вод (Боचेвер и др., 1979; Лапшин, Орадовская, 1983).

Обобщенным показателем качества вод по *макрокомпонентному* составу является величина сухого остатка, которая не должна превышать 1 г/дм³ при общей жесткости не более 7 мг-экв/дм³.

Среди нормируемых *микрокомпонентов* можно выделить две основные группы (Крайнов, Швец, 1980): первая включает элементы, ПДК которых обычно много больше их фоновых концентраций в пресных водах (например, ионы меди, молибдена, свинца, цинка); вторая объединяет элементы, ПДК которых близки к фоновым (например, ионы железа, марганца, фтора, селена, бериллия). При изучении естественных вариаций химического состава подземных вод особое внимание должно уделяться второй группе элементов. Однако в нарушенных гидрогеохимических условиях загрязнение подземных вод часто определяется аномальным ростом концентраций элементов первой группы. При изучении техногенных загрязнений частым случаем также является загрязнение нефтепродуктами и фенолами, предельно-допустимые содержания которых в подземных водах много ниже тех, которые встречаются в условиях техногенеза концентраций.

Если вода содержит компоненты с подобными показателями токсичности, то сумма концентраций этих веществ, выраженная в долях от максимально допустимых концентраций, не должна превышать единицы; при этом, однако, действие фтора, нитратов и радиоактивных веществ оценивается отдельно по соответствующим ПДК.

При анализе качества воды необходимо учитывать, что СанПиН 2.1.4.1074-01 является не единственным нормирующим документом. Так, если подземные воды предполагается использовать для производства фасованной питьевой воды, то руководствоваться надо СанПиН 2.1.4.1116-02 «Питьевая вода. Гигиенические требования к качеству воды, расфасованной в емкости. Контроль качества» (2002). В нем представлены требования к качеству питьевой воды первой категории и высшей категории. Они существенно строже, чем требования к воде, используемой для централизованного водоснабжения. Для минеральных вод существуют свои требования к их качеству — ГОСТ Р 54316-2011 «Воды минеральные природные питьевые. Общие технические условия» (2011).

При анализе природной обстановки не следует забывать, что в качестве критериев загрязнения могут выступать как сами превышения значений содержания нормируемых компонентов в подземных водах, так и скорость их роста во времени, а также заметные превышения содержаний отдельных компонентов над естественными фоновыми значениями (Крайнов, Швец, 1980).

1.2. Типы загрязняющих растворов

Источники ухудшения качества подземных вод по своему генезису делятся на естественные и техногенные. Естественные источники, как правило, обусловлены присутствием в самом эксплуатируемом горизонте некондиционных вод или же их перетоком из смежных горизонтов. Техногенные источники загрязнения формируются в результате переноса загрязняющих веществ атмосферными осадками и поверхностными водами, а также непосредственно в местах утечек и просачивания промстоков и растворенных загрязнений в подземные воды.

При характеристике источников загрязнений с точки зрения анализа миграционного процесса полезно выделение трех типов мигрантов: консервативные (трассеры), химически активные (но физически нейтральные) стоки и физически активные (тяжелые или, наоборот, легкие) стоки. Такая дифференциация, отражающая, в частности, роль процессов самоочищения и гравитационного перераспределения загрязнений, эффективно учитывает постепенное усложнение изучаемого миграционного процесса.

Выделяются четыре категории растворов, различающихся ассоциациями загрязняющих веществ и/или физическими свойствами.

Первая категория объединяет пресные (с минерализацией $M < 1 \text{ г/дм}^3$) воды с относительно невысоким содержанием бытовых загрязнителей, привнос которых определяется либо контактом этих вод с атмосферой, земной поверхностью и техногенными объектами, либо растворением — выщелачиванием минерального вещества (например, удобрений) из почвенного слоя инфильтрационными водами. К таким загрязнителям, наряду с патогенными микроорганизмами, относятся водорастворенные нефтепродукты, фенолы и пестициды, а также азотные соединения, содержания которых не слишком сильно превышают ПДК. В условиях пористых пластов воды активно очищаются от этих загрязнителей, так что процессы загрязнения водоносных

горизонтов обычно носят узко локальный характер и относительно легко прогнозируются; в трещиноватых коллекторах интенсивность этих процессов много сильнее, а прогнозирование даёт менее однозначные результаты по причине сильного варьирования поля скоростей.

Вторая категория включает пресные и слабоминерализованные ($M < 3 \text{ г/дм}^3$) сточные воды с повышенным содержанием токсичных компонентов, среди которых — тяжелые металлы (наиболее опасными являются свинец, кадмий, стронций, цинк, медь, никель, марганец, ртуть), мышьяк, фосфаты, фториды, флотореагенты (цианиды, фенолы, поверхностно-активные вещества) и др. Их концентрации могут многократно превышать ПДК. Одно из первых мест по степени опасности занимают радионуклиды, проникновение которых в водоносные горизонты может происходить с поверхности — при инфильтрации атмосферных осадков с загрязненных территорий (например, в результате Чернобыльской аварии) или, наоборот, из глубины — при миграции радионуклидов от участков подземного захоронения радиоактивных отходов. Наряду с перечисленными веществами в загрязненных водах могут присутствовать компоненты, характерные и для первой категории промышленных стоков. В самоочищении вод от токсичных веществ ведущую роль часто играют внутрипластовые физико-химические процессы, прогнозирование которых требует детальных миграционных построений, учитывающих, в частности, многокомпонентный характер стоков.

Третью категорию стоков образуют соленые воды ($M = 5\text{—}35 \text{ г/дм}^3$) и рассолы ($M > 35 \text{ г/дм}^3$). Как правило, в этих растворах, обладающих повышенной плотностью, с ростом минерализации увеличивается содержание микрокомпонентов, свойственных предшествующей категории стоков. Однако основным показателем, контролирующим качество подземных вод в области их загрязнения, обычно является общая минерализация, на которую ориентируются все практические прогнозы. Их проведение осложняется необходимостью учета гравитационной конвекции, обусловленной различиями в плотности пластовых вод и сточных растворов.

К *четвертой категории* стоков относятся техногенные растворы и вещества с особыми (специфическими) свойствами: а) нефтепродукты в исходном состоянии (нефть, бензин, керосин, разнообразные масла и др.), несмешивающиеся с водными растворами; б) высококонцентрированные растворы органических кислот, спиртов и фенолов; в) двухфазные стоки, например

пульпа (смесь продуктов дробления горной массы и воды) обогатительных фабрик горно-перерабатывающих предприятий. Не только химические, но и физические свойства (плотность, вязкость) перечисленных стоков отличаются от соответствующих свойств пластовых вод, что делает прогнозы загрязнения особенно сложными.

Особый вид загрязнения связан с присутствием в инфильтрационных водах патогенных микроорганизмов.

Таким образом, присутствие в водоносных горизонтах загрязняющих растворов первой и второй групп в зависимости от типа водовмещающей среды и режима загрязнения может потребовать изучения параметров микро- или макродисперсии и сорбции компонентов — помимо детализации фильтрационного строения горизонта и характеристики трещиноватости (пористости) пород. Для третьей группы растворов, как правило, процессы гравитационной конвекции преобладают над процессами рассеяния, поэтому здесь более существенное внимание должно уделяться изучению профильного строения горизонта (включая профильную анизотропию) и распределению плотности растворов. Для четвертой группы стандартные расчетные схемы миграции напрямую часто вообще неприменимы, при этом основное внимание должно уделяться изучению физических свойств растворов, а миграционные процессы и параметры оцениваются с помощью специализированных видов работ. Особое внимание должно уделяться изучению процессов выживаемости в подземных водах болезнетворных организмов, их сорбции почвами и горными породами.

1.3. Типы источников загрязнения подземных вод

С точки зрения своего местоположения источники загрязнения делятся на поверхностные и подземные. Наличие поверхностных источников загрязнения при мощной зоне аэрации и в пластах большой мощности, как правило, требует характеристики процессов вертикальной миграции компонентов.

Поверхностные (антропогенные) источники загрязнения по отношению к размерам области распространения водоносного комплекса могут быть локальными (сосредоточенными), линейными и площадными (рассредоточенными). Наличие локальных источников обычно требует учета (а следовательно, и определения характеристик) пространственной дисперсии, а для линей-

ных периодического или «разового» действия — продольного рассеяния (при сравнительно небольших расстояниях от источников до водозаборов). Оценка воздействия на водозаборы площадных поверхностных источников загрязнения требует повышенной детальности изучения инфильтрационного питания подземных вод с учетом процессов самоочищения в породах зоны аэрации.

По степени гидродинамического влияния на подземные воды техногенные источники загрязнения дифференцируются на гидродинамически активные и пассивные — в зависимости от вызываемых ими изменений в структуре исходного фильтрационного потока. Эти изменения определяются соотношением между расходом утечек промышленных стоков из источника и расходом «бытового» фильтрационного потока, контролирующим интенсивность смешения техногенных и пластовых вод (Мироненко и др., 1988).

По режиму загрязнения источники можно разделить на постоянные, периодические и импульсные (разовые). Для прогнозных расчетов качества подземных вод наличие периодических источников загрязнения обычно требует учета характеристик рассеяния вещества, что тем более справедливо для импульсных источников; при постоянном же режиме загрязнения часто допустимо применение упрощенных схем поршневого вытеснения.

К подземным источникам загрязнения (засоления) подземных вод, отбираемых скважинами на водозаборах питьевых подземных вод или системами дренажных скважин в условиях неоднородной гидрогеохимической зональности, относятся прежде всего некондиционные природные воды с повышенной минерализацией (гл. 6). При водоотборе может произойти подтягивание этих вод к эксплуатационным скважинам из нижних зон гидрогеологического разреза (в случае вертикальной зональности) или из периферийных областей эксплуатируемого горизонта (в случае плановой зональности). Природные некондиционные воды могут перетекать через слабопроницаемые разделяющие слои при снижении напора в верхних горизонтах пресных вод, способствуя снижению их питьевого качества. Наконец, возможен и обратный процесс — поступление техногенно загрязненных грунтовых вод в ниже расположенные горизонты через гидрогеологические окна — участки литологического выклинивания водоупорных пород.

1.4. О расчетных моделях миграции вещества в водоносных породах

Хотя большинство ореолов загрязнения подземных вод ассоциируется с нахождением вещества в растворенном состоянии (о чем речь пойдет в первых частях учебника — гл. 2—12), данная форма миграции не является единственной. Органические загрязнители могут образовывать самостоятельную фазу, не смешивающуюся с пластовой водой, так что фильтрация носит двухфазный, а при наличии в газа — трехфазный характер. Особенности математического описания двухфазной фильтрации будут рассмотрены в гл. 13 и 14, которые посвящены анализу загрязнения подземных вод жидкими углеводородами. Другой аспект количественного описания загрязнения подземной гидросферы связан с учетом в моделях разнообразных физико-химических процессов, во многих случаях определяющих потенциал антропогенного воздействия на качество подземных вод в реальных условиях, что лучше всего показать на примерах изучения радиоактивного загрязнения подземных вод (гл. 15—17).

Процессы миграции вещества в подземных водах определяются множеством факторов, которые принято разделять на две основные группы: гидродинамические, не затрагивающие межфазовые взаимодействия и химические процессы в растворе, и физико-химические, которые связываются с взаимодействиями в системе «вода—порода» и/или химическими реакциями внутри водной фазы.

К главным гидродинамическим формам переноса и рассеяния компонентов в подземных водах относят: конвекцию под влиянием гидравлического или плотностного градиента, гидродисперсию — продольную и поперечную, объединяемую в ряде задач с молекулярной диффузией (гл. 3). Математические модели сохраняют свою однородность и остаются по своей сути однокомпонентными при включении в них линейной сорбции и радиоактивного распада. Однако существует широкий спектр физико-химических и биологических (с участием микроорганизмов) взаимодействий, способных не только контролировать общую интенсивность миграции в водоносных пластах, но и обуславливать глубокую метаморфизацию исходного состава загрязняющих растворов (Appelo, Postma, 2005; Лехов, 2010; Румынин, 2011). О них речь пойдет в гл. 4. При этом выделяются: 1) процессы межфазового взаимодействия, реализующиеся на границе раздела жидкости и минерального скелета, и 2) внутри-

фазовые процессы (реакции), протекающие в объеме поровой жидкости. К первым относятся нелинейные сорбционные взаимодействия (ионный обмен, поверхностное комплексообразование), осаждение/растворение, выщелачивание, ко вторым — деструкция, реакции комплексообразования и некоторые другие.

Значимость того или иного механизма, контролирующего ЗПВ, определяется во многом типом коллектора подземных вод. С этих позиций условия переноса загрязняющих компонентов заметно различаются в пористых породах, с одной стороны, и трещиноватых — с другой. В примерно одинаковых гидрогеологических условиях, характеризующихся близкими значениями средних коэффициентов фильтрации и гидравлических градиентов, скорость переноса вещества в трещиноватых породах превосходит аналогичные характеристики в условиях пористого разреза. Такое сопоставление является вполне корректным, если трещиноватая порода может быть представлена в качестве эквивалентной пористой среды (разд. 3.3.1). Однако в реальных ситуациях существует целый ряд ограничений на использование такого подхода: предпосылка сплошности среды, практически всегда справедливая для пористых комплексов пород, может не выполняться для трещиноватых пород, что вынуждает обращаться к дискретным моделям трещиноватой среды (см. разд. 3.3.4); масштабы дисперсионного рассеяния в пористых породах контролируются пространственной изменчивостью их проницаемости (разд. 3.2), в то время как в трещиноватых породах главным фактором такого рассеяния может служить кинетика диффузионного оттока вещества в межтрещинное пространство — породную матрицу, благодаря чему резко падает и скорость конвекции в трещинах (разд. 3.3.1).

Глава 2

КОНВЕКТИВНЫЙ ПЕРЕНОС РАСТВОРЕННОГО ВЕЩЕСТВА В ВОДОНОСНЫХ ГОРИЗОНТАХ

Вынужденная конвекция жидкости, обусловленная перепадами (градиентами) гидравлического напора, h , и контролируемая структурой фильтрационного потока, является одним из главных факторов, определяющим загрязнение водоносных горизонтов зоны активного водообмена. Соответствующие моде-

ли (расчетные схемы), пренебрегающие диффузионно-дисперсионными явлениями, получили название моделей (расчетных схем) «поршневого вытеснения». Большинство вычислительных комплексов, предназначенных для решения задач фильтрации подземных вод (например, MODFLOW: McDonald, Harbough, 1988), включают модули, позволяющие рассчитывать траектории и временные характеристики движения частиц воды в пористой (трещиноватой) среде (например, модуль MODPATH для MODFLOW: Pollock, 2016), т. е., по сути, реализуют концепцию поршневого вытеснения. Эти модули, как и весь аппарат численного моделирования, получили широкое распространение в практике гидрогеологических исследований (изысканий). Однако рассматриваемый ниже материал сориентирован на аналитические модели, удобные для исследования физических закономерностей миграционных процессов, а также для экспертных инженерных оценок.

Наряду с вынужденной конвекцией существует *гравитационная (плотностная) конвекция*, обусловленная различиями в плотности между исходными пластовыми и техногенными (внедряющимися в пласт) растворами. Если рассматривать фильтрацию однородных смешивающихся жидкостей (например, водных растворов с различным содержанием минеральных солей), то на границе раздела минерализованных (плотностью ρ_0) и пресных (плотностью ρ^0) растворов проявляется дополнительная вертикальная составляющая скорости фильтрации $v_p = k_z \Delta \bar{\rho}$ (различиями в показателях вязкости растворов пренебрегаем), где $\Delta \bar{\rho} = (\rho_0 - \rho^0)/\rho^0$ — плотностной градиент; k_z — коэффициент фильтрации в вертикальном направлении. Поэтому если исходный относительный перепад напоров по вертикали незначителен в сравнении с плотностным градиентом, то начальная скорость опускания плотных стоков в глубь водоносного горизонта составляет $u_p \approx v_p/n$. При поршневом вытеснении пресной воды минерализованным раствором плотностная конвекция способствует деформации фронта вытеснения: происходит более быстрое продвижение тяжелой жидкости по подошве пласта и замедление перемещения границы раздела вблизи кровли — фронт принимает наклонное положение (для легких стоков картина обратная). О всех этих эффектах речь пойдет в гл. 10. Изменение плотности подземных вод по глубине или в плане может быть обусловлено природной гидрогеохимической зональностью, что также должно учитываться в геомиграционных прогнозах (гл. 6 и 11).

Использование приводимых здесь аналитических решений применительно к задачам массопереноса в массивах трещинова-

тых пород предполагает выполнение предпосылки сплошности среды, обычно связываемой с необходимостью удовлетворения условия превышения масштаба исследования (прогноза) некоторого репрезентативного элементарного объема (*representative elementary volume*, REV). Существуют численные алгоритмы и статистические приемы, позволяющие при наличии данных об объемной плотности трещин в массиве (P_{32}) оценить геометрический размер REV. В первом, грубом, приближении характерный размер REV должен 5—10-кратно превышать среднее расстояние между трещинами и примерно в такое же количество раз среднюю длину трещин.

2.1. Основные уравнения движения частиц жидкости

Конвективное движение частиц воды и растворенных в ней веществ определяется векторным полем скорости фильтрации Дарси, которое при отсутствии градиентов плотности и вязкости жидкости имеет представление:

$$\mathbf{v} = -\mathbf{k}\nabla h, \quad (2.1)$$

где ∇h — градиент гидравлического напора [LL^{-1}]; \mathbf{k} — коэффициент фильтрации (тензор второго порядка), для изотропной среды k — скалярная величина [LT^{-1}].

При построении гидрогеологических моделей в большинстве случаев направление координатных осей выбирают таким образом, чтобы они совпадали с направлением главных (принципальных) осей, характеризующих минимальные и максимальные коэффициенты фильтрации, так что достаточными являются три базовые характеристики коэффициента фильтрации — k_x , k_y и k_z . В этом случае, например, компонентами скорости Дарси в плановом потоке (в плоскости x — y) являются

$$v_x = -k_x \frac{\partial h}{\partial x}, \quad v_y = -k_y \frac{\partial h}{\partial y}; \quad (2.1a)$$

для описания профильного (в плоскости x — z) фильтрационного потока имеем

$$v_x = -k_x \frac{\partial h}{\partial x}, \quad v_z = -k_z \frac{\partial h}{\partial z}. \quad (2.1б)$$

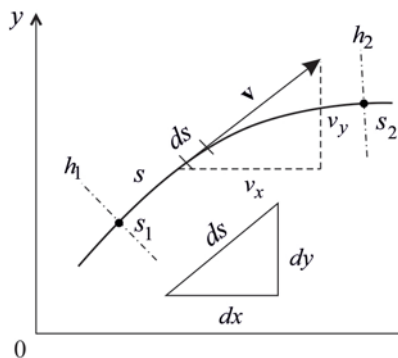


Рис. 2.1. К оценке миграции частицы вдоль линии тока s (сплошная линия) между точками s_1 и s_2 .

h_1 и h_2 — гидроизогипсы (штрих-пунктирные линии).

Решение фильтрационной задачи относительно функции h позволяет в неявном виде (например, с помощью определенных графоаналитических приемов, см. гл. 5) определить траектории движения частиц жидкости, представленные линиями тока, s (рис. 2.1). Действительная (истинная) скорость движения частиц, $u(s)$, вдоль произвольной линии тока s связана со скоростью фильтрации Дарси, $v(s)$, соотношением

$$u(s) = \frac{v(s)}{n}, \quad (2.2)$$

где n — активная пористость (трещиноватость) [L^3L^{-3}].

При известной структуре фильтрационного потока, определяемой сеткой движения подземных вод (представленной линиями равных напоров и линиями тока — рис. 2.1), пространственное положение s_0 или временная координата t_0 фронта поршневого вытеснения определяются интегрированием кинематического равенства

$$\frac{ds}{dt} = u(s). \quad (2.3)$$

Так, время перемещения каждой частицы растворенного вещества вдоль заданной линии тока s (рис. 2.1) между двумя точками (s_1 и s_2) складывается из времен dt прохождения частицей элементарных отрезков пути ds , а полная длина пути миграции (за известное время $t_2 - t_1$) — из суммы этих отрезков

$$t_{12} \equiv t_0 = \int_{s_1}^{s_2} \frac{ds}{u(s)}, \quad s_{12} \equiv s_0 = \int_{t_1}^{t_2} u(s) dt. \quad (2.4)$$

В англоязычной литературе время $t_0(t_{12})$ часто называют *residence time* или *transit time*, обозначая его буквой T (см., например, разд. 2.3.2).

Пример 1. Основываясь на интегральных соотношениях (2.4), получаем аналитические зависимости для двух типовых форм плановых фильтрационных потоков:

— одномерного плоскопараллельного, характеризующегося скоростью $v = \text{const}$ (в направлении оси x)

$$t_{12} = \frac{(x_2 - x_1)n}{v}, \quad x_{12} = \frac{v(t_2 - t_1)}{n}; \quad (2.5a)$$

— одномерного осесимметричного, характеризующегося скоростью $v(r) = Q/2\pi mr$ (r — радиальная координата, Q — дебит источника радиусом r_1 , m — мощность горизонта)

$$t_{12} = \frac{\pi mn(r_2^2 - r_1^2)}{Q}, \quad r_{12} = \sqrt{r_1^2 + \frac{Q(t_2 - t_1)}{\pi mn}}. \quad (2.5b)$$

Формулы (2.4) и (2.5) могут оказаться полезными для экспертных оценок миграции загрязнения в однородных водоносных горизонтах. Формула (2.5b) позволяет планировать индикаторные запуски в радиальных потоках, а также рассчитывать смещение плановых гидрохимических границ в водоносном горизонте, эксплуатируемом системой компактно расположенных водозаборных скважин. Более того, возможна суперпозиция двух одномерных решений (для плоскопараллельного и осесимметричного фильтрационных потоков), записанных для функции напора или потенциала скорости фильтрации, что позволяет найти уравнения характерных линий тока и изохрон при определении границ зон санитарной охраны (разд. 2.3.3, 5.1 и 5.2).

Пример 2. Предпосылка о поршневом характере движения частиц в пористой среде может использоваться и для конечно-разностного представления траекторий движения частиц жидкости в известном поле скорости фильтрации, определяемом, например, компонентами $v_x(x, y)$, и $v_y(x, y)$ (плановая задача в плоскости x — y , рис. 2.1). Пусть в момент времени t_0 частица находится в точке (x_0, y_0) . Новое положение частицы (x_1, y_1) в момент $t_0 + \Delta t$ определяется как:

$$x_1 = x_0 + u_x \Delta t, \quad (2.6a)$$

$$y_1 = y_0 + u_y \Delta t. \quad (2.6b)$$

Уравнения (2.6) представляют собой метод прямого интегрирования Эйлера, предполагающего постоянство скоростей u_x и u_y в течение всего

периода Δt . Лучшая аппроксимация может быть получена с использованием трапецидального метода:

$$x_1 = x_0 + \frac{1}{2} [u_x(x_0) + u_x(x_1)] \Delta t, \quad (2.7a)$$

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{2} [u_y(y_0) + u_y(y_1)] \Delta t, \quad (2.7б)$$

в котором, как видно, используются средние значения скоростей частиц между начальной и последующей расчетными точками. Поскольку $u_x(x_1)$ и $u_y(y_1)$ вначале сами по себе не известны, уравнения (2.7) решаются в процессе двухшаговой итерации: начальное положение частицы (x_1 , y_1) определяется по (2.6), а затем корректируется в соответствии с аппроксимацией (2.7).

В современных программных средствах для 3D сеточных областей алгоритм определения линий тока и времени движения частиц основан на рассмотрении баланса расхода втекающей и вытекающей жидкости через каждую грань 3D модельного блока с последующей кусочно-линейной аппроксимации поля скоростей фильтрации Дарси в каждом направлении координат x , y , z (Pollock, 2016).

Геомиграционные процессы чаще всего рассматриваются в стационарном фильтрационном потоке подземных вод, для которого в декартовой системе координат справедливо уравнение неразрывности

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (2.8)$$

— дифференциальная форма представления закона сохранения массы в механике сплошных сред. Оно рассматривается совместно с уравнением баланса вещества, описываемого уравнением

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + v_x \frac{\partial C}{\partial x} + v_y \frac{\partial C}{\partial y} + v_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0, \quad (2.9)$$

где C — концентрация вещества в единице объема раствора [ML^{-3}].

В более общем виде в декартовой системе координат (x , y , z) рассматриваемая модель конвективного переноса может быть представлена в форме:

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) + W_m = 0, \quad (2.9a)$$

где v_i — скорость фильтрации Дарси, декартовы составляющие которой v_x , v_y и v_z [LT^{-1}]; W_m — объемная интенсивность

источников поглощения/выделения вещества $[ML^{-3}T^{-1}]$; $\partial/\partial x_j = \partial/\partial x + \partial/\partial y + \partial/\partial z$ — оператор градиента.

Уравнение (2.9) является линейным однородным дифференциальным уравнением первого порядка относительно концентрационной функции C с четырьмя независимыми переменными. Существует несколько способов решения уравнения (2.9), среди которых предпочтение отдается методу характеристик. Достаточно удобным и наглядным является метод, основанный на предварительном нахождении решений вспомогательных уравнений. Известно, что уравнению в частных производных (2.9) соответствует система обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка:

$$\frac{dt}{1} = \frac{dx}{u_x} = \frac{dy}{u_y} = \frac{dz}{u_z}, \quad (2.10)$$

которая в данном контексте дополняет уравнение неразрывности (2.8) и может быть представлена в виде трех независимых уравнений:

$$\frac{dx}{dt} = u_x, \quad \frac{dy}{dt} = u_y, \quad \frac{dz}{dt} = u_z; \quad (2.11)$$

здесь u_x , u_y и u_z — компоненты действительной скорости фильтрации, каждая из которых в общем случае является функцией всех трех пространственных координат.

Система уравнений (2.11) называется характеристической. Линии в плоскости $x-t$, $y-t$ или $z-t$ задают направления, называемые характеристиками, вдоль которых функция концентрации остается неизменной ($dC = 0$). Если скорости u_x , u_y и u_z имеют непрерывные частные производные по всем аргументам и выполняется условие $u_x^2 + u_y^2 + u_z^2 \neq 0$, то через каждую точку области проходит только одна характеристика. Характеристическое решение может быть представлено в общем виде:

$$x_i = f_i(t, C), \quad x_i \rightarrow x, y, z. \quad (2.12)$$

Анализ решений уравнений конвективного переноса с помощью метода характеристик удобен при исследовании взаимного наложения концентрационных фронтов (заднего и переднего — при «пакетном» поступлении вещества в пласт) в случае проявления нелинейных адсорбционных процессов или при переносе в составе растворов веществ, взаимно влияющих на сорбционные показатели (Charbeneau, 1981; Мироненко, Румынин, 1998).

Пример 3. Рассмотрим решение одномерного уравнения конвективного массопереноса в направлении оси x :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_x \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (2.13)$$

при начальном условии

$$\bar{C}(x, t = 0) = 1 - \gamma x, \quad (2.14)$$

отвечающему неоднородному линейному распределению концентрации вещества в водоносном горизонте; здесь $\bar{C} = (C - C_2)/(C_1 - C_2)$ — относительная концентрация ($0 \leq \bar{C} \leq 1$), C_1 и C_2 — концентрации на границах переходной зоны, γ — постоянная [L^{-1}]. Данная задача может, например, ассоциироваться с задачей смещения «размытого» природного контакта соленых и пресных подземных вод под влиянием линейного водоотбора.

Полагаем также, что скорость u_x является линейной (возрастающей) функцией координаты x :

$$u_x = a + b x, \quad (2.14a)$$

где a — скорость в сечении $x = 0$ [LT^{-1}], b — градиент приращения скорости [T^{-1}].

Уравнению в частных производных (2.13) соответствует обыкновенное дифференциальное уравнение

$$\frac{dt}{1} = \frac{dx}{a + bx}, \quad (2.15)$$

имеющее следующий интегральный базис:

$$w(x, t) = (a + bx)e^{-bt} = c, \quad (2.16)$$

где c — постоянная интегрирования. В справедливости решения (2.16) легко убедиться, поставив (2.16) в исходное дифференциальное уравнение (2.13). При $t = 0$ уравнение (2.16) должно удовлетворять начальному условию, откуда находим постоянную интегрирования

$$c = a + \frac{b(1 - \bar{C})}{\gamma}. \quad (2.17)$$

Решение (2.15) удобно представить в характеристической форме:

$$x = f(t, \bar{C}) = \left[\frac{1}{\gamma}(1 - \bar{C}) + \frac{a}{b} \right] e^{bt} - \frac{a}{b}. \quad (2.18)$$

При $b = 0$ (равномерное движение)

$$x = f(t, \bar{C}) = \frac{1}{\gamma}(1 - \bar{C}) + at. \quad (2.18a)$$

Отклонение линий-характеристик (например, как это видно из частного расчетного примера на рис. 2.2) от прямых линий

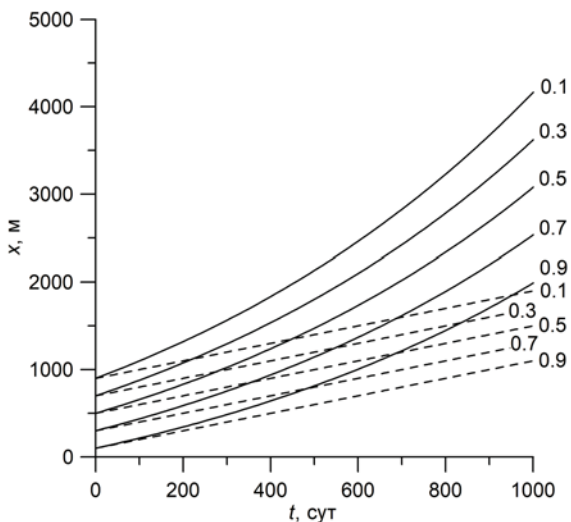


Рис. 2.2. Пример построения графика $x-t$ для линий-характеристик на основе решения (2.18) при $\gamma = 0.001 \text{ м}^{-1}$, $a = 1.0 \text{ м/сут}$, $b = 0.001 \text{ сут}^{-1}$ (сплошные линии) и $b = 0$ (штриховые линии).

объясняется различными скоростями переноса концентрационных точек \bar{C} в фильтрационном потоке, который характеризуется скоростью, линейно зависящей от координаты x .

Анализ трехмерных потоков сталкивается, как правило, с трудностями математических построений и недостатками параметрической базы, поэтому при дальнейшем анализе ограничимся рассмотрением некоторых основополагающих 1D и 2D моделей. Прежде, однако, остановимся на параметрической базе модели поршневого вытеснения.

2.2. Активная пористость (трещиноватость)

Надежность описания миграционного процесса в рамках модели поршневого вытеснения определяется изученностью фильтрационных свойств пласта и корректностью схематизации гидрогеологических условий, а миграционным параметром, контролирующим этот процесс, является пористость (трещиноватость).

Характерные значения активной пористости для раздельно-зернистых (песчаных) пород обычно укладываются в относительно узкий ($n \approx 0.2-0.4$) диапазон. «Транспортные» свойства

глинистых пород также характеризуются достаточно высокими значениями емкостного параметра n ($n \approx 0.3—0.45$). В коллекторах с трещинной емкостью разброс значений параметра n намного шире, а абсолютные его величины — гораздо ниже (средний диапазон 0.005—0.03). Отсюда понятно, что массоперенос в трещиноватых породах при прочих равных условиях должен протекать намного интенсивнее, чем в пористых.

Еще раз подчеркнем, что погрешности в определении скорости конвекции в комплексах *пористых пород* определяются прежде всего погрешностями в описании поля проницаемости и структуры фильтрационных потоков. Вариации емкостного параметра n не столь существенны в сравнении с пространственной изменчивостью проницаемости горных пород, так что в ряде случаев допустимо пользоваться экспертными оценками пористости, в то время как коэффициенты фильтрации, безусловно, требуют детального опытного изучения. Наоборот, в трещиноватых породах, как будет видно далее, значения n плохо предсказуемы на интуитивном уровне. Поэтому приходится констатировать, что результаты прогнозирования процессов загрязнения подземных вод, приуроченных к комплексам трещиноватых пород, в силу их неоднородности и проявления анизотропии по проницаемости и трещинной емкости отличаются часто низкой достоверностью.

Учет степени взаимосвязи отдельных элементов фильтрующих сред имеет принципиальное значение для *трещиноватых пород* (Pozdniakov, Tsang, 2004; Tsang et al., 2015). Неоднородность трещинного пространства обусловлена проявлением тектонических нарушений (например, линейных зон сдвиговых деформаций), процессами выветривания, вторичным минералообразованием, а также заполнением трещин тонкодисперсным материалом, транспортируемым инфильтрационными водами с поверхности, и карстовыми процессами. В таких породах основной (до 70—90 %) расход фильтрующейся жидкости может быть сосредоточен в существенно разобобщенных каналах, доля которых составляет всего 5—20 % от общего числа трещин (разд. 3.3.2). К числу главных факторов, обуславливающих такого рода *каналовый* механизм фильтрации, относятся высокая степень вариации проницаемости (проводимости) трещин и их плохая гидравлическая связь. Данный механизм снижает демпфирующее действие пористой матрицы, а также роль сорбции на поверхностях трещин.

Наконец, в соответствии с существующими теоретическими воззрениями фильтрационный (непрерывный, «связный») поток

через систему трещин возникает только в том случае, когда плотность трещин с заданными геометрическими характеристиками и статистическим распределением превышает некоторое пороговое значение, называемое перколяционным порогом, для определения которого существует определенный класс моделей (Pozdniakov, Tsang, 2004).

В целом при описании потоков в трещиноватых средах приходится сталкиваться с высокой степенью неопределенности, обусловленной отсутствием достоверной информации о положении, ориентации, протяженности, раскрытии, гидравлической взаимосвязи и плотности отдельных трещин и их систем. Неопределенность предсказания поведения потоков в трещинных системах частично может быть преодолена при обращении к стохастическим моделям, или моделям, базирующимся на представлениях о дискретности трещиноватой среды (разд. 3.3.2—3.3.4). Особую актуальность такого рода модели приобретают в связи с необходимостью прогнозирования долговременных последствий изоляции радиоактивных отходов в массивах скальных пород на больших глубинах, обоснования скважинных систем консервации тепловой энергии (или, наоборот, ее извлечения в районах повышенной вулканической активности), а также закачки CO_2 в сверхкритическом состоянии (при борьбе с парниковым эффектом) и др. В верхних зонах разреза при достаточно большой плотности трещин выветривания применение осредненных дисперсионных моделей не столь проблематично.

2.3. Миграция вещества в плановых фильтрационных потоках

Задачи, возникающие в связи с оценкой конвективного массопереноса в условиях, приближенных к реальным, можно разделить на две большие группы.

Первая группа связана с исследованием распространения вещества в региональных фильтрационных потоках, в формировании которых заметную роль играет площадная инфильтрация атмосферных вод. Если вариации поля скоростей фильтрации в плане небольшие, что справедливо вдали от мощных источников сосредоточенного гидродинамического воздействия на пласт (скважин, прежде всего), то миграционный процесс можно рассматривать в квазиодномерной постановке, допускающей осреднение концентрации вещества в разрезе пласта, когда $C = C(x, t)$.

Элементы такого анализа используются и для исследования миграционных потоков в замкнутых (ограниченных водоразделами) гидрогеологических структурах, обобщенной характеристикой которых может служить функция распределения времени нахождения вещества, растворенного в инфильтрационной воде, в пласте $C = C(T)$. Аналитические решения, включающие такого рода функции, относятся к моделям с сосредоточенными параметрами, не требующими явного описания плановой структуры фильтрационного потока.

Решения соответствующих миграционных задач могут быть полезны, например, для исследования загрязнения подземных вод, обусловленного функционированием так называемых источников площадного типа, а также для интерпретации данных изотопного датирования подземных вод.

Вторая группа задач связана, наоборот, с описанием миграции в достаточно сильно деформированных фильтрационных потоках, формируемых откачивающими (нагнетательными) скважинами, — при опытном изучении параметров массопереноса, при оценках зон санитарной охраны водозаборов. Региональными компонентами фильтрационных потоков, такими как площадная инфильтрация, можно в этих случаях пренебречь (однако роль дисперсионного рассеяния вещества при рассмотрении мелкомасштабных процессов может быть значительна).

2.3.1. Миграция в плановом квазиодномерном фильтрационном потоке

В рассматриваемых задачах инфильтрационного типа предполагается, что происходит достаточно быстрое перераспределение вещества по всей мощности пласта (т. е. выравнивание концентрационных профилей). При одномерном движении подземных вод, обусловленном поступлением воды с удельным расходом q_0 (размерность $[L^2T^{-1}]$) на границе пласта $x = 0$ и площадной инфильтрацией атмосферных вод с удельной интенсивностью ε (размерность $[LT^{-1}]$) (рис. 2.3), расход потока в расчетном сечении $q_x = v_x m$ определяется суммой этих двух компонент фильтрационного баланса:

$$q_x = q_0 + \varepsilon x. \quad (2.19)$$

Тогда скорость фильтрации также является функцией координаты x :

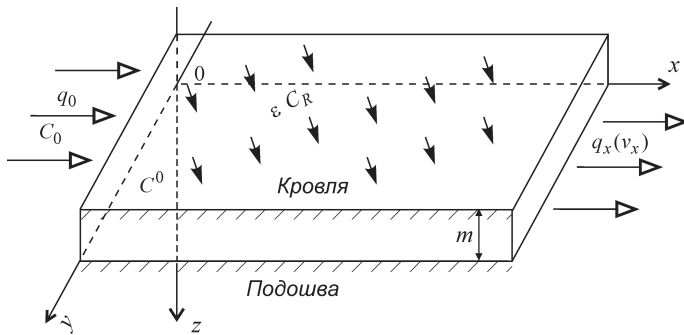


Рис. 2.3. К обоснованию расчетной схемы миграции в одномерном потоке.

$$v_x = v_0 + \frac{\varepsilon}{m} x \quad (v_0 = q_0/m), \quad (2.19a)$$

где m — мощность пласта [L].

Отсюда в соответствии с первым интегральным соотношением в (2.4) находим время миграции t_0 фронта жидкости, поступающей в пласт с концентрацией C_0 на границе, до расчетной точки x :

$$t_0 = \int_0^x \frac{ndx}{v_x} = \frac{1}{\varepsilon^*} \int_0^x \frac{dx}{(x + u_0/\varepsilon^*)} = \frac{1}{\varepsilon^*} \ln \left(1 + \frac{\varepsilon^*}{u_0} x \right), \quad (2.20)$$

где $u_0 = \frac{v_0}{n}$, $\varepsilon^* = \frac{\varepsilon}{mn}$, n — пористость (трещиноватость).

2.3.1.1. Общее решение для концентрационной функции

Баланс вещества в пласте при инфильтрационном питании подземных вод определяется уравнением (2.9а), в котором функция источника $W_s = \varepsilon C_R/m$ учитывает массовый поток вещества, поступающего в пласт вместе с инфильтрационными водами:

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (v_x C) = \frac{\varepsilon}{m} C_R, \quad (2.21)$$

где C_R — концентрация вещества в инфильтрационных водах.

Подставляя в уравнение (2.21) выражение для скорости v_x из (2.19а) и заменяя C на $C_R - C'$ ($C' = C_R - C$), получаем

$$\frac{\partial C'}{\partial t} + \varepsilon^* C' + (u_0 + \varepsilon^* x) \frac{\partial C'}{\partial x} = 0. \quad (2.21a)$$

Пространственная координата x в формуле (2.21а) может быть связана с временем t_0 достижения соответствующей точки фронтом частиц, начавших свой путь в момент времени $t = 0$ от входной границы потока ($x = 0$). Тогда с учетом (2.20) уравнение (2.21а) трансформируется к виду

$$\frac{\partial C'}{\partial t} + \frac{\partial C'}{\partial t_0} = -\varepsilon^* C'. \quad (2.22)$$

Уравнение (2.22) является линейным дифференциальным уравнением в частных производных первого порядка. Исходя из достаточно ясных физических соображений, исходное уравнение (2.22) можно «расщепить» на две подзадачи.

Так, при $t < t_0$ фронт раствора (с концентрацией C_0), поступающего в пласт на границе $x = 0$, не достигает расчетной точки (сечения) x и поэтому $\partial C'/\partial t_0 = 0$ ($\partial C'/\partial x = 0$). Интегрирование обыкновенного дифференциального уравнения (2.22)

$$\int_{C_R - C^0}^{C_R - C} \frac{dC'}{C'} = -\varepsilon^* \int_0^t dt \quad (2.23)$$

дает решение

$$C = C^0 + (C_R - C^0)(1 - e^{-\varepsilon^* t}), \quad t < t_0, \quad (2.24)$$

где C^0 — «фоновая» концентрация, $C(x, t = 0)$.

При $t \geq t_0$, когда фронт частиц, мигрирующих от левой границы, достигает расчетного сечения x , наступает стационарный режим переноса и $\partial C'/\partial t = 0$. В этом временном диапазоне

$$\int_{C_R - C_0}^{C_R - C} \frac{dC'}{C'} = -\varepsilon^* \int_0^{t_0} dt_0, \quad (2.25)$$

так что процесс описывается стационарной асимптотикой

$$C = C_0 + (C_R - C_0)(1 - e^{-\varepsilon^* t_0}), \quad t \geq t_0. \quad (2.26)$$

2.3.1.2. Частные случаи

1) Если роль инфильтрационных вод в формировании расхода пренебрежимо мала ($\varepsilon = 0$), то

$$C = \begin{cases} C^0 & \text{при } t < t_0, \\ C_0 & \text{при } t \geq t_0, \quad t_0 = \frac{xn}{v_0}. \end{cases} \quad (2.27)$$

2) Наоборот, если инфильтрация полностью формирует поток подземных вод в горизонте ($q_0 = 0$), то

$$C = C^0 + (C_R - C^0)(1 - e^{-\varepsilon t}) \quad (t \geq 0). \quad (2.28)$$

3) Если воды, внедряющиеся в пласт на границе $x = 0$, содержат загрязняющие компоненты в фоновых концентрациях ($C_0 = C^0$), то

$$C = \begin{cases} C^0 + (C_R - C^0)(1 - e^{-\varepsilon t}) & \text{при } t < t_0 \\ C^0 + (C_R - C^0)(1 - e^{-\varepsilon t_0}) & \text{при } t \geq t_0. \end{cases} \quad (2.29)$$

4) Наоборот, если эти компоненты присутствуют в инфильтрационных водах в фоновых содержаниях ($C_R = C^0$), то

$$C = \begin{cases} C^0 & \text{при } t < t_0, \\ C_0 + (C^0 - C_0)(1 - e^{-\varepsilon t_0}) & \text{при } t \geq t_0. \end{cases} \quad (2.30)$$

Заметим, что во всех расчетных зависимостях для нестационарного массопереноса присутствует комплексный параметр $\varepsilon^* = \varepsilon / mn$, обратная величина которого может отождествляться с характерным (средним) временем пребывания частиц воды в пласте: $\bar{T} = 1/\varepsilon^*$. Это время имеет самостоятельное значение при исследовании ряда гидрогеологических задач, связанных, например, с оценкой защищенности подземных вод от загрязнения (см. также разд. 2.3.2 и 2.3.3), с определением возраста подземных вод изотопными методами и др.

2.3.2. Модель резервуарного типа

Рассмотренная выше квазиодномерная модель (2.21) обладает одним свойством: концентрация в момент времени t остается неизменной во всей области x , не испытывающей влияния входной границы потока, т. е. в общем случае $q_0 > 0$, пока $t \leq t_0$. Она зависит только от характерного времени процесса, $\bar{T} = 1/\varepsilon^*$ (2.24). При выполнении условия $q_0 = 0$ (непроницаемая граница $x = 0$) $t_0 \rightarrow \infty$, т. е. решение (2.24) имеет применение, не ограниченное временными рамками. Тогда и в двухмерной в плане об-

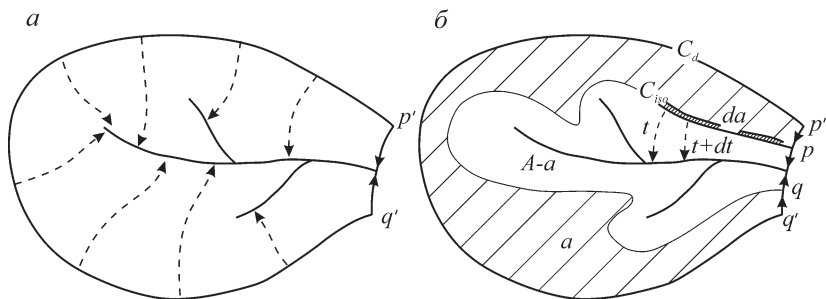


Рис. 2.4. К обоснованию модели резервуарного типа для замкнутого бассейна подземных вод инфильтрационного генезиса.

a — структура потока (пунктирные стрелки — линии тока); *б* — к выводу уравнения для функции распределения времени движения частиц $F(t)$; изохрона C_{iso} характеризует время нахождения частиц менее или равное t (Haitjema, 1995).

ласти фильтрации (рис. 2.4, *a*), ограниченной водораздельной линией, решение (2.24) будет справедливо для любой линии тока, замыкающейся на контуре разгрузки потока. Время переноса вещества поверхностным (речным) потоком много меньше времени миграции в водоносном горизонте, поэтому можно считать, что в замыкающем речном створе концентрация равна концентрации в водоносном горизонте, разгружающемся в реку на всем ее протяжении.

Таким образом, мы приходим к так называемой модели с сосредоточенными параметрами для бассейна подземных вод, получающего площадное инфильтрационное питание. Иногда эту модель называют «резервуарной» моделью идеального смешения вещества. Этой модели соответствует обыкновенное дифференциальное уравнение

$$\frac{dC}{dt} + \frac{C}{\bar{T}} = \frac{C_R}{\bar{T}}, \quad (2.31)$$

к которому легко прийти, задавшись в исходном уравнении (2.21) $\partial C / \partial x = 0$; здесь $\bar{T} = 1/\varepsilon^*$. Физический смысл этой характеристики применительно к водоносным структурам бассейнового типа будет ясен из дальнейшего анализа. Далее также будут рассмотрены решения для характерных концентрационных функций, описывающих изменение концентрации вещества в водоносном горизонте.

2.3.2.1. Распределение времен нахождения частиц жидкости в фильтрационном потоке для подземного водосбора

В гидрогеологии для описания интенсивности водообмена в подземных водоносных системах используется такая характеристика (функция), как кумулятивное распределение времен нахождения частиц жидкости в фильтрационном потоке, $F(t)$. Для замкнутого подземного водосбора, дренируемого речной долиной (рис. 2.4, б), эта функция определяется как (Найтгема, 1995)

$$F(t) = \frac{Q(t)}{Q_{tot}}, \quad (2.32)$$

где Q_{tot} — суммарный расход потока подземных вод, разгружающегося в речную сеть в пределах водосборной площади, а $Q(t)$ — часть расхода фильтрационного потока, которая имеет характерное время нахождения частиц менее или равное t .

Рассмотрим произвольную изохрону C_{iso} с характерным временем нахождения частиц в потоке t , как показано на рис. 2.4, б. В данном случае под термином «изохрона» понимается поверхность, соединяющая точки потока, имеющие одинаковые времена миграции по линиям тока, замыкающихся на контуре разгрузки подземных вод (в речную сеть). Изохрона C_{iso} пересекает две линии тока, ограничивающие водосборную площадь, в точках p и q (рис. 2.4, б). Эти граничные линии тока пересекают линию водораздела в точках p' и q' .

Рассмотрим баланс массы воды для области внутри изохроны C_{iso} за бесконечно малый промежуток времени dt (Найтгема, 1995). Суммарный объем V_{tot} , выносимый речным потоком за время dt в сечении линий тока между p и q , равен:

$$V_{tot} = \varepsilon A dt, \quad (2.33)$$

где A — площадь водосборной площади, ограниченная водораздельной линией C_d и линией тока между точками p' и q' . С другой стороны, величина V_{tot} равна инфильтрационному питанию, приходящемуся на область, ограниченную изохрой C_{iso} и линиями тока между p и q , т. е. $\varepsilon(A - a)dt$ плюс объем воды V_{iso} в водоносном горизонте, протекающий через сечение C_{iso} за время dt :

$$V_{tot} = \varepsilon(A - a)dt + V_{iso}. \quad (2.34)$$

Величина V_{iso} равна количеству воды в водоносном горизонте между изохрой C_{iso} , характеризующейся временем пребывания частиц воды t , и изохрой C_{iso} с временем $t + dt$. Если скорость фильтрации не

меняется по глубине (предпосылка Дюпюи—Форхгеймера), мы вправе записать:

$$V_{iso} = nm da, \quad (3.35)$$

где da — приращение площади между изохронами t и $t + dt$ (рис. 2.4, б). Интервал dt может быть интерпретирован как интервал времени нахождения dt , так что уравнение фильтрационного баланса (массы воды в фильтрационном потоке) (2.34) принимает вид

$$\varepsilon A dt = \varepsilon(A - a) dt + nm da, \quad (2.36)$$

или

$$dt = \frac{nm}{\varepsilon} \frac{da}{a}. \quad (2.36a)$$

Проинтегрируем уравнение (2.36a)

$$\int_0^t dt = \frac{nm}{\varepsilon} \int_a^A \frac{da}{a}, \quad (2.36b)$$

что дает

$$t = \frac{nm}{\varepsilon} \ln \frac{A}{a}. \quad (2.37)$$

Поскольку $Q_{tot} = \varepsilon A$, а $\varepsilon(A - a) = Q(t)$ или $\varepsilon a = Q_{tot} - Q(t)$, то формулу (2.37) можно представить в виде искомой зависимости для функции распределения времени (2.32)

$$F(t) = \frac{Q(t)}{Q_{tot}} = 1 - \exp\left(-\frac{t}{\bar{T}}\right), \quad \bar{T} = \frac{nm}{\varepsilon}. \quad (2.38)$$

При выводе уравнения (2.38) мы не делали никаких оговорок (ограничений), касающихся формы и размера водосборной площади, природы и параметров речной сети, а также проницаемости пород, слагающих водоносный горизонт. Таким образом, $F(t)$, будучи простой экспоненциальной функцией, является достаточно универсальной характеристикой для подземного водосборного бассейна. Она включает безразмерное время \bar{T} . Покажем, как эта величина связана со средневзвешенным временем пребывания частиц воды, t^* , в такого рода водоносной системе:

$$t^* = \frac{\int_0^{Q_{tot}} t dQ(t)}{Q_{tot}} = \int_0^1 t d(Q/Q_{tot}) = \int_0^1 t dF =$$

$$= \int_0^{\infty} t \frac{dF}{dt} dt = \bar{T} \int_0^{\infty} ye^{-y} dy, \quad y = t/\bar{T}. \quad (2.39)$$

Так как последний интеграл в формуле (2.39) равен 1, то получаем

$$t^* = \bar{T}, \quad (2.39a)$$

т. е. \bar{T} отвечает среднему времени нахождения частиц в подземном водосборном бассейне. Впрочем, последнее соотношение можно получить, поделив объем воды в подземном бассейне на общий расход инфильтрационного питания в пределах площади водосбора:

$$t^* = \frac{nmA}{\varepsilon A} = \frac{nm}{\varepsilon} = \bar{T}. \quad (2.39б)$$

Таким образом, формально говоря, абсолютное время, t , в представленных ранее решениях (2.27)—(2.30) нормируется на среднее время пребывания \bar{T} ($1/\varepsilon^*$).

Полученное выражение для функции распределения $F(t)$ может быть использовано для определения изменения концентрации вещества, поступающего в водоносный горизонт в пределах водосборной площади, в выходном створе бассейна.

2.3.2.2. Общее решение для случая переменной во времени концентрации

Пусть по условию задачи нам известна (задана) функция изменения концентрации растворенного вещества в инфильтрационных водах, $C_R(t)$, поступающих на кровлю водоносного горизонта в пределах водосборной площади (рис. 2.4). Для определения выходной концентрационной функции в замыкающем створе потока $C(t)$ воспользуемся принципом суперпозиции (наложения).

Пусть концентрация $C_R(t)$, как и ее производная, является непрерывной функцией (рис. 2.5). При $t = 0$ функция $C_R(0) = 0$.

Представим эту функцию в виде n элементарных приращений. Для этого ось времени разобьем на n равных интервалов величиной $\Delta\tau$ и построим n элементарных приращений, появляющихся в моменты $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n$. Величина перепада $\Delta C_R(\tau)$ зависит от момента τ его появления.

В момент времени $\tau + \Delta\tau$ имеет место приращение $\Delta C_R = C'_R(\tau) \Delta\tau$ (C'_R — производная функции C_R по времени).

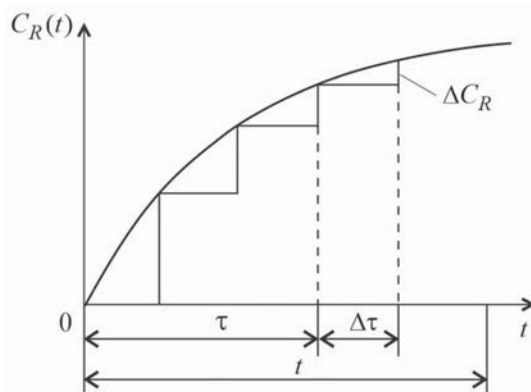


Рис. 2.5. К обоснованию формулы Дюамеля в задаче с переменной граничной концентрацией вещества в инфильтрационных водах.

Тогда изменение массового потока в зоне разгрузки с учетом временного интервала от начала скачка до интересующего момента времени t составит $C'_R(\tau)Q(t - \tau - \Delta\tau)\Delta\tau$. Полный массовый поток в момент времени t равен, очевидно, сумме всех составляющих от отдельных скачков концентрации $C_R(\tau)$, т. е.

$$J(t) = \sum_1^N C'_R(\tau)Q(t - \tau - \Delta\tau)\Delta\tau. \quad (2.40)$$

Концентрация в соответствии с законом разбавления составит

$$C(t) = \frac{J(t)}{Q_{tot}} = \frac{1}{Q_{tot}} \sum_1^N C'_R(\tau)Q(t - \tau - \Delta\tau)\Delta\tau. \quad (2.41)$$

Заменяя конечный интервал приращения времени $\Delta\tau$ на бесконечно малый $d\tau$, т. е. переходя от суммы к интегралу, запишем

$$C(t) = \frac{1}{Q_{tot}} \int_0^t C'_R(\tau)Q(t - \tau)d\tau. \quad (2.42)$$

Отношение $Q(t - \tau)/Q_{tot}$ не что иное, как функция распределения F (2.38), поэтому окончательно имеем

$$C(t) = \int_0^t C'_R(\tau)F(t - \tau)d\tau. \quad (2.43)$$

Переменная интегрирования τ в таком представлении, как и в ранее приведенных зависимостях, является возрастом частицы воды.

Интегральное выражение (2.43) представляет собой интеграл-свертку, или интеграл Дюамеля; $F(\tau)$ часто называют переходной характеристикой, или функцией памяти. Если последняя известна, то можно вычислить концентрационный отклик системы на воздействие $C_R(t)$ любой формы. Интегрируя по частям (2.43), имеем:

$$\begin{aligned} C(t) &= [C_R(\tau)F(t-\tau)]_0^t + \int_0^t C_R(\tau)F'(t-\tau)d\tau = \\ &= C_R(t)F(0) - C_R(0)F(t) + \int_0^t C_R(\tau)F'(t-\tau)d\tau = \\ &= \int_0^t C_R(\tau)F'(t-\tau)d\tau. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Иногда удобно воспользоваться и другими записями интеграла Дюамеля:

$$C(t) = \int_0^t C_R(t-\tau)F'(\tau)d\tau, \quad (2.44a)$$

$$C(t) = \int_0^t C_R'(t-\tau)F(\tau)d\tau. \quad (2.44б)$$

Поскольку при $T > t$ $C_R = 0$, а при $T < 0$ F и $F' = 0$, то интегралы могут быть представлены в бесконечных пределах, например:

$$C(t) = \int_{-\infty}^{\infty} C_R(t-\tau)F'(\tau)d\tau. \quad (2.44в)$$

2.3.2.3. Частные решения (примеры)

Эти решения отвечают инфильтрационному типу миграционных задач для переходной функции $F(t)$ (кумулятивное распределение времени), определяемой по (2.38).

Пример 1. Для ступенчатого входного сигнала (входной концентрационной функции) $C_R = C_0$ (нулевые начальные условия):

$$C(t) = \int_0^t C_0 F'(\tau)d\tau = \frac{C_0}{T} \int_0^t \exp(-\tau/T)d\tau = C_0 \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{T}\right) \right]. \quad (2.45)$$

С учетом начальной концентрации C^0 :

$$C(t) = C^0 + (C_0 - C^0) \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{T}\right) \right], \quad (2.45a)$$

что формально совпадает с ранее полученным решением одномерной задачи (2.24).

Пример 2. Для импульсного входного сигнала

$$C_R(t) = \frac{P}{\varepsilon} \delta(t), \quad (2.46)$$

где P — начальная плотность загрязнения поверхности горизонта, например, выраженная в $г/м^2$; $\delta(t)$ — дельта-функция Дирака (размерность, обратная времени). Тогда общее решение (2.44) преобразуется следующим образом:

$$\begin{aligned} C(t) &= \frac{P}{\varepsilon} \int_{-\infty}^{\infty} C_R(\tau) F'(t - \tau) d\tau = \frac{P}{\varepsilon T} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\tau) \exp[-(t - \tau)/\bar{T}] d\tau = \\ &= \frac{P}{\varepsilon T} \exp[-(t - \tau)/\bar{T}]_{\tau=0}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Здесь использовано правило

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0). \quad (2.47a)$$

Таким образом, окончательное решение принимает вид

$$C(t) = \frac{P}{\varepsilon T} \exp[-(t/\bar{T})] = \frac{P}{mn} \exp[-(t/\bar{T})]. \quad (2.48)$$

Пример 3. Для прогнозирования последствий линейного роста концентрации вещества в инфильтрационных водах во времени (нулевые начальные условия)

$$C_{gR}(t) = C_{gR} t \quad (2.49)$$

можно воспользоваться интегралом Дюамеля в форме (2.44a)

$$C(t) = \int_0^t C_{gR}(t - \tau) F'(\tau) d\tau = \frac{1}{T} \int_0^t [C_{gR}(t - \tau)] \exp\left(-\frac{\tau}{T}\right) d\tau. \quad (2.50)$$

Интегрируя, получаем решение задачи в виде

$$C(t) = C_{gR} [(t - \bar{T}) + \bar{T}e^{-t/\bar{T}}]; \quad (2.51)$$

здесь C_{gR} — временной градиент концентрации [$ML^{-3}T^{-1}$]. Для более реалистического условия, учитывающего рост концентрации от начального значения C^0 ,

$$C(t) = C^0 + C_{gR} [(t - \bar{T}) + \bar{T}e^{-t/\bar{T}}], \quad (2.52)$$

откуда следует, что для длительного миграционного процесса ($t \gg \bar{T}$) выходная концентрационная функция также является линейной, однако ее график $C(t)$ смещен по оси времени вправо на величину \bar{T} относительно функции $C_R(t)$.

Представленные выше решения (примеры) имеют расширение, связанное с включением в рассматриваемые процессы деструкцию (распад) растворенного вещества (разд. 2.5.2.2).

2.3.2.4. Задача о качестве воды в скважине, эксплуатирующей грунтовые воды

Грунтовые воды, уровни которых располагаются вблизи поверхности, нередко подвержены опасности загрязнения компонентами антропогенного происхождения (например, сельскохозяйственными удобрениями), которые поступают в водоносные горизонты вместе с инфильтрационными водами. В этой связи становятся актуальными прогнозы изменения содержания этих компонентов в водозаборных скважинах, эксплуатирующих грунтовые горизонты.

На рис. 2.6 схематично показана водозаборная скважина (ее дебит Q) в пласте мощностью m (пористость n) при наличии площадной инфильтрации ε (Lerner, Papatolias, 1993). Показаны также две изохроны на два момента времени, t и $t + dt$, ооконтуривающие соответственно площади A и $A + dA$.

Рассмотрим баланс массы воды в объеме пористого горизонта, ограниченного изохроной t , за интервал времени dt . Объем отобранной воды будет определяться объемом инфильтрационных вод в пределах площади A ($A\varepsilon dt$) объемом воды за счет приращения этой площади dA ($dAmn$):

$$Qdt - A\varepsilon dt - dAmn = 0. \quad (2.53)$$

Уравнение (2.53) может быть проинтегрировано, что дает отношение между A и t :

$$A = \frac{Q}{\varepsilon} \left[1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon t}{mn}\right) \right], \quad (2.54)$$

Отсюда видно, что при больших t ($t \gg mn/\varepsilon$) площадь A стремится к постоянной величине Q/ε .

Теперь определим динамику изменения концентрации компонента в откачиваемой воде. В момент t скважина получаем воду из области A с концентрацией C_R , одновременно скважиной отбирается вода с исходной



Рис. 2.6. Динамика зоны захвата при подтягивании частиц воды к водозаборной скважине.

(начальной) концентрации, C^0 . Поэтому массовый баланс загрязняющего компонента в момент t будет:

$$QC - \varepsilon AC_R - (Q - \varepsilon A)C^0 = 0, \quad (2.55)$$

где C — искомая концентрация в скважине. Комбинируя (2.54) и (2.55), находим:

$$C = C^0 + (C_R - C^0) \left[1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon t}{mn}\right) \right]. \quad (2.56)$$

Интересно, что концентрация в откачиваемой воде не зависит от дебита откачки, а само решение совпадает с решением плановой одномерной задачи (2.28).

Пример. Пусть водоносный горизонт характеризуется параметрами $m = 30$ м, $n = 0.2$. Его инфильтрационное питание оценивается величиной $\varepsilon = 200$ мм/год (0.2 м/год). Исходное содержание нитратов в подземных водах $C^0 = 20$ мг/л. Интенсификация землепользования и увеличение объемов вносимых удобрений может привести к росту содержания нитратов в инфильтрационных водах до значения $C_R = 70$ мг/л. Требуется определить время $t_{кр}$ достижения максимально допустимого уровня загрязнения подземных вод, оцениваемого показателем $C_{ПДК} = 45$ мг/дм³. Для решения задачи перепишем формулу (2.56) в виде:

$$t_{кр} = -\frac{1}{\varepsilon^*} \ln \frac{C_R - C_{ПДК}}{C_R - C^0}. \quad (2.57)$$

Подставляя приведенные выше значения, получаем: $t_{кр} = -30 \ln 0.45 \approx 24$ года.

2.3.3. Миграция в плановом двухмерном (в плоскости x — y) фильтрационном потоке

Уравнение неразрывности фильтрационного потока (2.8) редуцируется к виду

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0, \quad (2.58)$$

а кинематические соотношения (2.11) — к системе двух уравнений

$$\frac{dx}{dt} = u_x, \quad \frac{dy}{dt} = u_y, \quad (2.59)$$

решением которого является уравнение линий тока

$$\frac{dx}{dy} = \frac{u_x}{u_y}. \quad (2.60)$$

Пусть лента тока в плоскости x — y ограничена двумя линиями тока, характеризующимися значениями функции тока ψ_1 и ψ_2 , причем в силу базового определения $\psi_2 = \psi_1 + d\psi$ (рис. 2.7). Из закона сохранения массы для несжимаемой жидкости следует, что ее объемный поток dq (расход — в гидрогеологической терминологии) через произвольную площадку $\Delta n (= dn)$ должен быть равен сумме потоков через $\Delta x (= dx)$ и $\Delta y (= dy)$, и поэтому

$$dq \equiv |\mathbf{v}| dn = v_x dy - v_y dx, \quad (2.61)$$

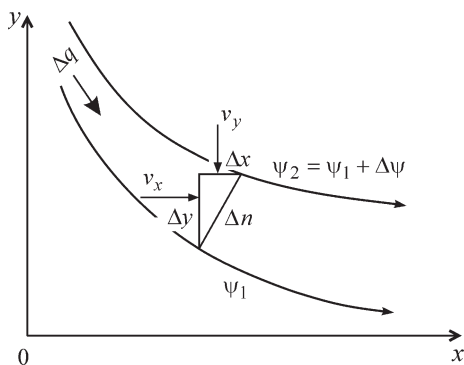


Рис. 2.7. К выводу соотношения между функцией тока и расходом.

где $|\mathbf{v}| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$ — модуль вектора скорости. Этот поток в силу определения отвечает приращению $d\psi$. Если рассматривать $d\psi$ как полный дифференциал функции ψ , имеющей непрерывные частные производные, то мы вправе записать:

$$d\psi = \frac{\partial\psi}{\partial y} dy + \frac{\partial\psi}{\partial x} dx. \quad (2.62)$$

Равенство левых частей уравнений (2.61) и (2.62) предполагает выполнение соотношений

$$v_x = \frac{\partial\psi}{\partial y}, \quad v_y = -\frac{\partial\psi}{\partial x}, \quad (2.63)$$

т. е. оказывается, что скорость фильтрации (в форме закона Дарси) может быть выражена не только через градиент напора (как в формулах 2.1а), но и посредством использования градиента функции тока.

Пусть в уравнении (2.62) $d\psi = 0$ (что само по себе означает $\psi = \text{const}$). Подставим производные ψ из (2.63) в (2.62). Отсюда сразу получаем равенство для линии тока (2.60), т. е. мы аналитически доказали то, что непосредственно следует из рис. 2.7: при $\Delta\psi \equiv d\psi = 0$ ψ_1 и ψ_2 являются одной и той же линией.

Введем понятие *потенциала скорости фильтрации*, ϕ . Для напорного водоносного горизонта (Шестаков, 1973, 1995)

$$\phi = kh + C, \quad (2.64)$$

где k — коэффициент фильтрации, h — напор, C — константа (обычно принимается равной 0). Тогда компоненты скорости фильтрации могут быть представлены некоторой «комбинацией» производных функций ψ и ϕ :

$$v_x = -\frac{\partial\phi}{\partial x} = \frac{\partial\psi}{\partial y}, \quad v_y = -\frac{\partial\phi}{\partial y} = -\frac{\partial\psi}{\partial x}. \quad (2.65)$$

Рассмотрим далее свойства функции тока. Для этого перепишем еще раз уравнения (2.65) в виде системы уравнений

$$\frac{\partial\psi}{\partial y} = -\frac{\partial\phi}{\partial x}, \quad (2.66a)$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{\partial\phi}{\partial y}, \quad (2.66b)$$

которые в физико-математической литературе часто называются уравнениями Коши—Римана. Тогда

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) = -\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}, \quad (2.67a)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right) = -\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2}. \quad (2.67b)$$

Отсюда приходим к доказательству того факта, что обе функции, $\varphi(x, y)$ (потенциал скорости фильтрации) и $\psi(x, y)$ (функция тока), удовлетворяют линейному однородному уравнению Лапласа

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = 0, \quad (2.68a)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = 0. \quad (2.68b)$$

Градиенты функции тока $\psi(x, y)$ (2.63) связаны с функцией напора $h(x, y)$ (2.1) следующими равенствами:

$$v_x = -k_x \frac{\partial h}{\partial x} = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v_y = -k_y \frac{\partial h}{\partial y} = -\frac{\partial \psi}{\partial x}. \quad (2.69a)$$

Воспользуемся известным свойством дифференциального оператора для потенциального поля:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial h}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right), \quad (2.69b)$$

или

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial h}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right) = 0. \quad (2.69b)$$

Подставим в последнее уравнение выражения для $h(\psi)$ из (2.69a). Результатом является уравнение Лапласа для функции тока $\psi(x, y)$ в случае фильтрации в неоднородном и анизотропном пласте:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{k_y} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{k_x} \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right) = 0. \quad (2.69\Gamma)$$

К уравнениям Лапласа, подобным (2.68), можно прийти и для *безнапорной* фильтрации. В этом случае, однако, удобнее пользоваться *функцией гидравлического потенциала*, которая имеет следующее обобщенное представление

$$\Phi(x, y) = \begin{cases} kmh + C & \text{— напорный поток,} \\ \frac{kh^2}{2} + C & \text{— безнапорный поток,} \end{cases} \quad (2.70)$$

где h — гидродинамический напор (при напорной фильтрации) или обводненная мощность (при безнапорном режиме). Соответственно уравнения Коши—Римана имеют вид, подобный (2.66):

$$\frac{\partial \Psi}{\partial y} = -\frac{\partial \Phi}{\partial x}, \quad (2.70a)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{\partial \Phi}{\partial y}, \quad (2.70б)$$

что доказывает принадлежность Φ и Ψ к классу гармонических функций, удовлетворяющих уравнению Лапласа. Для компонент скорости фильтрации справедливы соотношения:

— напорный поток

$$mv_x = \frac{\partial \Psi}{\partial y}, \quad mv_y = -\frac{\partial \Psi}{\partial x}, \quad (2.70в)$$

— безнапорный поток

$$hv_x = \frac{\partial \Psi}{\partial y}, \quad hv_y = -\frac{\partial \Psi}{\partial x}; \quad (2.70г)$$

здесь $m = \text{const}$, $h = h(x, y)$. Последние равенства (2.70г) показывают, что для нахождения компонент v_x и v_y в безнапорном потоке необходим поиск решения задачи фильтрации не только относительно функции тока, но и относительно функции напора $h(x, y)$, что снижает универсальность решения задач, связанных с определением временных характеристик движения частиц

воды вдоль линий тока. Поэтому далее будем рассматривать в основном условия напорной фильтрации.

Для решения гидрогеологических задач, связанных с описанием поля напоров и структуры фильтрационных потоков с помощью потенциальной функции φ и функции тока ψ , могут использоваться известные свойства уравнения Лапласа, в частности:

— решениями уравнений (2.68) будут суммы их частных решений,

— произведение частного решения каждого из уравнений (2.68) на произвольную постоянную также дает решение одного из уравнений (2.68).

Указанные свойства являются отражением принципа суперпозиции, широко используемому при решении уравнений фильтрации. Так, если потенциал скорости фильтрации φ_1 , φ_2 и т. д. или функции тока ψ_1 , ψ_2 и т. д. удовлетворяет уравнению Лапласа, то решение задачи можно представить в виде

$$\varphi = \varphi_1 + \varphi_2 + \dots, \quad \psi = \psi_1 + \psi_2 + \dots \quad (2.71)$$

Для того чтобы воспользоваться принципом суперпозиции, необходимо записать соотношения для функций φ и ψ применительно к базовым координатным системам. В декартовой системе координат они представлены формулами (2.65), в цилиндрической (осесимметричный вариант) системе координат

$$v_r = -\frac{\partial\varphi}{\partial r} = -\frac{1}{r} \frac{\partial\psi}{\partial\theta}, \quad v_\theta = -\frac{1}{r} \frac{\partial\varphi}{\partial\theta} = \frac{\partial\psi}{\partial r}. \quad (2.72a)$$

Далее могут быть получены выражения для «типовых» структур фильтрационных течений, формирующихся под влиянием регионального фильтрационного потока или обособленных источников гидродинамического возмущения. Приведем простейшие примеры, хорошо описанные в фундаментальных работах ряда авторов (см., например: Bear, 1972; Strack, 2017).

В случае одномерного потока со скоростью v_0 , направление вектора которого образует угол α с осью x ,

$$v_x = v_0 \cos\alpha, \quad v_y = v_0 \sin\alpha, \quad (2.72b)$$

и в соответствии с (2.65) имеем

$$\varphi = \varphi_0 - v_0(x\cos\alpha + y\sin\alpha), \quad (2.73a)$$

$$\psi = \psi_0 - v_0(y\cos\alpha - x\sin\alpha). \quad (2.73b)$$

В случае радиального потока, формируемого нагнетательной скважиной (удельный дебит $q = Q_w/m$), в соответствии с первой формулой (2.72а)

$$v_r = \frac{q}{2\pi r} = -\frac{\partial\varphi}{\partial r} = -\frac{1}{r} \frac{\partial\psi}{\partial\theta}. \quad (2.74)$$

Интегрируя (2.74), получаем

$$\varphi = \varphi_0 - \frac{q}{2\pi} \ln(r), \quad \psi = \psi_0 - \frac{q}{2\pi} \theta, \quad (2.75)$$

или в декартовой системе координат:

$$\varphi = \varphi_0 - \frac{q}{4\pi} \ln(x^2 + y^2), \quad (2.76a)$$

$$\psi = \psi_0 - \frac{q}{2\pi} \operatorname{arctg}\left(\frac{y}{x}\right). \quad (2.76б)$$

Пример. Рассмотрим задачу движения границы раздела вытесняемой и вытесняющей жидкости, сформированной под влиянием закачки раствора через скважину в условиях естественного фильтрационного потока (рис. 2.8).

Суперпозиция базовых решений для линейного потока (2.73 ($\alpha = 0$) и 2.76) дает

$$\varphi = \varphi_0 - v_0 x - \frac{q}{4\pi} \ln(x^2 + y^2), \quad (2.77a)$$

$$\psi = \psi_0 - v_0 y - \frac{q}{2\pi} \operatorname{arctg}\left(\frac{y}{x}\right), \quad (2.77б)$$

где v_0 — скорость фильтрации регионального потока; q — удельный дебит нагнетания; φ_0 и ψ_0 — постоянные интегрирования (в принятой системе координат удобно отсчет вести от «нулевой» линии тока $y = 0$, так что $\psi_0 = 0$).

Из уравнения (2.77 а) легко получить выражения для компонент действительной скорости фильтрации:

$$u_x = \frac{v_x}{n} = -\frac{1}{n} \frac{\partial\varphi}{\partial x} = \frac{dx}{dt} = \frac{v_0}{n} + \frac{q}{2\pi n} \frac{x}{x^2 + y^2}, \quad (2.78a)$$

$$u_y = \frac{v_y}{n} = -\frac{1}{n} \frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{dy}{dt} = \frac{q}{2\pi n} \frac{y}{x^2 + y^2}. \quad (2.78б)$$

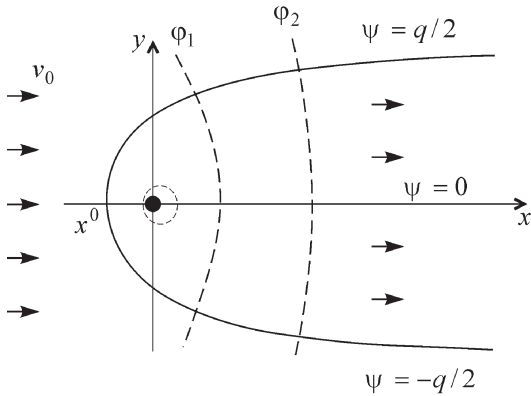


Рис. 2.8. Нагнетательная скважина в естественном фильтрационном потоке (контур, показанный *сплошной* линией, — нейтральная линия тока; *штриховые* линии — эквипотенциали).

Совместное рассмотрение дифференциальной части тождества (2.78б) и уравнения для функции тока (2.77б) дает выражение (при $\psi_0 = 0$), связывающее дифференциал времени (dt) с элементарным приращением координаты dy :

$$dt = \frac{2\pi n}{q} \operatorname{cosec}^2 \left[\frac{2\pi}{q} (\psi + v_0 y) \right] y dy. \quad (2.79)$$

Интегрирование (2.79) позволяет найти время, которое требуется частице, начавшей свой путь от скважины ($x = 0$, $y = 0$) в момент $t = 0$, для того чтобы достичь точки x , y (Bear, 1972). Соответствующее решение в безразмерной форме имеет вид:

$$\tau = \xi + \ln \left(\frac{\sin \theta}{\sin (\eta + \theta)} \right), \quad (2.80)$$

где $\xi = \frac{2\pi v_0}{q} x$, $\eta = \frac{2\pi v_0}{q} y$, $\tau = \frac{2\pi v_0^2}{nq} t$, $\theta = \operatorname{arctg} \left(\frac{\eta}{\xi} \right)$. (2.80a)

Анализ решения (2.80) применительно к схожей проблеме выделения зоны воздействия источника фильтрационного возмущения на региональный поток будет рассмотрен в разд. 5.1.

2.4. Задача о миграции вещества в профильном (в плоскости $x-z$) фильтрационном потоке, наведенном инфильтрацией

В основе математической формализации процесса лежит уравнение неразрывности (2.8), которое в случае профильного (в плоскости $x-z$) фильтрационного потока трансформируется к виду:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0, \quad (2.81)$$

где v_x и v_z — горизонтальная и вертикальная компоненты скорости фильтрации.

2.4.1. Приближение Дюпюи—Форхгеймера

Большинство задач фильтрации решается в предпосылке Дюпюи—Форхгеймера, постулирующей неизменность горизонтального градиента по мощности пласта z в фиксированной точке x . В однородном полуограниченном напорном пласте мощностью m , получающем на границе $z = 0$ равномерное инфильтрационное питание с удельной интенсивностью ε (рис. 2.9), горизонтальная скорость потока будет

$$v_x = \frac{\varepsilon}{m} x; \quad (2.82)$$

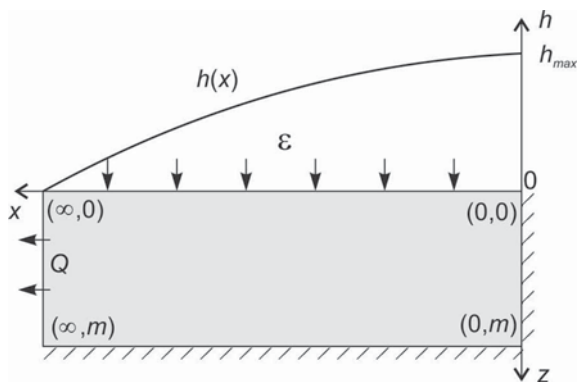


Рис. 2.9. Концептуальная модель полуограниченного пласта.

здесь считается, что координата $x = 0$ совпадает с положением непроницаемой границы (ассоциируемой чаще всего с водораздельной линией). Формула получается из простого балансового соотношения $q_x = v_x m = \varepsilon x$ (где $x = 0$ — начало координатной оси, совпадающей с водораздельной линией — рис. 2.9).

Поскольку скорость v_x является функцией только горизонтальной координаты x , мы можем переписать уравнение (2.81) в виде:

$$dv_z = -\frac{\partial v_x}{\partial x} dz. \quad (2.83)$$

Проинтегрируем последнее уравнение, считая, что на кровле водоносного горизонта вертикальная скорость фильтрации равна скорости инфильтрации ε (Полубаринова-Кочина, 1977):

$$\int_{\varepsilon}^{v_z} v_z = -\frac{\partial v_x}{\partial x} \int_0^z dz, \quad (2.84)$$

откуда

$$v_z - \varepsilon = -\frac{\partial v_x}{\partial x} (z - 0) = -\frac{\varepsilon z}{m}. \quad (2.85)$$

Последнее тождество учитывает соотношение (2.82) для горизонтальной скорости фильтрации, которая неограниченно растет. Окончательно

$$v_z = \varepsilon \left(1 - \frac{z}{m} \right). \quad (2.86)$$

Таким образом, фильтрационное поле описывается системой уравнений

$$v_x = \varepsilon \bar{x}, \quad (2.87a)$$

$$v_z = \varepsilon (1 - \bar{z}), \quad (2.87b)$$

где $\bar{x} = x/m$, $\bar{z} = z/m$.

Решение задачи относительно скоростей фильтрации позволяют перейти к описанию процесса в терминах функции тока, $\psi(x, z)$, и функции потенциала скорости, $\varphi(x, z)$. Дадим прежде

аналитическое представление граничных условий (ГУ) для функции тока:

$$\psi(x = 0, z) = C_1 = 0, \quad (2.88a)$$

$$\psi(x, z = m) = C_2 = 0, \quad (2.88б)$$

$$\psi(x, z = 0) = \varepsilon x. \quad (2.88в)$$

Первое и второе уравнения отвечают условиям постоянства значений функции тока вдоль непроницаемых границ. Соответствующие константы (C_1 и C_2) приняты равными 0. Последнее условие отвечает расходу инфильтрационных вод через кровлю пласта в пределах ленты тока, ограниченной водораздельной линией ($x = 0$) и линией тока, берущей начало на кровле горизонта и характеризующейся текущей координатой x .

В профильной задаче, по аналогии с (2.65), потенциал скорости фильтрации и функция тока связаны дифференциальными соотношениями

$$v_x = -\frac{\partial\varphi}{\partial x} = -\frac{\partial\psi}{\partial z}, \quad v_z = -\frac{\partial\varphi}{\partial z} = \frac{\partial\psi}{\partial x}. \quad (2.89)$$

Проинтегрируем последовательно первое и второе выражения в (2.89)

$$\int_0^\psi d\psi = -\int_m^z v_x dz = -\frac{\varepsilon x}{m} \int_m^z dz, \quad (2.90a)$$

$$\int_0^\psi d\psi = \int_0^x v_z dx = \frac{\varepsilon}{m} (m - z) \int_0^x dx, \quad (2.90б)$$

в результате получаем

$$\psi = \frac{\varepsilon x}{m} (m - z), \quad (2.91)$$

т. е. оба способа интегрирования приводят к одному и тому же выражению для функции тока. Перепишем (2.91) в виде

$$z = m \left(1 - \frac{\psi_0}{\varepsilon x} \right), \quad (2.92)$$

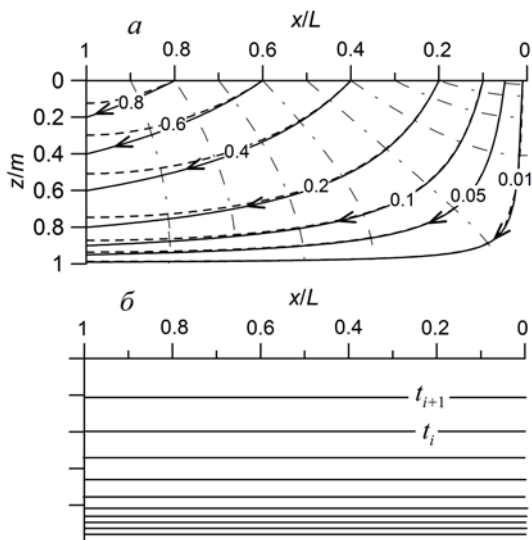


Рис. 2.10. Структура потока, сформированного инфильтрационным питанием водоносного горизонта (а) и изохроны (б).

На рисунке (а) сплошные линии — решение (2.93), штриховые — точное решение (2.118) (в котором учтено противоположное направление оси x ; $m/L = 0.5$ — см. разд. 2.4.4), штрих-пунктирные — линии равных напоров (точное решение). Числа у кривых (линий тока) — значения $\bar{\psi}_0$.

что говорит о том, что линия тока является гиперболой, $\psi_0 = \varepsilon x_0$ — значение функции тока при $z = 0$. Решение (2.92) может быть также представлено в безразмерной форме:

$$\bar{z} = \left(1 - \frac{\bar{\Psi}_0}{\bar{x}}\right), \quad \bar{\Psi}_0 = \frac{\Psi_0}{\varepsilon L}, \quad \bar{x} = x/L, \quad \bar{z} = z/L. \quad (2.93)$$

Расстояние L выполняет роль масштабной величины: сечение $x = L$, где предполагается разгрузка фильтрационного потока, никоим образом не влияет на структуру последнего, в противном случае для функций ψ и φ потребовалось бы задание граничных условий. Так как функция ψ также нормируется относительно L , то графики сохраняют подобие при любом L . На рис. 2.10, а показаны линии тока, отвечающие различным безразмерным значениям функции тока $\bar{\psi}_0$ (2.93). Кроме того, на график нанесено точное решение для пласта ограниченной протяженности (см. далее разд. 2.4.4), а также линии равных напоров.

Для нахождения потенциала скорости фильтрации воспользуемся формулой для вертикальной скорости фильтрации (2.89)

$$v_z = -\frac{d\varphi}{dz} = \varepsilon \left(1 - \frac{z}{m}\right). \quad (2.94)$$

Разделим переменные и проинтегрируем выражение (2.94):

$$-\int_{\varphi_0}^{\varphi} d\varphi = \int_0^z \varepsilon \left(1 - \frac{z}{m}\right) dz, \quad (2.94a)$$

где φ_0 — значение потенциала на кровле водоносного горизонта ($z = 0$). Интегрирование дает:

$$\varphi = \varphi_0 + \frac{\varepsilon}{2m} (z^2 - 2mz). \quad (2.95)$$

Наконец, для определения времени миграции частиц вдоль линий тока ψ_0 необходимо воспользоваться кинематическими равенствами:

$$\frac{v_x}{n} = \frac{dx}{dt} = -\frac{1}{n} \frac{d\psi}{dz}, \quad \frac{v_z}{n} = \frac{dz}{dt} = \frac{1}{n} \frac{d\psi}{dx}. \quad (2.96)$$

Например, интегрируя эти равенства, получаем

$$\int_0^t dt = t = -n \int_{x_0}^x \frac{dx}{d\psi/dz} = \frac{mn}{\varepsilon} \int_{x_0}^x \frac{dx}{x} = \frac{mn}{\varepsilon} \ln \frac{x}{x_0}, \quad (2.97a)$$

$$\int_0^t dt = t = -n \int_0^z \frac{dz}{d\psi/dx} = -\frac{mn}{\varepsilon} \int_0^z \frac{dz}{z-m} = -\frac{mn}{\varepsilon} \ln \left(1 - \frac{z}{m}\right); \quad (2.97б)$$

здесь x_0 отвечает координате линии тока $\psi_0 = x_0 \varepsilon$ ($z = 0$). Из (2.97a) получаем выражение для безразмерного времени $\tau(\bar{\psi}_0)$:

$$\tau = \frac{t}{\bar{T}} = -\ln \bar{\psi}_0, \quad (2.97в)$$

где $\bar{T} = mn/\varepsilon$ отвечает среднему времени нахождения частиц в подземном водосборном бассейне (разд. 2.3.2.1); $\bar{\psi}_0 = \psi_0/\varepsilon L$.

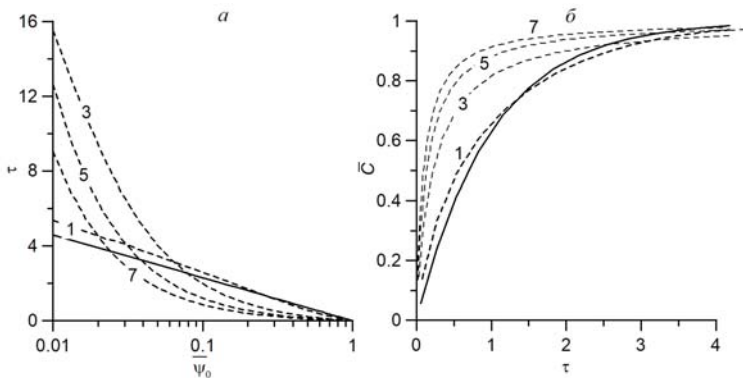


Рис. 2.11. Безразмерное время миграции частиц вдоль траекторий движения $\tau(\bar{\psi}_0)$ (2.97в) (а), и график относительной концентрации $\bar{C}(\tau)$ (2.97д) (б) (сплошные линии).

Пунктиром показано точное решение задачи (2.123) при различных значениях коэффициента анизотропии ($\kappa = \sqrt{k_x/k_z}$ — числа у кривых); $m/L = 0.5$.

На рис. 2.11, а видно, что времена миграции резко возрастают по мере приближения начальных координат линий тока к водоразделу ($\bar{\psi}_0 \rightarrow 0$). На рис. 2.11 показаны также линии графиков, отвечающих точному решению задачи (не ограниченному предпосылкой Дюпюи—Форхгеймера) в изотропном и анизотропном пластах (см. разд. 2.4.4).

2.4.2. Функция кумулятивного распределения и концентрационный профиль

Характеристика ψ_0 (2.97в) может быть представлена в виде зависимости

$$\psi_0(t) = Q_{tot} - Q(t), \quad (2.97г)$$

связывающей суммарный расход потока Q_{tot} ($= \varepsilon L$) с частью расхода фильтрационного потока $Q(t)$, которая имеет характерное время нахождения частиц менее или равное t . Отсюда получаем кумулятивное распределение времени нахождения частиц жидкости в фильтрационном потоке,

$$F(t) = \frac{Q(t)}{Q_{tot}} = 1 - \bar{\psi}_0. \quad (2.97д)$$

Подставляя сюда значение $\bar{\psi}_0$ из (2.97в), получаем выражение

$$F(t) = \frac{Q(t)}{Q_{tot}} = 1 - \exp\left(-\frac{t}{\bar{T}}\right), \quad (2.97e)$$

аналогичное тому, что было получено для замкнутого подземного водосбора, дренируемого речной долиной (Найтjема, 1995), — см. (2.32)—(2.38).

При постоянной концентрации некоторой индикаторной метки (загрязняющий компонент) в инфильтрационных водах, C_R , распределение $F(t)$ может рассматриваться как доля инфильтрационных вод, поступивших в пласт в момент t , в общем фильтрационном расходе, т. е. являться эквивалентом относительной концентрации: $F(t) \equiv \bar{C} = (C - C^0)/(C_R - C^0)$. График функции $\bar{C}(\tau)$ представлен на рис. 2.11, б. Данное решение, отвечающее предпосылке поршневого вытеснения, пренебрегает диффузионным обменом вещества между линиями тока.

К решению задачи можно подойти, рассматривая перемещение фронта загрязнения в профиле пласта. Пусть в инфильтрационных водах присутствует некоторый загрязняющий компонент, концентрация которого C_R . Перепишем (2.97а) и (2.97б) в форме, позволяющей определить текущую (в момент времени t) координату любой частицы (x, z), поступившей на поверхность горизонта $z = 0$ в точке $x = x_0$ в момент времени $t = 0$:

$$\frac{x}{x_0} = e^{\varepsilon^* t}, \quad \frac{z}{m} = (1 - e^{-\varepsilon^* t}), \quad \varepsilon^* = \frac{\varepsilon}{mn}. \quad (2.98a)$$

При равномерном поступлении вещества во всей площади водосбора оно появится на одной и той же глубине z от поверхности в момент

$$t = \frac{1}{\varepsilon^*} \ln\left(1 - \frac{z}{m}\right)^{-1} \quad (2.98б)$$

любой точки x (рис. 2.10, б). Таким образом, распределение вещества в профиле водоносного горизонта носит ступенчатый характер: перемещение контакта загрязненных инфильтрационных и чистых пластовых вод описывается соотношением (2.98б), имеющим вид характеристического уравнения для ступенчатой функции

$$\begin{aligned} C &= C_R \quad z/m \leq 1 - \exp(-\varepsilon^* t), \\ C &= 0 \quad z/m > 1 - \exp(-\varepsilon^* t) \end{aligned} \quad (2.98a)$$

(«нулевые» начальные условия).

В такой постановке задачи решение (2.98в) нечувствительно к гидродисперсионному рассеянию вещества, которое имеет место на контакте инфильтрационных и пластовых вод (Румынин, 2011). Однако при пакетном (или импульсном) характере входного сигнала влияние дисперсии на концентрационные распределения существенно, что может повлиять, в частности, на интерпретацию изотопных данных при определении возраста подземных вод (Solomon, Sudicky, 1991).

2.4.3. Профильно-неоднородный пласт

Рассмотрим горизонтально-слоистый пласт, характеризующийся изменчивостью коэффициента фильтрации по глубине $k = k(z)$. Удельный расход фильтрационного потока в таком пласте, получающем инфильтрационное питание, определяется выражением

$$q = \varepsilon x = -T_m \frac{dh}{dx}, \quad T_m = \int_0^m k(z) dz, \quad (2.99)$$

что справедливо, когда гидравлический градиент потока не зависит от координаты z — предпосылка Дюпюи—Форхгеймера; здесь $h = h(x)$ — гидродинамический напор.

Из последнего равенства получаем выражение для горизонтальной скорости фильтрации

$$v_x = -k(z) \frac{dh}{dx} = \varepsilon k(z) \frac{x}{T_m}, \quad T_m = \int_0^m k(z) dz. \quad (2.99a)$$

В результате интегрирования уравнения неразрывности стационарного фильтрационного потока (2.81) при $v_z|_{z=0} = \varepsilon$ получаем

$$v_z - \varepsilon = - \int_0^z \frac{\partial v_x}{\partial x} dz, \quad (2.99б)$$

или

$$v_z = \varepsilon \left(1 - \frac{T_z}{T_m} \right), \quad T_z = \int_0^z k(\xi) d\xi. \quad (2.99\text{в})$$

Зависимость для характеристики $t(z)$ — времени нахождения частицы, имеющей текущую координату z , в пласте определяется интегрированием третьего уравнения из системы кинематических уравнений (2.11):

$$\int_0^t dt = n \int_0^z \frac{dz}{v_z}. \quad (2.99\text{г})$$

После несложных операций приходим к интегральному выражению для безразмерного времени

$$\tau = \int_0^{\bar{z}} \frac{d\bar{\eta}}{1 - \bar{T}_\eta / \bar{T}_m}, \quad (2.99\text{д})$$

где $\tau = mnt/\varepsilon$ — безразмерное время (2.97в), $\bar{T}_\eta = \int_0^{\bar{\eta}} k(\bar{\xi}) d\bar{\xi}$, $\bar{T}_m = \int_0^1 k(\bar{\xi}) d\bar{\xi}$, $\bar{z} = z/m$. По сути, (2.99д) и есть решение задачи:

при известном (заданном) профиле проницаемости $k(z)$, для заданного τ , подобрав z , можно найти отношение \bar{T}_η / \bar{T}_m , которое и определяет среднюю концентрацию вещества в пласте (см. далее).

Пример. Пусть $k(z)$ характеризует затухание проницаемости пласта с глубиной по экспоненциальному закону

$$k(z) = k_0 \exp(-Az), \quad \text{или} \quad k(\bar{z}) = k_0 \exp(-\alpha \bar{z}), \quad \alpha = Am. \quad (2.100)$$

Тогда проводимости определяются зависимостями:

$$\bar{T}_\eta = -\frac{k_0}{\alpha} (e^{-\alpha \bar{\eta}} - 1), \quad \bar{T}_m = -\frac{k_0}{\alpha} (e^{-\alpha} - 1), \quad (2.100\text{а})$$

а для безразмерного времени формула (2.99д) принимает вид

$$\tau = (1 - e^{-\alpha}) \int_0^{\bar{z}} \frac{d\bar{\eta}}{e^{-\alpha \bar{\eta}} - e^{-\alpha}}. \quad (2.100\text{б})$$

Интегрирование дает

$$\tau = \frac{1 - e^{-\alpha}}{\alpha e^{-\alpha}} \ln \frac{(1 - e^{-\alpha}) e^{-\alpha \bar{z}}}{e^{-\alpha \bar{z}} - e^{-\alpha}}.$$

Отсюда безразмерная глубина проникновения фронта инфильтрационных вод будет

$$\bar{z}(\tau) = -\frac{1}{\alpha} \ln \frac{p(\tau) e^{-\alpha}}{p(\tau) - 1 + e^{-\alpha}}, \quad p(\tau) = \exp\left(\frac{\alpha \tau e^{-\alpha}}{1 - e^{-\alpha}}\right). \quad (2.100в)$$

Средняя концентрация, отвечающая функции кумулятивного времени распределения (разд. 2.4.2):

$$C(\tau) \equiv F(\tau) = \frac{\bar{T}_z}{\bar{T}_m} = \frac{(1 - e^{-\alpha \bar{z}})}{(1 - e^{-\alpha})}. \quad (2.100г)$$

Подставляя сюда $\bar{z}(\tau)$ из (2.100в), получаем выражение для $F(\tau)$ в явном виде:

$$F(\tau) = \frac{1 - p(\tau)}{1 - p(\tau) - e^{-\alpha}}. \quad (2.100д)$$

В асимптотическом случае $\alpha = Am \rightarrow 0$ (однородный пласт)

$$F(\tau) = 1 - \exp(-\tau) \quad (2.100е)$$

— экспоненциальная модель (2.97е).

Применение представленных здесь решений, полученных для неограниченных в плане фильтрационных потоков, в реальных условиях предполагает выполнение предпосылки о слабой «деформации» сетки движения подземных вод, обусловленной влиянием выходной границы потока. Точность решений повышается при физико-математической формулировке задачи, необремененной предпосылкой Дюпюи—Форхгеймера.

2.4.4. Решение профильной фильтрационной задачи в строгой постановке

В основе математической формализации процесса лежит уравнение неразрывности для потока однородной жидкости (2.81), которое теперь будем рассматривать в полной постановке (Rumunin et al., 2019), игнорируя ограничение Дюпюи—Форхгеймера о постоянстве горизонтальных

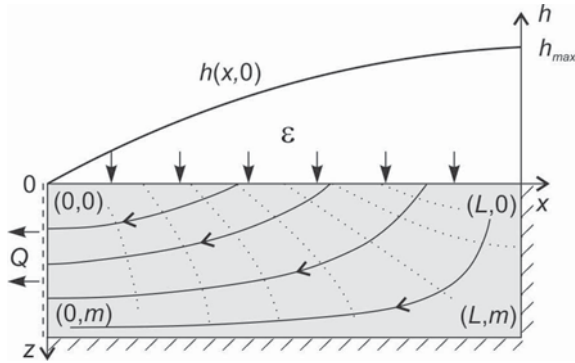


Рис. 2.12. Концептуальная модель ограниченного пласта.

градиентов: $dh(x, z)/dx = dh(x)/dx = \text{const}$. Фильтрацию будем рассматривать в пласте, ограниченном непроницаемой границей справа (водораздел, ГУ II рода) и границей постоянного напора слева (область разгрузки потока — ГУ I рода) (рис. 2.12). Направление оси x , противоположное ранее рассмотренному случаю, причем $x = L$ — расстояние между границами.

Для данной ориентации координатных осей и структуры фильтрационного потока уравнения для компонент скорости фильтрации имеют вид:

$$v_x = -\frac{\partial\varphi}{\partial x} = \frac{\partial\psi}{\partial z}, \quad v_z = -\frac{\partial\varphi}{\partial z} = -\frac{\partial\psi}{\partial x}. \quad (2.101)$$

В данной профильной постановке, по аналогии с плановой фильтрацией (уравнение 2.68б), функция тока $\psi = f(x, z)$ также удовлетворяет уравнению Лапласа, которое принимает вид

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = 0. \quad (2.102)$$

Функция тока на непроницаемых границах (водораздел и подошва горизонта) принимает постоянное значение, заданное для упрощения задачи нулевым:

$$\psi(L, z) = 0, \quad (2.103a)$$

$$\psi(x, m) = 0. \quad (2.103б)$$

На левой границе модели ($x = 0$), где задается постоянный напор, выполняется условие $v_z = -\partial\psi/\partial x = 0$, что позволяет записать:

$$d\psi(0, z)/dx = 0. \quad (2.103в)$$

Наконец, $\psi(x, z)$ изменяется вдоль верхней границы горизонта в ответ на его инфильтрационное питание, следуя закономерности

$$\psi(x, 0) = \psi_0(x) = -\varepsilon x + \text{const.} \quad (2.103\text{г})$$

Основываясь на методе разделения переменных, решение задачи представим в виде произведения двух функций — $X(x)$, зависящей только от x , и функции $Z(z)$, зависящей только от z .

$$\psi(x, z) = X(x)Z(z). \quad (2.104)$$

Тогда

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = Z(z) \frac{d^2 X(x)}{dx^2}, \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = X(x) \frac{d^2 Z(z)}{dz^2}. \quad (2.104\text{а})$$

Подставляя (2.104а) в уравнение Лапласа (2.102), получаем

$$Z(z) \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + X(x) \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} = 0, \quad (2.104\text{б})$$

или

$$\frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2}. \quad (2.104\text{в})$$

Левая часть равенства зависит только от z , а правая — только от x . Это возможно, если обе части равны одной и той же константе:

$$\frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} = \lambda^2, \quad (2.104\text{г})$$

т. е. уравнение (2.104б) распадается на два обыкновенных дифференциальных уравнения, связанных между собой константой λ^2 :

$$\frac{d^2 X}{dx^2} + \lambda^2 X = 0, \quad (2.105\text{а})$$

$$\frac{d^2 Z}{dz^2} - \lambda^2 Z = 0. \quad (2.105\text{б})$$

Общее решение первого уравнения известно (Камке, 2003):

$$X(x) = C' \cos(\lambda x) + D' \sin(\lambda x). \quad (2.106)$$

ГУ (2.103в) на левой границе модели выполняется в том случае, если второй член в правой части (2.106) равен нулю, откуда постоянная $D' = 0$, т. е.

$$X(x) = C' \cos(\lambda x). \quad (2.106\text{а})$$

ГУ (2.103а) на правой границе модельной области ($x = L$) выполняется при $\lambda = \pi/2L$ (когда $\cos(\pi/2) = 0$). Однако косинус является периодической функцией, поэтому решение уравнения также должно иметь периодический характер

$$X_n(x) = C'_n \cos(\lambda_n x), \quad (2.1066)$$

что предполагает

$$\lambda \rightarrow \lambda_n = n\pi/2L, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.107)$$

При четных значениях n ($n > 1$) функция косинуса (2.1066) принимает ненулевые значения (когда $x = L$), поэтому константа C'_n с определенной периодичностью должна принимать нулевые значения (см. далее).

Решение второго обыкновенного дифференциального уравнения (2.105б) при $\lambda = \lambda_n$ имеет вид (Камке, 2003)

$$Z_n(z) = C''_n \exp(\lambda_n z) + D''_n \exp(-\lambda_n z), \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.108)$$

Общее решение задачи является суммой всех частных решений для всех возможных n :

$$\begin{aligned} \psi(x, z) &= \sum_{n=1}^{\infty} X_n(x) Z_n(z) = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \cos\left(\frac{n\pi x}{2L}\right) \left(C_n \exp(\lambda_n z) + D_n \exp(-\lambda_n z) \right). \end{aligned} \quad (2.109)$$

Для нахождения констант C_n и D_n используется условие нулевого значения функции тока на подошве пласта (2.103б) — при $z = m$:

$$C_n \exp(\lambda_n m) + D_n \exp(-\lambda_n m) = 0. \quad (2.110)$$

Из (2.110) следует, что соотношение констант C_n и D_n определяется выражением:

$$C_n = -\frac{e^{-\lambda_n m}}{e^{\lambda_n m}} D_n. \quad (2.111)$$

Значение функции ψ_0 в граничном условии (2.103г) определяет расход инфильтрационного питания, поступающего с верхней границы ($z = 0$) пласта в интервале $L - x$:

$$\psi_0 = \int_x^L \varepsilon dx = \varepsilon L - \varepsilon x. \quad (2.112)$$

Это позволяет переписать решение (2.109) в виде

$$\psi(x, 0) = \psi_0 = \sum_{n=1}^{\infty} \cos\left(\frac{n\pi x}{2L}\right) (C_n + D_n), \quad (2.113)$$

или, с учетом (2.111) и (2.112),

$$-\varepsilon x = -\varepsilon L + \sum_{n=1}^{\infty} \cos\left(\frac{n\pi x}{2L}\right) D_n \left(1 - \frac{e^{-\lambda_n m}}{e^{\lambda_n m}}\right). \quad (2.114)$$

Выражение (2.114) формально отвечает операции разложения произвольной функции $f(x)$ в косинус-ряд Фурье (Воусе, DiPrima, 2012). Такая формализация вытекает из следующей аналогии. Пусть четная функция $f(x)$ задана на интервале $0, b$ и может быть представлена в виде ряда Фурье, содержащего свободный член и косинусы:

$$f(x) = \frac{c_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cos\left(\frac{n\pi x}{b}\right). \quad (2.115)$$

Сопоставляя (2.114) и (2.115), замечаем, что $f(x) = -\varepsilon x$, $b = 2L$, $c_0/2 = -\varepsilon L$. В этом случае коэффициенты ряда c_n определяются известным равенством (Воусе, DiPrima, 2012)

$$c_n = \frac{2}{b} \int_0^b f(x) \cos\left(\frac{n\pi x}{b}\right) dx. \quad (2.116)$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} c_n &= \frac{2}{2L} \int_0^{2L} (-\varepsilon x) \cos\left(\frac{n\pi x}{2L}\right) dx = \\ &= -\frac{4\varepsilon L}{(n\pi)^2} \left(n\pi \sin(n\pi) + \cos(n\pi) - 1 \right) = \frac{4\varepsilon L}{(n\pi)^2} \left(1 - (-1)^n \right). \end{aligned} \quad (2.117)$$

Поскольку

$$c_n = D_n \left(1 - \frac{e^{-\lambda_n m}}{e^{\lambda_n m}}\right) = \frac{4\varepsilon L}{(n\pi)^2} \left(1 - (-1)^n\right), \quad (2.117a)$$

то

$$D_n = \frac{2\varepsilon L e^{\lambda_n m}}{(n\pi)^2 \operatorname{sh}(\lambda_n m)} \left(1 - (-1)^n\right), \quad (2.117б)$$

$$C_n = -\frac{2\varepsilon L e^{-\lambda_n m}}{(n\pi)^2 \operatorname{sh}(\lambda_n m)} \left(1 - (-1)^n\right). \quad (2.117в)$$

Подставляя коэффициенты D_n и C_n в формулу (2.109), получаем окончательное решение задачи, которое можно представить в следующем безразмерном виде:

$$\bar{\psi}(\bar{x}, \bar{z}) = \frac{4}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \cos\left(\frac{n\pi\bar{x}}{2}\right) \frac{\text{sh}[\bar{\lambda}_n(1-\bar{z})]}{n^2 \text{sh}(\bar{\lambda}_n)} \left(1 - (-1)^n\right), \quad (2.118)$$

$n = 1, 2, \dots,$

где $\bar{\psi}(\bar{x}, \bar{z}) = \psi(\bar{x}, \bar{z})/\varepsilon L$, $\bar{x} = x/L$, $\bar{z} = z/m$, $\bar{\lambda}_n = n\pi\bar{m}$, $\bar{m} = m/L$.

В решении (2.118) может быть учтена профильная анизотропия коэффициента фильтрации посредством деформации координатных осей, что достигается при задании константы интегрирования $\bar{\lambda}_n$ в форме

$$\bar{\lambda}_n = \frac{n\pi m}{L} \kappa, \quad \kappa = \sqrt{\frac{k_x}{k_z}}, \quad (2.119)$$

где k_x и k_z — коэффициенты фильтрации понапластованию и вкрест напластования пород (в направлении осей x и z).

Расчеты на основе решения (2.118) для случая изотропного пласта уже были представлены на рис. 2.10. Они показали приемлемость приближенной формулы для расчета траекторий движения частиц воды в области, не слишком приближенной к выходной границе потока. На других графиках (рис. 2.13) показано влияние коэффициента κ на структуру фильтрационного потока, которое вполне ожидаемо. Очевидно, при проявлении анизотропных свойств горизонта ($\kappa > 1$) происходит «фокусирование» потока вблизи его кровли, что препятствует проникновению инфильтрационных вод в глубь горизонта. Следует обратить внимание, что в анизотропном пласте линии тока не перпендикулярны линии равных напоров, — факт достаточно известный в гидродинамике (Bear, 1972).

Формулы, описывающие временные характеристики движения частиц жидкости вдоль фиксированной траектории $\psi(x, z)$, могут быть получены на основе выражений для главных компонент скорости фильтрации (2.101), для которых справедливы известные кинематические равенства

$$v_x = n \frac{dx}{dt}, \quad v_z = n \frac{dz}{dt}. \quad (2.120)$$

Разделяя переменные в (2.120) и интегрируя эти выражения с учетом соотношений (2.101), приходим к следующим уравнениям движения частиц жидкости в фильтрационном потоке:

$$t = n \int_{x_0}^x \frac{1}{\partial\psi/\partial z} dx, \quad t = -n \int_0^z \frac{1}{\partial\psi/\partial x} dz. \quad (2.121)$$

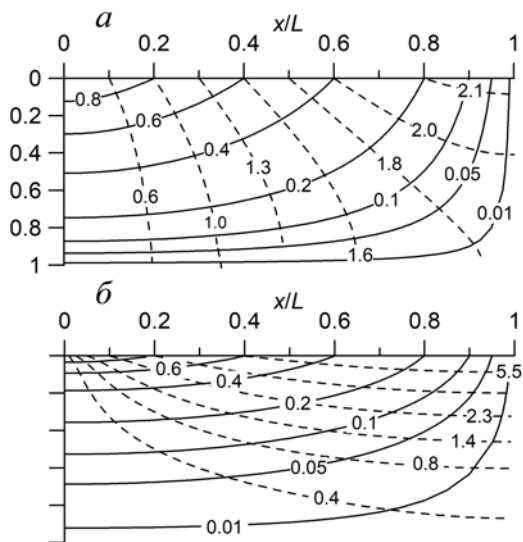


Рис. 2.13. Сетка движения подземных вод в изотропном ($\kappa = 1$) (а) и анизотропном ($\kappa = 5$) (б) горизонтах.

Сплошные линии — линии тока ($\psi(x, z)/L\varepsilon$), штриховые линии — линии равных приведенных напоров ($hk_x/L\varepsilon$); $m/L = 0.5$.

Определим производную функции $\psi(x, z)$ по z для первой формулы (2.121) в виде (безразмерное представление)

$$\frac{d\bar{\psi}(x, z)}{d\bar{z}} = -\frac{4}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \cos\left(\frac{n\pi\bar{x}}{2}\right) \frac{\bar{\lambda}_n \operatorname{ch}[\bar{\lambda}_n(1-\bar{z})]}{n^2 \operatorname{sh}(\bar{\lambda}_n)} (1 - (-1)^n),$$

$$n = 1, 2, \dots \quad (2.122)$$

На ранее приведенном рис. 2.11, а, наряду с приближенным решением (2.97в), представлены графики безразмерного времени

$$\tau = \frac{t}{\bar{T}} = \int_{\bar{x}_0}^0 \frac{1}{\partial\bar{\psi}/\partial\bar{z}} d\bar{x} \quad (2.123)$$

для случая изотропного ($\kappa = 1$) и анизотропного ($\kappa > 1$) горизонтов; $\bar{T} = mn/\varepsilon$ (среднее время). Как видно, в случае изотропного горизонта графики функций $\tau(\bar{\psi})$, рассчитанные по приближенному (2.97в) и точному (2.123) решениям достаточно близки. Проявление анизотропных свойств горизонта может приводить к существенному отклонению времени нахождения частиц воды в пласте, по сравнению со случаем $\kappa = 1$.

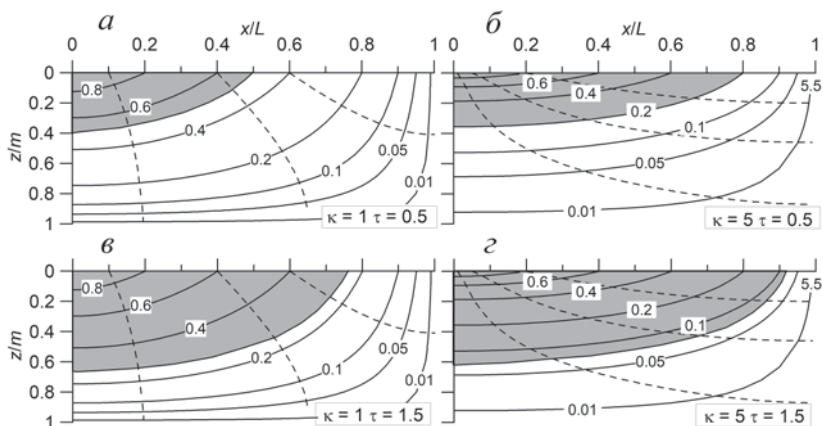


Рис. 2.14. Конфигурация области потока (закрашена серым цветом), характеризующаяся траекториями частиц, время пребывания которых в пласте (при достижении сечения $x = 0$) больше или равно τ .

$a, б$ — $\tau = 0.5$; $в, г$ — $\tau = 1.5$ ($a, в$ — изотропный пласт $\kappa = 1$; $б, г$ — анизотропный пласт $\kappa = 5$). Числа на линиях тока — значения функции тока $\bar{\psi}_0 = \psi_0 / \varepsilon L$; $m/L = 0.5$.

Решение (2.123) может рассматриваться как трансцендентная формула для нахождения характеристики $\bar{\psi}_0 = 1 - \bar{x}_0$ при заданном безразмерном времени τ . Поскольку ψ_0 отвечает доле расхода фильтрационного потока $Q(\tau)$, характеризующейся временем τ ,

$$Q(\tau) = Q_{tot} - \psi_0(\tau), \quad (2.123a)$$

то при постоянной концентрации загрязняющего компонента в инфильтрационных водах C_R мы сразу получаем решение задачи относительно концентрационной функции

$$\bar{C} = (C - C^0) / (C_R - C^0) = 1 - \psi_0(\tau) / Q_{tot}, \quad (2.123б)$$

где $Q_{tot} = \varepsilon L$. Здесь \bar{C} — средняя концентрация в выходном сечении пласта $x = 0$. График функции $\bar{C}(\tau)$ представлен на рис. 2.11, б. Как видно на рис. 2.11, б, рост коэффициента анизотропии ведет к увеличению скорости изменения концентрации $\bar{C}(\tau)$, так что значения \bar{C} в любой расчетный момент времени тем выше, чем выше показатель κ .

Такое поведение функции \bar{C} находит качественное объяснение на рис. 2.14; на нем серым цветом закрашена область, характеризующая траектории частиц, время пребывания которых в пласте (в сечении $x = 0$) больше или равно τ . Эта область соответствует размеру зоны захвата ($z = 0$), характеризующей массовый поток загрязненной жидкости, которая поступает в пласт $q_R = C_R R x_0(\tau) = C_R R [1 - \psi_0(\tau)]$ (и, следовательно, разгружающейся в выходном сечении) в любой момент τ . Очевидно, массовый поток q_R при фильтрации в анизотропной среде всегда превышает поток q_R , сформированный при фильтрации в изотропной среде.

2.5. Сорбция и деструкция (распад)

В качестве «стандартных», наиболее значимых при прогнозировании загрязнения подземных вод физико-химических реакций/преобразований, дополняющих конвекцию и дисперсию, обычно рассматривают равновесные сорбционные процессы и необратимую кинетическую реакцию первого порядка, с которой ассоциируется деструкция (распад) вещества. Эти реакции могут быть учтены в той или иной форме представления функции источника W_m (2.9а). Для начала, однако, разумно рассмотреть эти реакции (процессы) по отдельности в статических условиях.

2.5.1. Линейная сорбция

Формально, по внешнему проявлению, сорбция — это концентрирование вещества из раствора на поверхности минеральных агрегатов. В более широком смысле под сорбционным типом взаимодействия в системе раствор—горная порода обычно понимается несколько типов межфазовых физико-химических реакций: собственно физическая сорбция (адсорбция), ионный обмен, поверхностное комплексообразование. Каждая из этих реакций может оказаться доминирующей для того или иного химического компонента в конкретной обстановке, но реакции могут протекать и одновременно. Поэтому строгое описание сорбции предполагает определение термодинамических констант, контролирующих вклад физико-химических реакций в равновесное состояние системы. В этом случае появляется возможность учесть реакции в явном виде в моделях многокомпонентного переноса (разд. 4.5). На практике, однако, чаще всего пользуются эффективными коэффициентами сорбционного распределения или изотермическими зависимостями, в обобщенном виде отражающими суммарный эффект нескольких реакций. Здесь основное внимание уделяется второму — эффективному — подходу, допускающему использование «квазиоднокомпонентных» моделей переноса.

При длительном взаимодействии в статических условиях зависимость между концентрацией компонента на твердой фазе N (в единице объема породы $[ML^{-1}]$) и в растворе C (в единице объема раствора $[ML^{-1}]$) для данной температуры определяет вид изотермы сорбции

$$N = f(C), \quad (2.124)$$

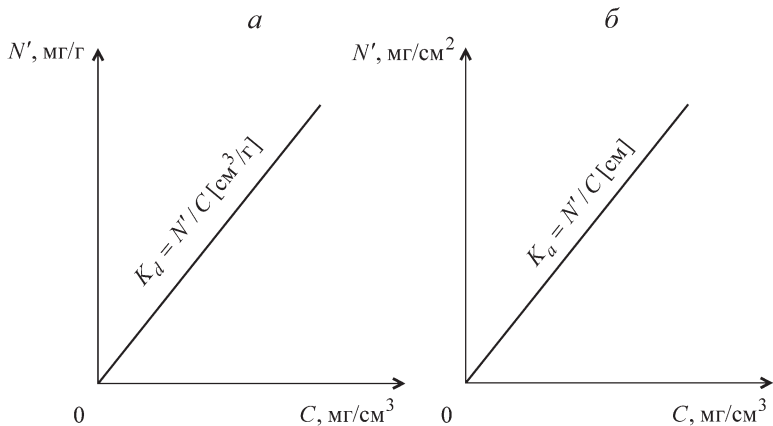


Рис. 2.15. Линейная изотерма сорбции.
 а — пористая среда, б — трещиноватая среда.

эмпирические коэффициенты которой характеризуют энергию взаимодействия сорбируемых компонентов с минеральным веществом.

В частном случае линейной изотермы сорбции Генри, имеющей место в пористой среде (рис. 2.15, а)

$$N = N' \rho_b = K_d \rho_b C, \quad (2.125a)$$

где N' — весовое количество вещества, сорбированное единицей массы породы $[\text{ММ}^{-1}]$, K_d — коэффициент сорбционного распределения $[\text{L}^3\text{М}^{-1}]$, ρ_b — объемная плотность сухой породы $[\text{ML}^{-3}]$.

В трещиноватых средах с упорядоченной сеткой трещин, равномерно омываемых фильтрующейся жидкостью (рис. 2.15, б),

$$N = K_a S_b C, \quad (2.125б)$$

где K_a — коэффициент поверхностной сорбции на трещинах $[\text{L}]$, S_b — удельная поверхность трещин (блоков) $[\text{L}^{-1}]$. На самом деле, в природной трещиноватой среде площадь контакта раствора с поверхностью трещин является динамической характеристикой, зависящей от степени «фокусирования» потока в проводящих каналах (см. далее разд. 3.3.2). Параметр распределения K_a отвечает увеличению количества вещества на поверхности блоков (г/см^2) с ростом его концентрации в растворе (г/см^3) . Реально в константе K_a находит частичное отражение сорбция в

пределах глинистых и гидроокисных «налетов» — продуктов выветривания скальных пород, покрывающих поверхность трещин (Vandergraaf, Abry, 1982).

Сорбция *гидрофобных* загрязняющих соединений контролируется в значительной степени, присутствием в породе (почвах) органического вещества, которое проявляет большую адсорбционную способность к этому классу соединений, нежели смоченная поверхность минеральных зерен породы (разд. 13.5.2).

В исходной модели массопереноса (2.9а) сорбция может ассоциироваться с функцией источника-стока, описывающего изменение функции N во времени:

$$W_m^s = \frac{dN}{dt}. \quad (2.126)$$

Для равновесной сорбции, предполагающей мгновенное установление термодинамического равновесия, используя «цепное правило» для (2.125а) и (2.125б), получаем:

$$\frac{dN}{dt} = \frac{dN}{dC} \frac{\partial C}{\partial t} = \begin{cases} K_d \rho_b \frac{\partial C}{\partial t} & \text{— пористые породы,} \\ K_a S_b \frac{\partial C}{\partial t} & \text{— трещиноватые породы.} \end{cases} \quad (2.127)$$

Уравнение (2.9а) трансформируется к виду:

$$nR \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) = 0, \quad (2.128)$$

где R — фактор сорбционной задержки, численные значения которого указывают, во сколько раз сорбируемое вещество переносится медленнее, чем инертные (химически пассивные) компоненты (частицы воды):

$$R = \begin{cases} 1 + K_d \rho_b / n & \text{— пористые породы,} \\ 1 + K_a S_b / n & \text{— трещиноватые породы.} \end{cases} \quad (2.129)$$

Как видно, сохраняется формальное подобие сорбционной модели (2.128) миграции инертного компонента (2.9), в которой, однако, необходимо пористость (трещиноватость) помножить на фактор сорбционной задержки. Поэтому для учета линейной сорбции могут использоваться все приведенные выше решения с учетом данной поправки:

$$n \rightarrow nR.$$

Нелинейные изотермы сорбции и их влияние на формирование концентрационных фронтов будут рассмотрены позже (см. гл. 4). Там же будут проанализированы и некоторые другие физико-химические реакции, способствующие трансформации химического состава подземных вод на участках их техногенного загрязнения.

2.5.2. Деструкция (распад)

Этот класс реакций включает различные физико-химические и микробиологические превращения, выражающиеся в постепенном распаде (разложении) неустойчивых водорастворенных компонентов мигрирующих растворов. Они могут протекать самопроизвольно (например, радиоактивный распад) или обуславливаться воздействием внешних факторов (например, окисление, гидролиз, биологическое разложение).

2.5.2.1. Математическая формализация

Достаточно общий подход к физико-математическому описанию деструкции базируется на использовании уравнений формальной кинетики для необратимого процесса. Логично предположить, что распад вещества контролируется одним и тем же параметром (константой) как в жидкой фазе, так и в адсорбированном состоянии:

$$W_m^\lambda = \lambda(nC + N). \quad (2.130)$$

Уравнение (2.130) устанавливает линейную связь между интенсивностью распада (W_m^λ) и остаточной концентрацией вещества (C) в системе раствор-порода; здесь λ — константа распада (деструкции) [T^{-1}]. Выражение для функции-источника в общем уравнении конвективного переноса (2.9а) сорбируемого нестабильного компонента принимает вид:

$$W_m = W_m^s + W_m^\lambda = \frac{dN}{dt} + \lambda(nC + N), \quad (2.131)$$

а само уравнение (2.9а) трансформируется к виду

$$nR \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) = -\lambda nR C. \quad (2.132)$$

Численные значения λ в зависимости от характера процесса могут варьировать в весьма широком диапазоне (см. 2.5.2.3).

Пример. Рассмотрим, как влияет деструкция сорбируемого вещества на одномерную миграцию в пласте, фильтрационный поток в котором формируется при участии инфильтрационных вод (см. разд. 2.3.1, рис. 2.3). В этом случае в общем уравнении (2.9а) мы должны положить:

$$W_m = W_m^s + W_m^\lambda + W_m^\varepsilon = \frac{dN}{dt} + \lambda(nC + N) - \frac{\varepsilon}{m} C_R; \quad (2.133a)$$

$$v_x = v_0 + \frac{\varepsilon}{m} x, \quad (2.133б)$$

где ε — инфильтрационное питание [LT^{-1}]; m — мощность пласта [L]; v_0 — скорость фильтрации на границе области [LT^{-1}] (см. рис. 2.3).

Тогда уравнение (2.9а), в котором функция-источник W_m (2.133а) при производной dN/dt , определяемой в случае равновесной сорбции из (2.127), трансформируется к виду:

$$nR \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(v_0 + \frac{\varepsilon}{m} x \right) C \right] + \lambda nR C - \frac{\varepsilon}{m} C_R = 0, \quad (2.134)$$

или

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \left(\frac{v_0}{nR} + \frac{\varepsilon}{mnR} x \right) \frac{\partial C}{\partial x} + \left(\frac{\varepsilon}{mnR} + \lambda \right) C - \frac{\varepsilon}{mnR} C_R = 0. \quad (2.134a)$$

Преобразования уравнения (2.134а), подобные описанным в разд. 2.3.1, дают

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial t_0} + (\varepsilon^* + \lambda) C - \varepsilon^* C_R = 0, \quad (2.135)$$

где время миграции t_0 фронта жидкости, поступающей в пласт с концентрацией C_0 на границе (рис. 2.3), до расчетной точки x :

$$t_0 = \int_0^x \frac{ndx}{v_x} = \frac{1}{\varepsilon^*} \ln \left(1 + \frac{\varepsilon^*}{u_0} x \right), \quad u_0 = \frac{v_0}{nR}, \quad \varepsilon^* = \frac{\varepsilon}{mnR}. \quad (2.135a)$$

При выделении двух характерных режимов миграции (разд. 2.3.1) уравнение (2.135) может быть сведено к двум частным обыкновенным дифференциальным уравнениям:

$$\frac{dC}{dt} + (\varepsilon^* + \lambda) C = \varepsilon^* C_R \quad \text{при } t < t_0, \quad (2.136a)$$

$$\frac{dC}{dt_0} + (\varepsilon^* + \lambda) C = \varepsilon^* C_R \quad \text{при } t \geq t_0. \quad (2.136б)$$

Уравнения (2.136) относятся к типу обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка относительно концентрации и ее производной. Для придания уравнениям (2.136) более привычного вида перепишем их в обобщенной форме

$$y' + ay = b, \quad (2.137)$$

где $y \equiv C(\xi)$, $\xi \equiv t$ при $t < t_0$ и $\xi \equiv t_0$ при $t \geq t_0$; $a = (\varepsilon^* + \lambda)$, $b = \varepsilon^* C_R$.

Существует несколько способов решения уравнения (2.137). Воспользуемся одним из них. Посредством замены y произведением двух вспомогательных функций (u и v) $y = uv$ уравнение (2.137) сводится к виду

$$u'v + u(v' + av) = b. \quad (2.137a)$$

Так как одну из вспомогательных функций u или v можно взять произвольно, то выберем в качестве v какой-либо частный интеграл уравнения $v' + av = 0$. Тогда для отыскания u получим уравнение вида $u'v = b$. Разделяя переменные в первом уравнении, $dv/v = -ad\xi$, и интегрируя, найдем простейший, отличный от нуля, частный интеграл

$$v = e^{-a\xi}. \quad (2.137б)$$

Подставляя v во второе уравнение и решая его, найдем u как общий интеграл этого уравнения

$$u = \int be^{a\xi} d\xi + c \quad (2.137в)$$

(c — константа интегрирования). Окончательно:

$$y = uv = \left(\int be^{a\xi} d\xi + c \right) e^{-a\xi} = ce^{-a\xi} + \frac{b}{a}. \quad (2.137г)$$

Возвращаясь к концентрационной функции, находим

$$C = ce^{-(\varepsilon^* + \lambda)\xi} + \frac{\varepsilon^* C_R}{\varepsilon^* + \lambda}. \quad (2.137д)$$

Константа c находится из краевых условий $C(\xi = t = 0) = C^0$; $C(\xi = t_0 = 0) = C_0$:

$$c = C^0(C_0) - \frac{\varepsilon^* C_R}{\varepsilon^* + \lambda}. \quad (2.137е)$$

Окончательное решение принимает вид:

$$C = \begin{cases} C^0 + \left(\frac{\varepsilon^* C_R}{\varepsilon^* + \lambda} - C^0 \right) (1 - e^{-(\varepsilon^* + \lambda)t}) & \text{при } t < t_0, \\ C_0 + \left(\frac{\varepsilon^* C_R}{\varepsilon^* + \lambda} - C_0 \right) (1 - e^{-(\varepsilon^* + \lambda)t_0}) & \text{при } t \geq t_0. \end{cases} \quad (2.138)$$

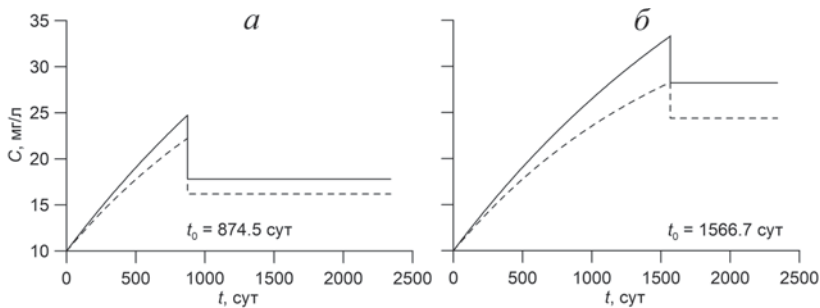


Рис. 2.16. Изменение концентрации нитратов в наблюдательных точках, x : a — $x = 1000$ м, b — $x = 2000$ м. Сплошные линии — $\lambda = 1 \cdot 10^{-4}$ сут $^{-1}$; пунктирные линии — $\lambda = 3 \cdot 10^{-4}$ сут $^{-1}$.

Численный пример. Пусть пласт содержит воду с фоновой концентрацией нитрат-ионов (NO_3^-) $C^0 = 10$ мг/л. Содержание NO_3^- в инфильтрационных водах $C_R = 80$ мг/л. Бассейн, питающий пласт на границе $x = 0$, содержит чистые воды $C_0 = 0$ мг/л. Необходимо построить график изменения содержания NO_3^- в скважинах, находящихся на расстояниях 1000 и 2000 м от бассейна. Параметры, характеризующие пласт, интенсивность инфильтрации, деструкцию нитратов (два варианта), приведены в табл. 2.1.

Таблица 2.1

Исходные данные к численному примеру

v_0 , м/сут	n	m , м	ε , м/сут	ε^* , сут $^{-1}$	λ , сут $^{-1}$	
0.1	0.1	10	$3 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-4}$

По формуле (2.135а) находим характерные времена t_0 для $x = 1000$ м и $x = 2000$ м: 874.5 и 1566.7 сут. Расчеты по формулам (2.138) дают представления о динамике нитратного загрязнения подземных вод в точках расположения наблюдательных скважин (рис. 2.16). Видно, что выделяются два периода — экспоненциального роста содержания NO_3^- и стабилизации значений концентрации после прихода фронта от питающей границы.

Другие полезные решения уравнения (2.134), а также уравнений конвективно-дисперсионного переноса нестабильных компонент, будут рассмотрены позже (см. гл. 15 и 3).

2.5.2.2. Соответствие модели резервуарного типа

Для уравнения (2.135) существует уравнение-аналог

$$\frac{dC}{dt} + \left(\frac{1}{\bar{T}} + \lambda \right) C = \frac{C_R}{\bar{T}}, \quad \bar{T} = mnR/\varepsilon, \quad (2.139)$$

описывающее поведение концентрационной функции в замкнутой гидрогеологической структуре, получающей равномерное инфильтрационное питание. Справедливость такой аналогии была доказана в разд. 2.3.2. Решение уравнения (2.139) при нулевых начальных условиях ($C(0) = 0$) и постоянной входной функции $C_R = \text{const}$ имеет вид, подобный решению одномерного уравнения (2.138):

$$C = \frac{C_R}{1 + \lambda \bar{T}} \left[1 - \exp \left(-\frac{1 + \lambda \bar{T}}{\bar{T}} t \right) \right]. \quad (2.140)$$

Чтобы получить решение для произвольной функции $C_R(t)$, воспользуемся интегралом Дюамеля в форме (2.44а)

$$\begin{aligned} C &= \int_0^t C_R(t - \tau) \left\{ \frac{1}{1 + \lambda \bar{T}} \left[1 - \exp \left(-\frac{1 + \lambda \bar{T}}{\bar{T}} \tau \right) \right] \right\}' d\tau = \\ &= \int_0^t C_R(t - \tau) \frac{1}{\bar{T}} \exp \left(-\frac{\tau}{\bar{T}} \right) \exp(-\lambda \tau) d\tau. \end{aligned} \quad (2.141)$$

Член $\exp(-\tau/\bar{T})/\bar{T}$ в подынтегральном выражении (2.141) является производной уже известной нам функции распределения времени $F(\tau)$ (2.38), поэтому

$$C = \int_0^t C_R(t - \tau) F'(\tau) \exp(-\lambda \tau) d\tau. \quad (2.142)$$

Таким образом, решение для условий миграции компонента, подверженного распаду, получается в форме интеграла-свертки, в котором известное подынтегральное выражение домножается на $\exp(-\lambda \tau)$. Само произведение $F'(\tau) \exp(-\lambda \tau)$ называется переходной функцией.

Пример 1. Рассмотрим условие мгновенного загрязнения водоносного горизонта веществом, плотность осаждения которого на его кровлю горизонта $P = M/F$; размерность, например, $\text{г}/\text{м}^2$, или для радиоактивных компонентов $\text{Бк}/\text{м}^2$. При инфильтрационном характере питания горизонта этому условию отвечает импульсный входной сигнал

$$C_R(t) = \frac{P}{\varepsilon} \delta(t), \quad (2.143)$$

где P — начальная плотность загрязнения поверхности горизонта, например, выраженная в $\text{г}/\text{м}^2$; $\delta(t)$ — дельта-функция Дирака (размерность, обратная времени). В соответствии с обобщенным решением (2.142)

$$\begin{aligned}
 C(t) &= \frac{P}{\varepsilon} \int_0^t \delta(t - \tau) F'(\tau) \exp(-\lambda\tau) d\tau = \\
 &= \frac{P}{\varepsilon \bar{T}} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\tau) \exp[-(t - \tau)/\bar{T}] \exp[-\lambda(t - \tau)] d\tau = \\
 &= \frac{P}{\varepsilon \bar{T}} \left| \exp[-(t - \tau)/\bar{T}] \exp[-\lambda(t - \tau)] \right|_{\tau=0} = \\
 &= \frac{P}{mnR} \exp \left[-\left(\frac{1}{\bar{T}} + \lambda \right) t \right]. \tag{2.144}
 \end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались правилом (2.47а), а также возможностью перехода к бесконечным пределам интегрирования (разд. 2.3.2.2).

Теперь в качестве примера, основываясь на решении (2.144), оценим последствия радиоактивного загрязнения подземных вод при осадении на кровлю водоносного горизонта продуктов деления в составе аэрозольного выброса с аварийного реактора АЭС. В таблице 2.2 даны значения плотности осадения P , характерные для тяжелой запроектной аварии (разд. 18.1.2).

Таблица 2.2

Исходные данные к численному примеру

Изотоп	^{131}I	^{137}Cs	^{90}Sr	^3H
$T_{1/2}$	8.05 сут	30.17 год	28.79 год	12.32 год
λ , сут^{-1}	$8.61 \cdot 10^{-2}$	$6.29 \cdot 10^{-5}$	$6.59 \cdot 10^{-5}$	$1.54 \cdot 10^{-4}$
P , $\text{Бк}/\text{м}^2$	10^6	10^5	10^4	10^4
$K_{d\tau}$, $\text{см}^3/\text{г}$	0	100	5	0
R	1	2001	101	1
$\bar{T} = mnR/\varepsilon$, сут	$3.3 \cdot 10^4$	$6.7 \cdot 10^6$	$3.4 \cdot 10^5$	$3.3 \cdot 10^4$
P/mnR , $\text{Бк}/\text{м}^2$	10^6	$5 \cdot 10^1$	$9.9 \cdot 10^1$	10^4
УВ*, $\text{Бк}/\text{м}^3$	$6.2\text{E} + 03$	$1.1\text{E} + 04$	$4.9\text{E} + 03$	$7.6\text{E} + 06$

Примечание. *НРБ-99/2009, СанПиН 2.6.1.2523-09.

Характеристики водоносного горизонта и инфильтрации следующие: $n = 0.1$, $m = 10$ м, $\rho_b = 2$ $\text{г}/\text{см}^3$, $\varepsilon = 3 \cdot 10^{-4}$ м/сут.

Результаты расчетов (рис. 2.17) свидетельствуют, что уровень загрязнения подземных вод такими радионуклидами, как Cs-137, Sr-90 и H-3, существенно ниже предельно допустимых значений (уровня вмешательства, УВ — табл. 2.2), что обусловлено в значительной степени сорбционными процессами. Удельные активности несорбируемого I-131 в подземных водах в первые дни и месяцы после аварии существенно превышают допустимый предел, и он представляет в это время наибольшую опас-

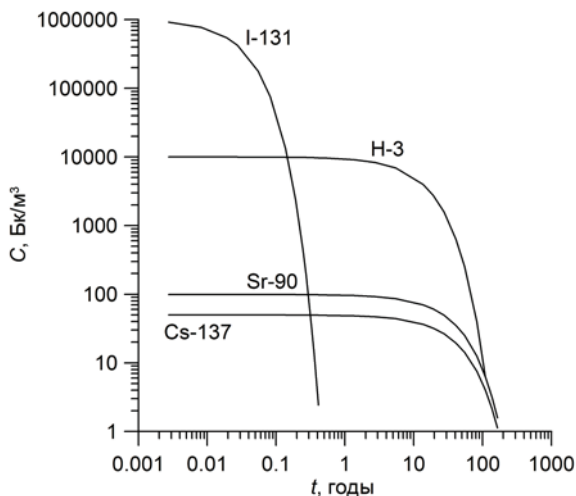


Рис. 2.17. Изменение удельных активностей радионуклидов в подземных водах горизонта, подвергшегося площадному загрязнению.

ность (см. разд. 18.1.1). Однако за счет радиоактивного распада этого радионуклида с относительно малым периодом полураспада качество подземных вод достаточно быстро восстанавливается.

Пример 2. Если функция $C_R(t)$ допускает кусочно-однородное («ступенчатое») представление, так что $C_R^i = C_R^{i-1} + \Delta C_R^{i-1}$ (ΔC_R^{i-1} — приращение граничной концентрации в момент времени t^{i-1} ; $i = 1, 2 \dots$ — номера временных интервалов, в течение которых полагается $C_R = C_R^i = \text{const}$), то соответствующие расчетные зависимости могут быть получены методом суперпозиции рассмотренного выше базового решения (2.140):

$$C^i = \sum_{j=1}^i (C_R^j - C_R^{j-1}) F(t^i - t^{j-1}), \quad (2.145)$$

$$F(t) = \frac{1}{1 + \lambda \bar{T}} \left[1 - \exp\left(-\frac{1 + \lambda \bar{T}}{\bar{T}} t\right) \right] \text{ (нулевые начальные условия).}$$

Пример 3. Он иллюстрирует приложение метода суперпозиции (2.145) для ретроспективного анализа распределения концентрации трития в инфильтрационных водах в многолетнем разрезе времени. Глобальное тритиевое загрязнение воздушной среды связано с испытанием ядерного оружия в период 1945—1980 гг. (США и СССР до 1963 г., Франция и КНР до 1980 г.). По истечении этого периода началось постепенное самоочищение воздушного бассейна от радиоактивных продуктов ядерных взрывов. Характерным является график концентрации трития в атмосферных осадках, построенный по данным наблюдений в Оттаве, Канада (рис. 2.18).

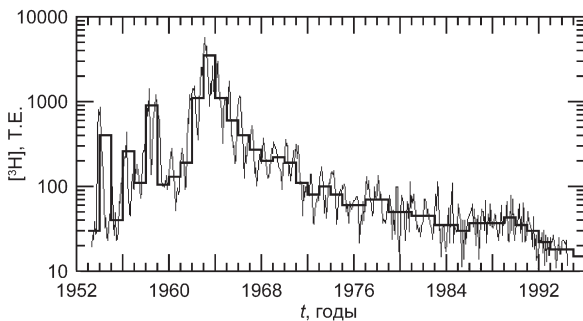


Рис. 2.18. Аппроксимация графика $[^3\text{H}](t)$ ступенчатой функцией. Оттава, Канада (среднемесячные данные).

Современный среднестатистический уровень содержания трития составляет 7—10 Т. Е. (Северное полушарие) и около 2 Т. Е. (Южное полушарие). Данный факт сыграл положительную роль в развитии изотопных методов, направленных на изучение динамики движения подземных вод в гидрогеологических системах, в частности на определение возраста подземных вод.

Рассмотрим аналитическую модель, описывающую распределение трития в водоносном горизонте, считая, что концентрация трития в атмосферных водах может быть аппроксимирована ступенчатой функцией $C_R(t^i) = C_R^i$ (рис. 2.18), где i — номер временного интервала.

Расчеты по (2.145) для диапазона изменения характерного времени $2 < \bar{T} < 1000$ лет дали концентрационные распределения, приведенные на рис. 2.19. Абсолютные значения C рассчитывались при $C^0 = 5$ Т. Е. (естественный фон до 1953 г.); в 1996—2010 гг. — экстраполированные значения. В расчетах использовались значения $T_{1/2} = 12.264$ года и $\lambda = 0.0565$ год $^{-1}$.

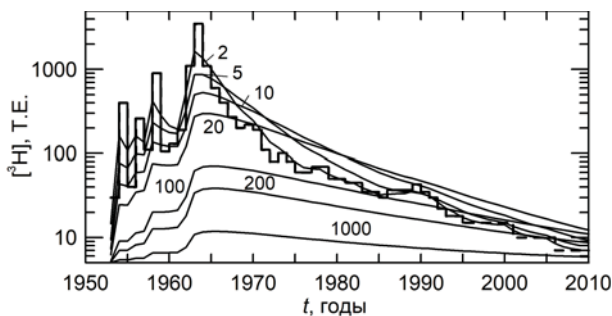


Рис. 2.19. Среднегодовые концентрации трития в атмосферных водах (данные ст. Оттава, Канада — жирная ломаная линия) и кривые отклика при различных значениях параметра \bar{T} , год.

Как видно с теоретических позиций, в первом десятилетии 2000-х гг. концентрация трития в подземных водах должна колебаться в весьма узком диапазоне: от первых единиц до 20—25 Т. Е. В целом анализ графического решения см. (рис. 2.19) свидетельствует о том, что пик чувствительности кривых, приходящийся на 1960—1970-е гг., миновал.

Примечание. Одновременное определение Н-3 и его дочернего продукта Хе-3 (так называемый тритий—гелий-3 метод) существенно повышает надежность датирования подземных вод (Толстихин, Каменский, 1969; Solomon, Sudicky, 1991).

2.5.2.3. Природные процессы деструкции в подземных водах

Радиоактивный распад. Значения λ легко получаются расчетным путем для радиоактивных элементов-изотопов по известным периодам их полураспада $T_{1/2}$:

$$\lambda = 0.693/T_{1/2}. \quad (2.146)$$

Ниже приведены данные, характеризующие распад изотопов, попадающих в сточные растворы атомно-энергетических комплексов или являющихся продуктами деления в составе аэрозольных выбросов при нормальной эксплуатации и авариях на АЭС (разд. 18.1.2).

Изотоп	¹³¹ I	⁶⁰ Co	¹³⁴ Cs	¹³⁷ Cs	⁹⁰ Sr	³ H	¹⁴ C
$T_{1/2}$	8.05 сут	5.27 год	2.06 год	30.17 год	28.79 год	12.32 год	5703 год
λ , сут ⁻¹	$8.61 \cdot 10^{-2}$	$3.6 \cdot 10^{-4}$	$9.22 \cdot 10^{-4}$	$6.29 \cdot 10^{-5}$	$6.59 \cdot 10^{-5}$	$1.54 \cdot 10^{-4}$	$3.33 \cdot 10^{-7}$
УВ*, Бк/л	6.2	40	7.2	11	4.9	7600	240

Примечание. *НРБ-99/2009, СанПиН 2.6.1.2523-09.

Периоды полураспада отдельных тяжелых изотопов, характерных для высокотоксичных промышленных стоков урановых (добывающих и перерабатывающих) производств, измеряются многими тысячами лет. Так, трехступенчатый распад



характеризуется временами $T_{1/2} = 8.88 \cdot 10^7$, $2.80 \cdot 10^7$ и $5.82 \cdot 10^5$ сут соответственно для урана-234, тория-230 и радия-226.

Окислительно-восстановительные реакции. Среди рассматриваемых процессов особое место занимают реакции с участием органического вещества, протекающие при микробиологическом посредничестве в кинетической области:

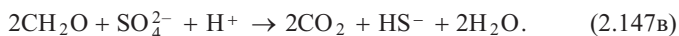
• окисление органического вещества в аэробных условиях по формальной схеме:



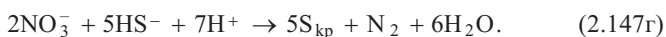
• денитрификация — восстановление в подземных водах нитратов и нитритов в присутствии органического вещества и бактерий-денитрификаторов до элементарного азота:



• сульфатредукция — восстановление в подземных водах сульфатов, протекающее в присутствии органических веществ ($\text{C}_{\text{орг}}$) и сульфатредуцирующих бактерий, когда продуктами реакции является сероводород или ион HS^- :

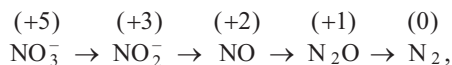


При совместном протекании реакций (2.147б) и (2.147в) возможно восстановление нитратов в присутствии HS^- (или H_2S):



Денитрификация. На этом процессе имеет смысл остановиться подробнее, ибо нитратные соединения являются наиболее распространенными антропогенными загрязнителями подземных вод. Различают два вида денитрификации (Korom et al., 1992): гетеротрофную и автотрофную.

Гетеротрофная денитрификация — процесс, активно протекающий при участии микроорганизмов (бактерий), получающих энергию из водорастворенных органических соединений; последние являются донором электронов. Для завершения окислительно-восстановительных реакций нужен акцептор, которым и может служить в определенных условиях нитрат-ион. Однако в приповерхностных зонах водоносной толщи конкурирующим компонентом является растворенный кислород (O_2), который предпочтительнее используется бактериями в метаболическом цикле. Поэтому в присутствии кислорода содержание нитрат-иона остается высоким, что отмечается в многочисленных публикациях. Как только концентрация растворенного O_2 падает ниже некоторой критической величины (для различных бактерий соответствующая «пороговая» концентрация меняется), микроорганизмы начинают использовать кислородсодержащие азотные соединения (Korom et al., 1992), обеспечивая ступенчатое восстановление азота по схеме:



так что суммарную реакцию окисления органики можно представить в виде (2.147б). Таким образом, в этом случае оказывается, что гетеротрофная реакция денитрификации контролируется диффузионно-дисперсионными и конвективными процессами, обеспечивающими связь различных зон водоносной толщи с зоной аэрации — главным поставщиком растворенного кислорода. Понятно, что вблизи зеркала грунтовых вод содержания нитратов должны быть максимальными.

Автотрофной денитрификацией объясняется термодинамическая нестабильность нитратов в зонах дефицита или отсутствия растворенных органических соединений. В этом случае донорами электронов для некоторых видов бактерий выступают восстановленные формы железа, марганца и серы (такие как Mn^{2+} , Fe^{2+} и HS^-) — см., например, реакцию (2.147г). В этой связи можно отметить, что автотрофная денитрификация активно протекает в водоносных горизонтах с повышенным содержанием сульфидов. Так как глинистые прослои обычно содержат сульфидные минералы в повышенных концентрациях, они также могут служить катализатором реакций денитрификации в геологических толщах.

При изучении загрязнения подземных вод сельскохозяйственными стоками, содержащими азотные соединения, В. Г. Самойленко с соавторами (1987) и Р. М. Забулисом (1988) были получены значения константы денитрификации $\lambda = (1-2.2) \cdot 10^{-4} \text{ сут}^{-1}$.

Органические загрязнители. В работе В. М. Гольдберга и С. Газды (1984) приводятся значения констант деструкции (вызываемой процессами химического, биохимического и фотохимического окисления) целого ряда органических веществ-загрязнителей. По этим данным выделяются три их группы: «биологические мягкие» — $\lambda = 0.3-1.4 \text{ сут}^{-1}$, «промежуточные» — $\lambda = 0.06-0.5 \text{ сут}^{-1}$ и «биологически жесткие» — $\lambda = 0.006-0.05 \text{ сут}^{-1}$.

В последнюю группу попадают, в частности, многие пестициды (Самойленко и др., 1987): DDT — $\lambda = (0.7-1.0) \cdot 10^{-3} \text{ сут}^{-1}$, ГХЦГ и ФОС — $\lambda = (1-2) \cdot 10^{-3} \text{ сут}^{-1}$, сецин — $\lambda = (4-6) \cdot 10^{-3} \text{ сут}^{-1}$.

К низким значениям константы λ привела интерпретация данных полевых экспериментов по изучению природной деградации ряда углеводородов ароматического ряда: бензин (0.007 сут^{-1}), П-ксилен (0.0107 сут^{-1}), нафтаген (0.0064 сут^{-1}) и О-дихлорбензин (0.0046 сут^{-1}).

Глава 3

ДИСПЕРСИЯ ВЕЩЕСТВА В ВОДОНОСНЫХ ГОРИЗОНТАХ

3.1. Базовая дисперсионная модель и параметры, ее определяющие

В классическом естествознании, в частности в физике, существует понятие «стандартная модель», синтезирующая общепризнанные факты и физические явления, сформировавшиеся на определенном этапе развития научного знания. В какой-то степени рассматриваемая в настоящем разделе модель конвективно-дисперсионного типа может быть отнесена к стандартной модели.

3.1.1. Исходные предпосылки

Основные (элементарные) механизмы массопереноса в подземных водах находят обобщение в стандартной дисперсионной модели («фииковского» типа), предназначенной, строго говоря, для описания диффузионно-дисперсионных явлений в водоносных горизонтах, представленных однородными (гомогенными) породами, где влияние масштабных эффектов исключается. В самом общем виде, в декартовой системе координат (x, y, z) , эта модель может быть представлена в форме дифференциального уравнения в частных производных (Bear, Cheng, 2010):

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + W_m + \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) = 0, \quad (3.1)$$

где C — концентрация вещества в единице объема раствора [ML^{-3}]; v_i — скорость фильтрации Дарси, декартовы составляющие которой v_x, v_y и v_z [LT^{-1}]; W_m — объемная интенсивность источников поглощения/выделения вещества [$\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$]; D_{ij} — коэффициент суммарной (эффективной) дисперсии (тензор) [L^2T^{-1}]; n — активная пористость (трещиноватость) [L^3L^{-3}]; $\partial/\partial x_j = \partial/\partial x + \partial/\partial y + \partial/\partial z$ — оператор градиента.

Уравнение (3.1) — уравнение баланса массового потока с учетом объемных источников (стоков) с интенсивностью W_m в единице объема. Произведение $v_i C$ называют плотностью конвективного потока вещества в направлении движения жидкости; его абсолютная величина определяет количество вещества, протекающего в единицу времени через площадку единичной площади, расположенную перпендикулярно к скорости. Уравнение (3.1) описывает перенос нейтрального (химически пассивного) компонента под влиянием конвекции и дисперсии. Исследование миграционного процесса (прогноз или опытное изучение параметров) в конкретной природной обстановке предполагает решение этого уравнения при заданных краевых (начальном и граничных) условиях.

Если массоперенос не влияет на структуру фильтрационного потока, то решение уравнения (3.1) может проводиться независимо от решения задачи фильтрации, в результате которого определяется поле скоростей фильтрации. Такого рода построения, предваряющие решение уравнения (3.1), отталкиваются от решения уравнений фильтрации (гидродинамики), записанных чаще всего в терминах гидравлического напора, h [L], так что

компоненты скорости фильтрации (v_x , v_y и v_z) определяются градиентным законом Дарси (2.1).

В подавляющем большинстве практически значимых ситуаций миграционные процессы развиваются много медленнее в сравнении со скоростью передачи гидродинамических возмущений, поэтому геофильтрацию допустимо рассматривать в стационарной постановке, полагая, что миграция вещества не влияет на поле напоров, т. е. фильтрационный процесс может рассматриваться независимо от массопереноса.

Определение «гомогенные породы» здесь связывается прежде всего: 1) с выполнением предпосылки сплошности среды, 2) с инвариантностью коэффициентов дисперсивности (гл. 3.1.2) относительно масштаба, т. е. с их постоянством в пределах области, на которую распространяется прогноз (эффект рассеяния вещества определяется вариацией поля скоростей на микроуровне), и 3) с допустимостью осреднения проницаемости пород при решении задачи массопереноса (геомиграции), — осреднения, принятого при решении задачи фильтрации (геофильтрации).

Выполнение предпосылки сплошности среды означает, что область переноса, в пределах которой осредняется скорость фильтрации, должна на один-два порядка превосходить размеры элементарных составляющих горной породы (размеры минеральных зерен — пористые среды или породных блоков — трещиноватые среды). Как следствие, при описании миграции в трещиноватых породах модель (3.1) представляет собой *модель эквивалентной пористой среды* (разд. 3.3.1).

Наконец, модель фиковского типа (3.1) может использоваться и для описания переноса в *неоднородных/гетерогенных* (по проницаемости) системах с эффективными (асимптотическими) коэффициентами дисперсивности (макродисперсивности), если размеры области переноса существенно (опять-таки условно на один-два порядка) превосходят характерные масштабы изменчивости корреляционного поля проницаемости (разд. 3.2.2). Доказательство такой возможности (или невозможности) — предмет многочисленных исследований в гидрогеологии фундаментального характера.

3.1.2. Параметры, определяющие диффузионно-дисперсионные явления

Дисперсия вещества зависит в общем случае от скорости фильтрации, а параметр, ее определяющий, складывается из гидродинамической, D_{ij}^d , и молекулярно-диффузионной, D_m , компонент (Bear, 1972; Bear, Cheng, 2010):

$$D_{ij} = D_{ij}^d + D_m \delta_{ij}, \quad (3.2)$$

$$D_{ij}^d = (\delta_L - \delta_T) \frac{v_i v_j}{|\mathbf{v}|} + \delta_T |\mathbf{v}| \delta_{ij}, \quad \delta_{ij} \begin{cases} = 1 & \text{для } i = j, \\ = 0 & \text{для } i \neq j, \end{cases} \quad (3.3)$$

где δ_L и δ_T — продольная и поперечная дисперсивность — коэффициенты, линейно связывающие компоненты гидродинамической дисперсии D_{ij}^d и скорости Дарси (v_i, v_j) [L]; $|\mathbf{v}| = v = (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)^{1/2}$; δ_{ij} — дельта-функция Кронекера [-]; $i, j = 1, 2, 3$.

Например,

$$\begin{aligned} D_{xx}^d &= \frac{(\delta_L - \delta_T) v_x^2 + \delta_T v^2}{v} = \frac{(\delta_L - \delta_T) v_x^2 + \delta_T (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{v} = \\ &= \delta_L \frac{v_x^2}{v} + \delta_T \frac{v_y^2}{v} + \delta_T \frac{v_z^2}{v}. \end{aligned} \quad (3.3a)$$

Аналогично получаем

$$D_{yy}^d = \delta_L \frac{v_y^2}{v} + \delta_T \frac{v_x^2}{v} + \delta_T \frac{v_z^2}{v}, \quad (3.3б)$$

$$D_{zz}^d = \delta_L \frac{v_z^2}{v} + \delta_T \frac{v_x^2}{v} + \delta_T \frac{v_y^2}{v}. \quad (3.3в)$$

В одномерном плановом потоке ($v_y = v_z = 0$):

$$D_{xx} \equiv D_L = \delta_L v_x + D_m, \quad D_{yy} = D_{zz} \equiv D_T = \delta_T v_x + D_m. \quad (3.4)$$

Коэффициент D_m в (3.2) и (3.4) характеризует стационарный диффузионный поток в уравнении Фика. Он может быть назван *эффективным* коэффициентом диффузии. Довольно часто при формализации краевых задач, решаемых в нестационарной постановке, используется коэффициент *поровой* диффузии

$D_p = D_m/n$. В полностью водонасыщенных пористых или трещиновато-пористых (при пористости блоков более 0.1—0.2) осадочных образованиях D_p имеет порядок 10^{-5} м²/сут. Наряду с коэффициентами D_m и D_p для описания миграции сорбируемых компонентов используется *кажущийся* коэффициент диффузии, D_a , $D_a = D_p/R$, где R — фактор сорбционной задержки (см. разд. 2.5.1). Таким образом, связь между тремя коэффициентами определяется соотношением:

$$D_p = RD_a = \frac{D_m}{n}. \quad (3.5)$$

Результаты лабораторных опытов показывают, что коэффициенты диффузии зависят от средних размеров пор и от их пространственного распределения (Лехов, 2010): $D_m = \chi n D^0$, где D^0 — коэффициент диффузии в свободном растворе (воде) [L^2T^{-1}]; χ — коэффициент извилистости пор [L^2L^{-2}], меняющийся чаще всего в диапазоне между 0.01 и 0.5.

При малых скоростях фильтрации конвекция имеет подчиненное значение, а диффузия становится главным механизмом, определяющим перенос вещества в горных породах.

Продольная гидродисперсия. Для относительно однородных по гранулометрическому составу пористых пород константа δ_L изменяется от десятых долей до первых сантиметров, что часто позволяет не учитывать продольную дисперсию на фоне конвекции. В трещиноватых породах в зависимости от характерных размеров породных блоков параметр микродисперсии δ_L изменяется в гораздо более широких пределах — от нескольких десятков сантиметров до десятков метров.

При переходе от локальных к региональным условиям обычно наблюдается резкий рост определяемых значений δ_L , что может быть объяснено неверной физико-математической интерпретацией процесса — недоучетом фильтрационной неоднородности и гетерогенности реальных комплексов горных пород (см. разд. 3.2).

Поперечная гидродисперсия. Рассеяние вкрест направления фильтрационного потока приводит к формированию объемных ореолов загрязнения. Ее константа δ_T обычно в 10—20 раз ниже, чем значение δ_L для тех же пород. В большинстве случаев отмечается сильная анизотропия рассеивающих свойств водоносных толщ в направлениях, ортогональных направлению конвекции: различия в величинах дисперсивностей δ_{Ty} и δ_{Tz} , характеризующих плановую и профильную поперечную гидро-

дисперсию, могут достигать двух и более порядков (обычно $\delta_{Ty} \gg \delta_{Tz}$), что является следствием естественной стратификации геологических сред. Несмотря на относительно малые значения поперечной дисперсивности в сравнении с продольной, роль поперечного дисперсионного рассеяния вещества может со временем оказаться доминирующей, так как по мере увеличения масштаба переноса растет соответственно боковая поверхность ореола загрязнения, через которую осуществляется поперечная дисперсия.

Гидродисперсия в трещиноватых породах и соответственно поведение ореолов рассеяния зависит от плотности трещин, статистического распределения их длины и проницаемости, наличия в массиве пород нескольких систем трещин с различной пространственной ориентацией. Определенное сочетание контролирующих характеристик может оказаться таковым, что описание концентрационных распределений в рамках классических дисперсионных представлений (моделей) будет неудовлетворительным. Отклонение концентрационных распределений от дисперсионного вида часто наблюдается при наличии в массиве пород доминирующих систем трещин большой протяженности (Reeves et al., 2008). Распределение фильтрационных потоков между этими системами и мелкими трещинами имеет весьма сложный характер, слабо влияющий на общий (осредненный) фильтрационный поток, но видоизменяющий характер концентрационных кривых. Отмеченные эффекты стимулируют развитие альтернативных моделей, фильтрации и массопереноса в дискретном трещинном пространстве (см. разд. 3.3.2—3.3.4).

3.1.3. Фактор сорбционной задержки и распад в структуре уравнения массопереноса

Общее выражение для источника/стока W_m , отражающего равновесную сорбцию и кинетику необратимой реакции первого порядка (распад) в базовой дисперсионной модели (3.1) имеет вид:

$$W_m = W_m^s + W_m^\lambda = \frac{dN}{dt} + \lambda (nC + N). \quad (3.6)$$

Уравнение (3.1) трансформируется к виду:

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{dN}{dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) + \lambda (nC + N) = 0. \quad (3.7)$$

Изменение концентрации вещества во времени в адсорбированном состоянии (второй член уравнения 3.1) может быть представлено в терминах концентрации этого вещества в жидкой фазе. Используя «цепное правило», получаем:

$$\frac{dN}{dt} = \frac{dN}{dC} \frac{\partial C}{\partial t} = f' \frac{\partial C}{\partial t}, \quad (3.8)$$

где $f' \equiv df(C)/dC$ — производная от изотермы адсорбции (2.124) по концентрации в точке с равновесным содержанием компонента C .

Таким образом, при линейном характере сорбционного процесса (1.125) уравнение (3.7) преобразуется к виду

$$nR \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) + \lambda nRC = 0, \quad (3.9)$$

где R — фактор сорбционной задержки (1.129).

3.1.4. Некоторые частные решения

Особенности проявления эффектов дисперсионного рассеяния, сорбции и распада в гомогенных средах чаще всего иллюстрируются на примере решений уравнения конвективной дисперсии в одномерном (плоскопараллельном) фильтрационном потоке, которое в общем трехмерном случае имеет вид:

$$nR \frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial x} - D_{xx} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - D_{yy} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - D_{zz} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + \lambda nR = 0. \quad (3.10)$$

$$D_{xx} \equiv D_L = \delta_L v + D_m, \quad D_{yy} \equiv D_{Ty} = \delta_{Ty} v + D_m,$$

$$D_{zz} \equiv D_{Tz} = \delta_{Tz} v + D_m. \quad (3.10a)$$

Рассмотрим несколько частных аналитических решений, являющихся наиболее востребованным в повседневной гидрогеологической практике.

Фундаментальное решение одномерной задачи. Дифференциальное уравнение (3.10) для условий одномерной миграции сорбируемого стабильного компонента ($\lambda = 0$, $D_{yy} = D_{zz} = 0$) в полуограниченном пласте в направлении x с постоянной скоростью v трансформируется к виду:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} - D_{pL} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0. \quad (3.11)$$

Его фундаментальное решение, полученное при постоянных начальном ($C = C^0$) и граничном ($C = C_0$) условиях, хорошо известно (Шестаков, 1995):

$$\bar{C} = \frac{1}{2} [\operatorname{erfc}(\xi) + e^{\operatorname{Pe}} \operatorname{erfc}(\xi')], \quad (3.12)$$

$$\xi = \frac{x - ut/R}{\sqrt{4D_{pL} t/R}}, \quad \xi' = \frac{x + ut/R}{\sqrt{4D_{pL} t/R}}, \quad \operatorname{Pe} = \frac{ux}{D_{pL}}. \quad (3.12a)$$

$\bar{C} = (C - C^0)/(C_0 - C^0)$ — относительная концентрация; $D_{pL} = D_L/n = \delta_L u + D_p$; $D_p = D_m/n$ — коэффициент «поровой» молекулярной диффузии (3.5). Анализ решения (3.12) показывает, что при $\operatorname{Pe} > 50$ результаты расчетов, выполняемые на его основе, практически совпадают с приближенным решением:

$$\bar{C} \approx \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(\xi). \quad (3.13)$$

Решения (3.12) и (3.13) содержат функцию $\operatorname{erfc}(\xi)$ — дополнительный интеграл вероятностей (рис. 3.1), связанный с интегралом вероятностей $\operatorname{erf}(\xi)$ (функцией ошибок) соотношением

$$\operatorname{erfc}(\xi) = 1 - \operatorname{erf}(\xi), \quad \operatorname{erf}(\xi) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\xi} \exp(-\eta^2) d\eta. \quad (3.13a)$$

Приведем основные свойства функции $\operatorname{erfc}(\xi)$, табличные значения которой можно найти в специализированных математических изданиях и гидрогеологической учебной литературе (Шестаков, 1995; Мироненко, 1996):

$$\begin{aligned} \operatorname{erfc}(-\xi) &= 2 - \operatorname{erfc}(\xi), \quad \operatorname{erfc}(0) = 1, \quad \operatorname{erfc}(\infty) = 0, \\ \operatorname{erfc}(-\infty) &= 2. \end{aligned} \quad (3.13b)$$

По сути, кривая на рис. 3.1 характеризует фронт рассеяния вещества $2\bar{C} \approx \operatorname{erfc}(\xi)$ в одномерном фильтрационном потоке. Она симметрична относительно координаты фронта поршневого вытеснения $x^0 = ut/R$ ($\xi = 0$).

Приведем также решение уравнения (3.10), переписанного для случая одномерного массопереноса с учетом распада ($\lambda > 0$):

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} - D_{pL} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \lambda R = 0. \quad (3.14)$$

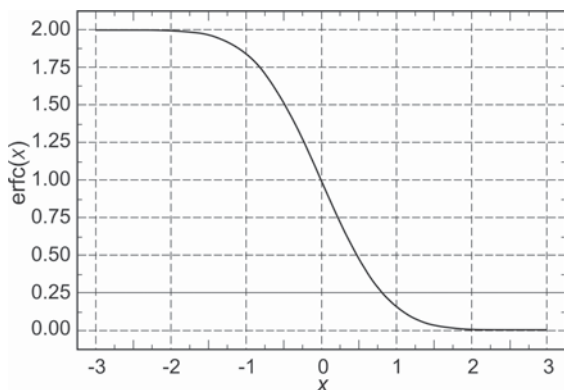


Рис. 3.1. График функции $\text{erfc}(\xi)$ — дополнительный интеграл вероятностей.

Решение имеет вид (van Genuchten, Alves, 1982):

$$C = \frac{C_0}{2} \left\{ \exp \left[\frac{Rx(u - \mu)}{2RD_{pL}} \right] \text{erfc} \left[\frac{Rx - \mu t}{2\sqrt{RD_{pL}t}} \right] + \exp \left[\frac{xR(u + \mu)}{2RD_{pL}} \right] \text{erfc} \left[\frac{Rx + \mu t}{2\sqrt{RD_{pL}t}} \right] \right\}, \quad (3.15)$$

где $\mu = \sqrt{u^2 + 4\lambda RD_{pL}}$. Когда $D_{pL}/ux < 0.002$, вторым членом в решении (3.15), подобно тому как это было сделано при анализе решения (3.12), можно пренебречь.

При $\lambda = 0$ решение задачи вырождается в формулу (3.12). При $\lambda RD_{pL}/u^2 < 0.05$ влиянием дисперсии можно пренебречь, что позволяет в расчетах использовать упрощенные зависимости, которые будут проанализированы в разд. 15.1, посвященном миграции нестабильных радионуклидов. При $t \rightarrow \infty$ решение (3.15) имеет стационарную асимптотику:

$$\bar{C} = \exp \left[\frac{Rx(u - \mu)}{2RD_{pL}} \right]. \quad (3.16)$$

Приближенные решения задачи пространственной микродисперсии. Поиск точных аналитических решений уравнения (3.10) был предметом многочисленных исследований, с ко-

торами можно ознакомиться в ряде публикаций (см., например: Румынин, 2011). Основные решения данной задачи подразделяются в зависимости от геометрической формы источника вещества, характера входного концентрационного сигнала, а также геометрии области фильтрации (потoki в неограниченных и ограниченных естественными геологическими границами областях). Существует множество приближенных и асимптотических решений краевых задач пространственной (2D и 3D) микродисперсии, в том числе стационарных асимптотик, которые полезны при оценках размеров зоны максимального охвата загрязнением объема пористой среды (Румынин, 2011).

В качестве примера приведем так называемое приближенное решение Доменико (Domenico, Robbins, 1985) для плоского концентрационного источника, который имеет форму прямоугольника (со сторонами Y и Z), ориентированного своей плоскостью ортогонально направлению фильтрационного потока в неограниченном по мощности и простирающемся пласте ($\lambda = 0$). Это решение представляет собой произведение трех частных решений (f_{ξ}):

$$\bar{C}(x, y, z, t) \approx f_x(x, t) \times f_y(y, x) \times f_z(z, x); \quad (3.17)$$

первое,

$$f_x(x, t) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - ut/R}{2\sqrt{D_{pxx}t/R}} \right), \quad (3.17a)$$

— одномерное решение нестационарной задачи массопереноса в направлении потока (3.13); второе и третье,

$$f_y(y, x) = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left(\frac{y - Y/2}{2\sqrt{D_{pyy}x/u}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{y + Y/2}{2\sqrt{D_{pyy}x/u}} \right) \right\}, \quad (3.17б)$$

$$f_z(z, x) = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left(\frac{z - Z/2}{2\sqrt{D_{pzz}x/u}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{z + Z/2}{2\sqrt{D_{pzz}x/u}} \right) \right\}, \quad (3.17в)$$

— решения «плоских» 2D стационарных задач дисперсии (в направлении координатных осей y и z) от линейных источников; здесь

$$D_{pxx} = \delta_L u + D_p, \quad D_{pyy} = \delta_{Ty} u + D_p, \quad D_{pzz} = \delta_{Tz} u + D_p. \quad (3.17г)$$

Решение (3.17), объединяющее, по сути дела, одномерные решения на случай трехмерной дисперсии, не имеет строгого математического обоснования (Guyonnet, Neville, 2004; West et al., 2007). Только при весьма низких значениях продольной дисперсивности (теоретически при

$D_{p_{xx}} \rightarrow 0$) происходит сближение точного и приближенного решений. Расчеты по формуле (3.17) могут давать довольно существенные отклонения (до десятков процентов — в сторону занижения истинных значений концентрации) от точного решения соответствующей задачи в областях доминирования дисперсионных процессов, т. е. на периферии ореола загрязнения. Описание концентрационного поля вблизи центральной линии ореола, где преобладает конвекция, не исключает использование приближенного решения (3.17) в практических целях.

Стационарная асимптотика решения (3.17) для центральной ($y, z = 0$) оси ореола:

$$\begin{aligned} \bar{C}(x, 0, 0, \infty) = \exp \left[\frac{ux}{2D_{p_{xx}}} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda RD_{p_{xx}}}{u^2}} \right) \right] \times \\ \times \operatorname{erf} \left(\frac{Y}{4\sqrt{D_{p_{yy}} x/u}} \right) \operatorname{erf} \left(\frac{Z}{4\sqrt{D_{p_{zz}} x/u}} \right), \end{aligned} \quad (3.18)$$

где $\operatorname{erf}(\xi)$ — функция ошибок (3.13а).

Рассматриваемый подход был впоследствии распространен на случай миграции неустойчивого (распадающегося) компонента (Domenico, 1987):

$$\begin{aligned} f_x(x, t) = \frac{1}{2} \exp \left[\frac{ux}{2D_{p_{xx}}} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda RD_{p_{xx}}}{u^2}} \right) \right] \times \\ \times \operatorname{erfc} \left(\frac{x - (ut/R) \sqrt{1 + 4\lambda RD_{p_{xx}}/u^2}}{2\sqrt{D_{p_{xx}} t/R}} \right), \end{aligned} \quad (3.19)$$

где λ — константа распада.

3.2. Макродисперсия в гетерогенных породах и масштабные эффекты

Для большинства комплексов пористых пород характерно наличие пропластков, линз и других включений с различной геометрией и проницаемостью. В толщах трещиноватых пород всегда присутствуют зоны неоднородности по характеру и степени трещиноватости, случайным образом распространенных по площади и в разрезе. Дисперсия вещества в таких системах определяется пространственной изменчивостью поля проницаемости (коэффициента фильтрации), контролирующей флуктуации действительной скорости фильтрации.

3.2.1. О масштабах макродисперсии

О макродисперсии в водоносных системах неупорядоченного строения можно судить по приведенным в ряде работ результатам оценки в полевых условиях дисперсивности δ_L^* — показателя продольного рассеяния (эффективный гетерогенный аналог микродисперсивности δ_L в однородных породах). Обработка экспериментальных данных проводилась в рамках фиковой модели с постоянным коэффициентом продольной дисперсии (3.1).

Так, с обстоятельным анализом соответствующей полевой информации можно ознакомиться в работах Л. В. Гелхара (Gel-

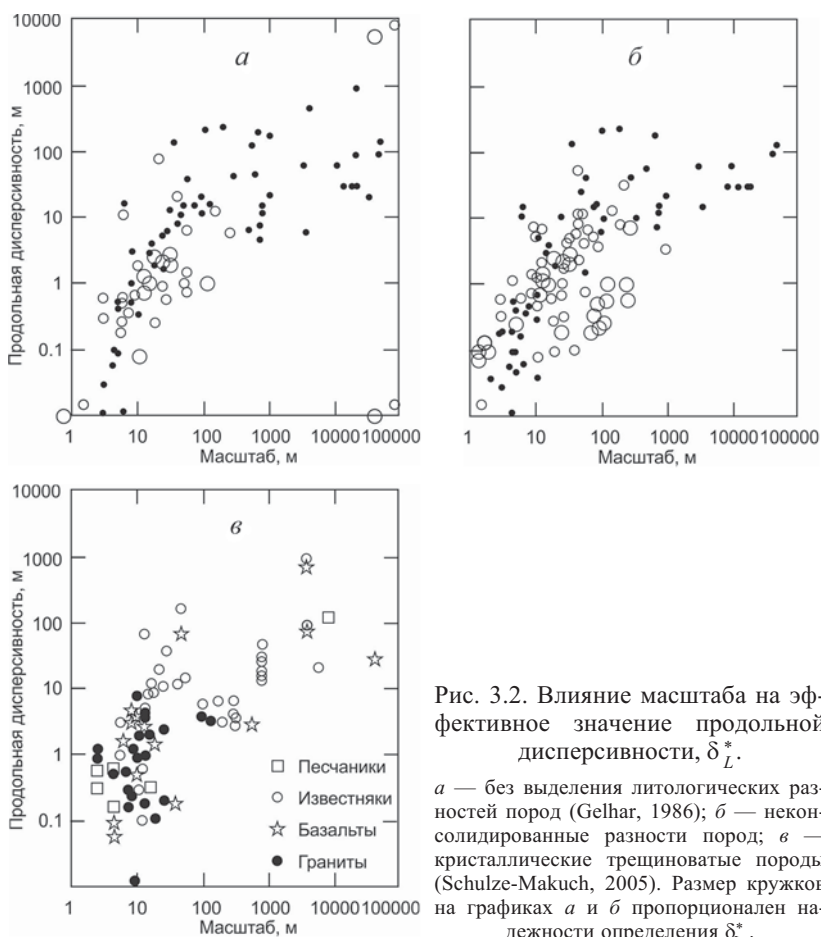


Рис. 3.2. Влияние масштаба на эффективное значение продольной дисперсивности, δ_L^* .

a — без выделения литологических различий пород (Gelhar, 1986); *б* — неконсолидированные различия пород; *в* — кристаллические трещиноватые породы (Schulze-Makuch, 2005). Размер кружков на графиках *a* и *б* пропорционален надежности определения δ_L^* .

har, 1986) и Д. Шульца-Макуша (Schulze-Makuch, 2005), где представлены графики $\delta_L^* = f(L)$ (рис. 3.2). Оба автора пришли к выводу о росте коэффициента с увеличением масштаба области (L), в пределах которой формируется массовый поток от того или иного источника концентрационного возмущения. По данным локальных трассерных (индикаторных) экспериментов, значения параметра δ_L^* составляют десятки сантиметров и первые метры, а значения, рассчитанные по результатам обработки опытно-эксплуатационных наблюдений, могут достигать сотен метров (рис. 3.2).

В работе Д. Шульца-Макуша (Schulze-Makuch, 2005) делается вывод о степенной зависимости макродисперсивности от масштаба L :

$$\delta_L^* = c(L)^m, \quad (3.20)$$

где c — линейный множитель, определяемый типом геологической среды; n — показатель степени, который изменяется в диапазоне от 0.4 до 0.94, среднестатистическое значение 0.5.

Аналогично возрастают и расчетные значения показателей поперечной дисперсивности δ_T^* . В целом полученные данные свидетельствуют о существенном различии между масштабами микро- и макродисперсии.

Таким образом, возможности описания процессов переноса на основе традиционной (статистически усредненной) фиковской модели с постоянной дисперсивностью ограничены. Это обусловило повышенный интерес к анализу миграции в неупорядоченно неоднородных комплексах в рамках стохастического подхода (Gelhar, 1986; 1993; Rubin, 2003).

3.2.2. Стохастические модели макродисперсии

Такого рода модели используются для анализа массопереноса как в пористых, так и в трещиноватых коллекторах, для которых характерно наличие гидравлически взаимосвязанных зон с различной геометрией и проницаемостью. Они получили название от применяемых для описания изменчивости фильтрационных свойств пород стохастических процедур (методов, подходов), элементы которых используются также для решения и анализа соответствующих краевых задач массопереноса. При этом изменчивость физических свойств пород (проницаемость, сорбционная способность и др.), определяющая их гетерогенность и неоднородность, не является полностью случайной, но при-

нимается зависящей от проявления корреляционной структуры любого из исследуемых массивов. Коррелируемость параметров определяется самой природой осадконакопления при формировании отложений и их последующего литогенеза. Пространственная корреляционная структура пород описывается с использованием случайных пространственных функций, которые представляют собой вероятностные распределения или статистические моменты.

Наибольший интерес с позиций описания масштабных эффектов при массопереносе представляет анализ пространственной изменчивости поля проницаемости (коэффициента фильтрации), контролирующей флуктуации действительной скорости фильтрации и, как следствие, дисперсию вещества. При изучении миграции сорбируемых компонентов важны представления о пространственной изменчивости сорбционных свойств среды, которые также определяют неоднородность поля скоростей массопереноса. Пространственными вариациями других миграционных параметров в подавляющем большинстве случаев пренебрегается.

3.2.2.1. Описание случайного (корреляционного) поля проницаемости

Геостатистическое описание гидрогеологических систем традиционно основывается на следующих трех ключевых положениях.

1. Поле коэффициента фильтрации породы k обычно моделируется как нормально распределенная случайная функция $Y = \ln k$, т. е. $\ln k$ имеет нормальное распределение, для которого функция плотности распределения (pdf) дается выражением:

$$f_k(k) = \frac{1}{k\sqrt{2\pi\sigma_Y^2}} \exp\left[-\frac{(\ln k - \mu_Y)^2}{2\sigma_Y^2}\right]. \quad (3.21)$$

2. Параметры μ_Y и σ_Y^2 , входящие в выражение для функции распределения (3.21), — среднее значение (математическое ожидание) и дисперсия $\ln k$. Они являются достаточными для описания некоррелируемого статистически гомогенного поля распределения Y .

3. Корреляционная структура массива пород, включающая тренды и повторяемость Y , может быть описана автокорреляци-

онной функцией, которая характеризует коррелируемое поле распределения Y .

Если значения функции Y_i установлены в n точках, то среднее значение и дисперсия определяются выражениями

$$\mu_Y = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i, \quad (3.22)$$

$$\sigma_Y^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - \mu_Y)^2. \quad (3.23)$$

Очевидно, поскольку σ_Y^2 характеризует флуктуации около среднего, то соответствующее значение может рассматриваться как мера степени гетерогенности горизонта: чем больше σ_Y^2 , тем выше пространственные вариации коэффициента фильтрации. С другой стороны, если значения Y определены в ограниченном количестве точек, то среднее значение μ_Y и дисперсия σ_Y^2 (либо σ_Y — среднее квадратическое или стандартное отклонение) могут быть использованы для предсказания вероятных значений Y в точках, где измерения Y не были сделаны. Отношение σ_Y/μ_Y получило название коэффициента вариации, который также используется для оценки степени изменчивости параметров.

Сами по себе значения μ_Y и σ_Y^2 не несут информации о структуре корреляционного случайного поля проницаемости.

Для выявления корреляционной структуры массива может быть использовано несколько расчетных приемов. Простейшим, и в то же время весьма наглядным из них является построение графиков рассеяния, что предполагает нанесение значений исследуемой функции на график в координатах $\ln k(x+h) - \ln k(x)$ (одномерное поле), где h — фиксированное расстояние, называемое часто «разделительным лагом». Если точки на графике с малым разделительным лагом лежат вблизи линии 1:1, а при возрастании h разброс резко возрастает, то можно говорить о существовании некоторой корреляционной структуры массива. Концептуально процедура определения корреляций в точках с различным разделительным лагом показана на рис. 3.3.

Пример. Рассмотрим профиль $\ln k(x)$ на рис. 3.4 (Engesgaard, 2003), на котором точки определения коэффициента k равномерно (с дискретностью 0.5 м) распределены по оси x ($0 \leq x \leq 50$ м). Построим графики рассеяния $\ln k(x+h) - \ln k(x)$ с последовательно нарастающим лагом h ($h = 0.5$ м, $h = 1$ м, $h = 2$ м, $h = 5$ м), воспользовавшись алгоритмом на рис. 3.3.

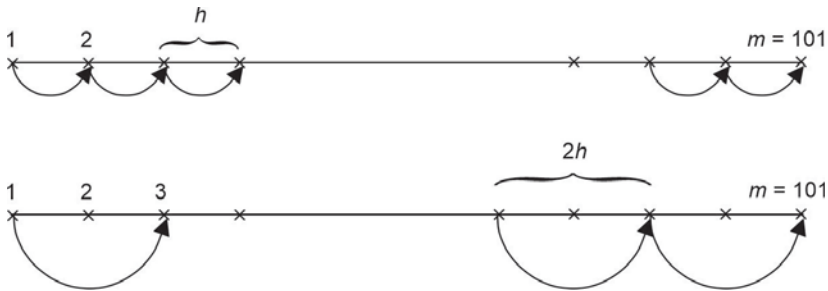


Рис. 3.3. Схема, иллюстрирующая алгоритм удвоения разделительного лага.

m — общее количество точек опробования (для модельного примера на рис. 3.4).

Если бы данные полностью коррелировали, то все точки легли бы на диагональ 1:1. Как видно на рис. 3.5, увеличение лага способствует росту разброса на графике рассеяния, что говорит, как отмечалось выше, о наличии корреляционной структуры поля коэффициента фильтрации.

Для количественного описания корреляции можно использовать ковариационную функцию, которая на практике рассчитывается по формуле (Deutsch, Journel, 1992):

$$\text{cov}_Y(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_{x+h} - \mu_Y)(Y_x - \mu_Y). \quad (3.24)$$

Строго говоря, x является вектором (\mathbf{x}), поэтому для h также должно использоваться векторное обозначение (\mathbf{h}), так что

$$\text{cov}_Y(\mathbf{h}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\mathbf{Y}_{x+h} - \mu_Y)(\mathbf{Y}_x - \mu_Y). \quad (3.25)$$

Для упрощения записи, однако, имея в виду сказанное, сохраним далее упрощенную форму математических зависимостей.

Значения ковариационной функции уменьшаются с увеличением h (разделительный лаг в общем в векторном представле-

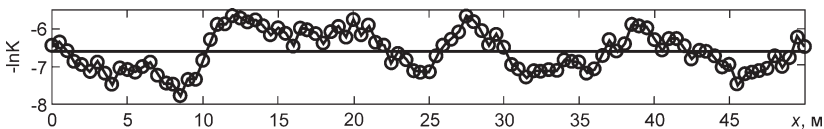


Рис. 3.4. Профиль $\ln k(x)$ для модельного примера (Engesgaard, 2003).

Длина 1D области равна 50 м, расстояние между точками с заданными значениями $\ln k(x)$ равно 0.5 м.

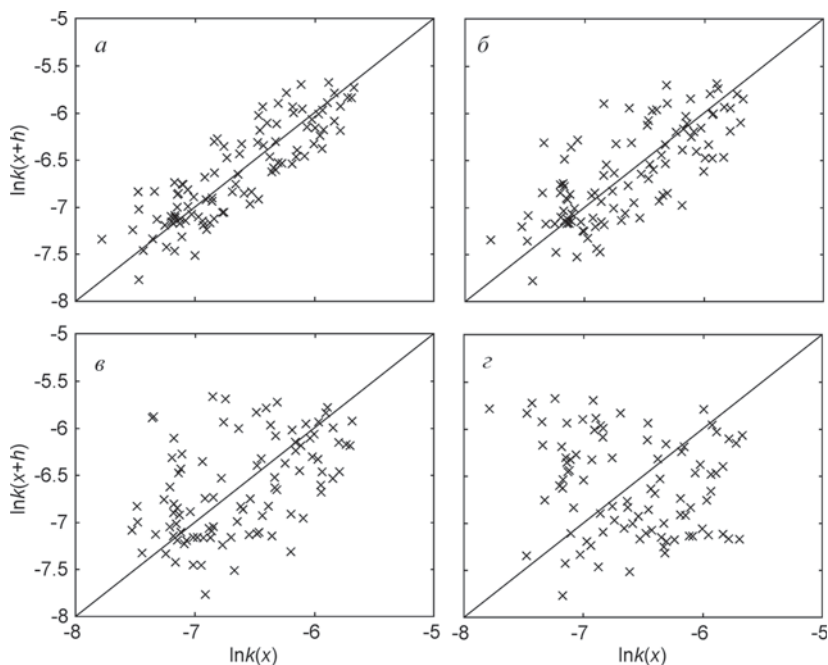


Рис. 3.5. Графики рассеяния при различных h .

a — 0.5 м; $б$ — 1 м; $в$ — 2 м; $г$ — 5 м.

нии, поскольку сдвиг может зависеть от направления). При $h = 0$ ковариационная функция равна дисперсии (σ_Y^2). Пространственная ковариация — мера постоянства (или, наоборот, непостоянства) фильтрационных свойств среды. Положительная ковариация между двумя точками x и $x + h$ подразумевает, что если $Y(x)$ выше, чем среднее, ожидается, что $Y(x + h)$ будет также выше среднего. Отрицательная ковариация предполагает обратную тенденцию.

С другой стороны, мерой роста степени разброса точек при увеличении h на графиках рассеяния может служить момент инерции относительно линии 1:1. В этом случае корреляционная структура может быть описана с помощью (функции-) полувариограммы:

$$\gamma_Y(h) = \frac{1}{2} \langle [Y(x) - Y(x + h)]^2 \rangle, \quad (3.26)$$

Для построения экспериментальных полувариограмм (далее — вариограмм) используются расчеты по формуле, предло-

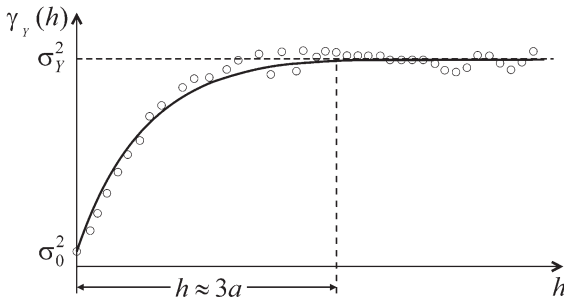


Рис. 3.6. Экспериментальная (кружки) и модельная (сплошная линия) вариограммы для распределения $\ln k(x)$ на рис. 3.4.

женной Г. Матероном (G. Matheron) в 1962 г. (Deutsch, Journel, 1992; Rubin, 2003):

$$\gamma_Y(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} (Y_{x_i+h} - Y_{x_i})^2, \quad (3.27)$$

где $N(h)$ — количество пар значений, разделенных расстоянием h ; $\gamma_Y(h)$ — возрастающая на определенном отрезке функция (см. рис. 3.6).

В модели случайного стационарного поля ковариационная функция и вариограмма связаны между собой соотношением

$$\gamma_Y(h) = \sigma_Y^2 - \text{cov}_Y(h). \quad (3.28)$$

При малых h вариограмма $\gamma_Y(h)$ характеризуется низкими значениями, что указывает на близость значений Y в соседних точках. Для случайного коррелируемого поля увеличение h приводит к росту и последующей стабилизации $\gamma_Y(h)$ вблизи постоянного значения (σ_Y^2). На рис. 3.6 приведена вариограмма, отвечающая выше — описанному примеру (распределение $k(x)$ на рис. 3.4). Видно, что начиная со значений разделяющего лага $h = a \approx 14$ м (см. далее), корреляция между значениями Y отсутствует, и они могут рассматриваться подобно обычным случайным величинам, характеризующим некоррелируемое поле.

Таким образом, вариограмма несет информацию о некоторой масштабной (корреляционной) длине, характеризующей закономерную пространственную изменчивость параметров. Поэтому если подобрать некоторую аналитическую модель (функцию), аппроксимирующую экспериментальную вариограмму

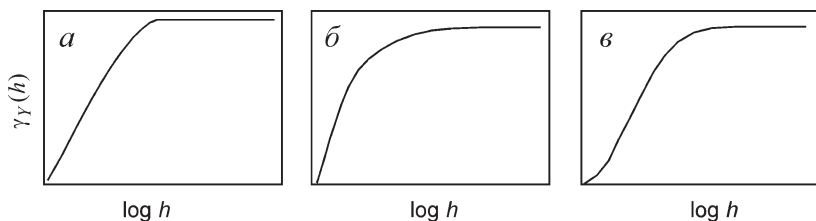


Рис. 3.7. Графическое представление моделей вариограмм.

a — сферическая, b — экспоненциальная, $в$ — Гауссова.

$\gamma_Y(h)$, то появится возможность предсказать пространственную корреляционную структуру изучаемой среды. Если $\mathbf{Y} = \mathbf{lhk}$ статистически гомогенна (стационарна), вариограмма зависит только от h (строго говоря, вектора \mathbf{h}).

Среди достаточно большого количества модельных функций, описывающих экспериментальные полувариограммы, выделяются (часто используются):

— сферическая модель (рис. 3.7, a)

$$\gamma_Y(h) = \begin{cases} \sigma_0^2 + \sigma_Y^2 \left(\frac{3h}{2a} - \frac{1}{2} \left(\frac{h}{a} \right)^3 \right) & 0 < h \leq a, \\ \sigma_0^2 + \sigma_Y^2 & h > 0; \end{cases} \quad (3.29a)$$

— экспоненциальная модель (рис. 3.7, b)

$$\gamma_Y(h) = \sigma_0^2 + \sigma_Y^2 \left(1 - \exp \left(-\frac{h}{l_Y} \right) \right); \quad (3.29б)$$

— модель Гауссовой корреляции (рис. 3.7, $в$)

$$\gamma_Y(h) = \sigma_0^2 + \sigma_Y^2 \left(1 - \exp \left(-\left(\frac{h}{l_Y} \right)^2 \right) \right); \quad (3.29в)$$

здесь сумма дисперсий $\sigma_0^2 + \sigma_Y^2$ выполняет функцию так называемого силла (*sill* — асимптотика для функции $\gamma_Y(h)$); в примере на рис. 3.6 силл будет $\sigma_0^2 + \sigma_Y^2 \approx 0.35$, причем σ_0^2 — величина дисперсии, обусловленная эффектом самородков (*nagget effect*); этот эффект подразумевает, что существуют пространственные вариации параметра, которые не охвачены принятым масштабом (интервалом) опробования; он также задает долю случайной компоненты изменчивости; в примере на рис. 3.6 наджет $\sigma_0^2 \approx 0.05$; a — рендж (*range* — расстояние, на котором наблюдается рост функции $\gamma_Y(h)$ до ее платообразного участка, силла) — характерная длина (расстояние), при превышении которой корреляция между значениями

рассматриваемого параметра ($\ln k$) становится несущественной (рис. 3.3; 3.6); в примере на рис 3.6 рендж $a \approx 14\text{м}$; в экспоненциальной и гауссовой модели параметр l_Y — интегральная длина корреляции, связанная с ренджем соотношениями $a = 3l_Y$ и $a = \sqrt{3}l_Y$, что отвечает расстоянию h , на котором $\gamma_Y(h)$ достигает 95 % своего асимптотического значения, сила.

Наконец, в ряде работ по геостатистике используется трехмерная экспоненциально затухающая ковариационная функция (Gelhar, Axness, 1983):

$$\text{cov}_Y(\mathbf{h}) = \sigma_Y^2 \exp \left[- \left(\frac{h_1^2}{l_1^2} + \frac{h_2^2}{l_2^2} + \frac{h_3^2}{l_3^2} \right)^{1/2} \right], \quad (3.30)$$

где l_1, l_2 и l_3 — корреляционные масштабы проницаемости в горизонтальной плоскости ($l_1 \equiv l_x, l_2 \equiv l_y$) и в вертикальном направлении ($l_3 \equiv l_z$); σ_Y^2 — дисперсия $\mathbf{Y} = \ln \mathbf{k}$.

В таком представлении на интуитивном уровне можно предположить, что корреляционный масштаб связан с характерной длиной элементов фильтрационной неоднородности (например, глинистых линзообразных включений в песчаной толще). Если корреляционные масштабы одинаковы для всех направлений ($l_x = l_y = l_z = l_Y$), то такой стохастический процесс называется статистически изотропным процессом. Если значения проницаемости горизонта коррелируют в одном направлении больше, чем в другом, то мы имеем дело со статистически анизотропной средой. Например, в идеально стратифицированной среде (переслаивание хорошо выдержанных по простиранию песчаных и глинистых слоев) корреляционные масштабы в плане (l_x и l_y) имеют близкие значения, однако они многократно превышают корреляционный масштаб, измеряемый вкост напластования ($l_x, l_y \gg l_z$). Низкие значения l_z свидетельствуют о резких литологических изменениях в вертикальном направлении. В большинстве практических расчетов априорно полагают $l_x = l_y \gg l_z$.

3.2.2.2. Расчетные коэффициенты макродисперсии

Исключительно большое число публикаций посвящено исследованию поведения функций напора и концентрации, для того чтобы найти значения эффективных параметров фильтрации и массопереноса в предпосылке о стохастическом характере поведения коэффициента фильтрации.

В самом общем виде макродисперсия трактуется как процесс, связывающий локальные флуктуации поля скорости и кон-

центрации. Дисперсивность массового потока может также отождествляться с влиянием изменчивости поля действительных скоростей фильтрации на статистическую дисперсию времени перемещения частиц жидкости и растворенного вещества в гетерогенной среде. Интересно отметить, что коэффициенты вариации скорости всегда ниже коэффициентов вариаций функции проницаемости. Это объясняется сглаживающей ролью гидродинамического градиента. Таким образом, даже в сильно неоднородных породах (характеризующихся высокими значениями коэффициента σ_Y^2) не следует ожидать столь же высоких показателей флуктуации поля действительных скоростей фильтрации.

Полученные с помощью различных аналитических или численных подходов выражения для коэффициента макродисперсии D_{ij}^* в общем трехмерном случае стохастически анизотропной среды имеют довольно сложную интегральную форму. В то же время для ряда полезных частных случаев существуют несложные аналитические представления для D_{ij}^* в виде

$$D_{ij}^* = \delta_{ij}^* v, \quad (3.31)$$

где δ_{ij}^* — эффективный коэффициент макродисперсивности, являющийся аналогом коэффициента микродисперсивности в задачах гидродинамической дисперсии (см. разд. 3.1.2); главные его компоненты: $\delta_{11}^* = \delta_L^*$ — продольная макродисперсивность; $\delta_{22}^* = \delta_{Ty}^*$ и $\delta_{33}^* = \delta_{Tz}^*$ — поперечные макродисперсивности; v — средняя скорость фильтрации.

Целый ряд замечательных результатов в области исследования масштабных эффектов, связанных с проявлением макродисперсии, был получен в 1980—1990-х гг. (Gelhar, Axness, 1983; Dagan, 1989; Neuman, 1990; Gelhar, 1993; и др.). Остановимся на некоторых из них.

В предельном случае статистически изотропной среды ($l_x = l_y = l_z = l_Y$) при $\sigma_Y^2 < 1$ искомые (в общем случае — нестационарные: $\delta_L^*, \delta_T^* = f(\tau)$, $\tau = vt/nl_Y$ — нормированное время) коэффициенты макродисперсивности δ_L^* и δ_T^* имеют две асимптотики: начальную, характеризующуюся линейной зависимостью расчетной макродисперсивности от времени, и конечную — стационарную, характеризующуюся стабилизацией этих коэффициентов. Такая стабилизация позволяет использовать для описания процесса в целом однородные уравнения конвективно-дисперсионного типа (3.1).

Поведение коэффициентов продольной и поперечной макродисперсивности в начальные моменты времени ($\tau \ll 1$) описывается зависимостями (Dagan, 1989)

$$\delta_L^* = \frac{8}{15} \sigma_Y^2 \frac{vt}{n}, \quad \delta_T^* = \frac{1}{15} \sigma_Y^2 \frac{vt}{n}, \quad (3.32)$$

т. е. отношение параметра, ответственного за поперечное рассеяние к параметру, контролирующему продольное рассеяние, составляет 1/8. Оба коэффициента пропорциональны σ_Y^2 , не зависят от корреляционного масштаба и растут пропорционально времени (или, поскольку $vt/n = x$, линейно зависят от расстояния, пройденного концентрационным фронтом в пористой среде).

По прошествии довольно больших моментов времени ($\tau \gg 1$) наблюдается стабилизация коэффициентов макродисперсивности

$$\delta_L^* = \sigma_Y^2 l_Y, \quad \delta_T^* = 0. \quad (3.33)$$

В целом эффекты рассеяния вещества в продольном направлении определяются исключительно показателями ковариационной функции и слабо зависят от значений локальной дисперсивности (δ_L и δ_T); это говорит о том, что процесс всецело контролируется флуктуацией поля скоростей фильтрации. Результат $\delta_T^* = 0$ объясняется пренебрежением микродисперсией. В более общей постановке, учитывающей микроскопический уровень проявления поперечной дисперсии (Gelhar, 1993),

$$\delta_T^* = \frac{\sigma_Y^2}{8} (\delta_L + 3\delta_T). \quad (3.34)$$

Очевидно, поперечная макродисперсия доминирует в формировании объемных потоков вещества лишь на участках, прилегающих к концентрационным источникам. На больших расстояниях процесс контролируется локальными значениями δ_L и δ_T и, по-видимому, молекулярной диффузией (D_m).

Таким образом, со временем следует ожидать замедления динамики роста боковых границ ореолов рассеяния: увеличение зоны смещения в направлениях, ортогональных средней скорости фильтрации, происходит крайне медленно. Это, однако, не означает, что боковой отток вещества пренебрежимо мал: из-за большой площади боковой поверхности ореола через нее при этом может мигрировать основная доля загрязнений (Мироненко, Румынин, 1998).

Анализ процессов в трехмерных средах с анизотропной корреляционной структурой показывает, что при $l_z \ll l_x(l_y)$ и $\delta_T l_x \ll l_z^2$ происходит вырождение соответствующих моделей в модели миграции в идеализированных стратифицированных средах, в которых преобладает дисперсионный межслоевой обмен, а конвекция лишь определяет перенос вещества по напластованию. В этом случае для описания начальной и конечной стадий процесса может использоваться диффузионно-конвективная модель с параметрами, определяемыми согласно (Gelhar, 1993):

$$\delta_L^* = \frac{\sigma_k^2}{k^2} \frac{vt}{n} \quad \text{при} \quad t \ll l_z^2 n / v \delta_T, \quad (3.35)$$

$$\delta_L^* = \frac{\sigma_k^2}{k^2} \frac{l_z^2}{3\delta_T} \quad \text{при } t \gg l_z^2 n / v\delta_T; \quad (3.36)$$

здесь σ_k^2 — статистическая дисперсия нормально распределенного коэффициента фильтрации, k — его среднее значение.

Представленный анализ основывался главным образом на ранних (1980—начало 1990-х гг.) работах в области стохастической гидрогеологии. Тем не менее, полученные результаты являются фундаментальными: они доказывают возможность (правда, при выполнении довольно жесткого условия $tv/nl_x \gg 1$) использования для описания переноса вещества в квазиодномерных потоках неограниченной протяженности моделей макродисперсии с асимптотическим тензором макродисперсивности \mathbf{D}/vl_x , являющимся в общем случае функцией σ_Y^2 , l_z/l_x и $Pe = vD_L/l_x$ (D_L — суммарный коэффициент микродисперсии) (Dagan, 2001).

Подводя итог, подчеркнем, что стохастический подход в большинстве случаев — единственная возможность преодолеть масштабные эффекты, которые свойственны трассерным (индикаторным) экспериментам (Мироненко, Румынин, 1986), позволяющим определять лишь локальные параметры массопереноса, зачастую малопригодные для использования их в долговременных прогнозах изменения качества подземных вод на участках их загрязнения. Имеются в виду ситуации, требующие описания дисперсионных фронтов. Гораздо более эффективным для анализа макродисперсии в гетерогенных водоносных комплексах, к которым относится большинство изучаемых в гидрогеологии сред, оказывается использование информации о пространственной изменчивости фильтрационных свойств пород, дополненной литолого-структурным и минералогическим анализом полевых данных.

В целом концепция макропараметров, получаемых из стохастической теории макродисперсивности, является весьма продуктивным элементом гидрогеологического анализа, направленного на преодоление масштабных эффектов при построении детерминированных моделей миграции подземных вод. При этом, конечно, необходимо иметь в виду, что значительные технические усилия, затрачиваемые на изучение параметров, контролирующих дисперсионные эффекты при миграции в гетерогенных породах, должны соизмеряться с реальной потребностью практического решения той или иной миграционной задачи в условиях конкретного типа техногенного воздействия на подземные

воды. Далеко не всегда макродисперсионное рассеяние вещества оказывается значимым фактором на фоне проявления других механизмов миграции, прежде всего вынужденной и гравитационной конвекции, многофазности потоков, физико-химических преобразований и взаимодействий, о которых речь пойдет в других главах.

3.3. Модели миграции вещества в трещиноватых и трещиновато-пористых породах

Комплексы трещиноватых пород имеют широкое, планетарное распространение. Экспериментальное изучение и прогнозирование миграции вещества в них часто сталкиваются с трудностями принципиального характера: многоуровневая структурная организация такого рода сред, формирующих кластерные системы, осложненные зонами тектонической деформации; сильная и труднопредсказуемая пространственная изменчивость фильтрационных свойств; невыполнение предпосылки сплошности среды, ограничивающей применение моделей эквивалентных пористых сред; диффузионный обмен веществом между трещинами и пористой матрицей и др.

Геологическая типизация такого рода пород применительно к задачам геомиграции (переноса вещества под действием гидравлических и химических градиентов) позволяет с рядом оговорок выделить две категории трещиноватых сред: 1) кристаллические и 2) осадочные и эффузивные.

Параметры	Категория пород			
	Кристаллические*	Осадочные и эффузивные		
		Граниты, гнейсы	Мел, мергель	Известняк, песчаник
Трещиноватость, %	0.2—0.5	0.5—3	0.5—3	0.5—1
Пористость матрицы, %	0.3—0.7	20—40	5—20	5—30
Козфф. диффузии, м ² /сут	10 ⁻⁸ —10 ⁻¹⁰	10 ⁻⁵ —10 ⁻⁶	10 ⁻⁶ —10 ⁻⁷	10 ⁻⁵ —10 ⁻⁷

* Интрузивные и сильно метаморфизованные.

Кристаллические породы отличаются низкой емкостью (пористостью) межтрещинного пространства (матрицы), так что в

относительно кратковременных процессах (годы) ролью диффузионного обмена веществом между трещинами и пористой матрицей можно пренебречь. Для условий длительной миграции (десятки-сотни и более лет), например, радионуклидов в постэксплуатационный период в районе размещения пунктов глубокого захоронения РАО, демпфирующий вклад емкости пористой матрицы в массоперенос может быть существенным. В осадочных и эффузивных комплексах пород матричная пористость часто многократно превышает трещиноватость, и кинетика диффузионного обмена контролирует массоперенос в таких средах во всем временном диапазоне (от масштаба индикаторных экспериментов — часы, до масштаба долговременных прогнозов — годы). Такие породы относят к категории пород с выраженной двойной пористостью — к трещиновато-пористым породам.

Модели миграции подразделяются на три категории: 1) модели эквивалентной пористой среды (equivalent porous medium — EPM), 2) модели дискретной среды (discrete fracture network — DFN), 3) модели стохастически-непрерывной среды (stochastic continuum medium — SCM).

3.3.1. Модели эквивалентной пористой среды (EPM)

EPM подход применим в относительно равномерно трещиноватых средах, где конвективно-дисперсионный процесс рассеяния вещества связывается с флуктуациями поля скоростей в различных трещинах и ассоциируется с микродисперсией. Данная концепция эффективна и при анализе переноса вещества в породах с выраженной пористостью межтрещинного пространства (породных блоков), способствующей проявлению более мощных факторов рассеяния (обусловленными кинетикой диффузионного обмена веществом между трещинами и пористыми блоками) и связывается с понятием двойной пористости среды. Однако отнесение трещиноватых пород к категории сред, допускающих EPM подход, часто ограничивается явлением структурирования («фокусирования») фильтрационного потока в трещинном пространстве. Под этим явлением понимается концентрирование расхода движущихся частиц воды в ограниченном количестве трещин, образующих проводящие каналы, в то время как основной объем трещинного пространства остается заполненным неподвижной (застойной) водой, а следовательно, поверхность трещин в застойных зонах оказывается недоступ-

ной для сорбируемых загрязняющих веществ в составе растворов, движущихся в проводящих каналах. Концентрирование потока в обособленных системах трещин — каналах получила название «эффекта канализации» (Tsang, Tsang, 1990).

Для трещинно-жильных и карстовых пород, а также в тех случаях, когда невозможно рассмотрение водовмещающих пород в пределах участка загрязнения подземных вод с позиций сплошной среды (это особенно характерно при доминировании в упомянутых ранее породах так называемого канального механизма миграции), анализ миграционных процессов в рамках традиционных расчетных схем миграции является наименее надежным.

При построении такого рода моделей предполагается, что:

— в довольно большом (репрезентативном) объеме трещиноватой породы фильтрация/миграция описывается параметрами пористой среды (k, D, n, R) — «чисто» трещиноватые породы;

— этот объем может включать две вложенные друг в друга системы: одна характеризуется свойствами трещин, а вторая — пористых блоков (k_m, D_m, n_m, R_m) — трещиновато-пористые породы; (здесь и далее: k, D, n, R — коэффициенты фильтрации и диффузии/гидродисперсии, трещинная пористость, фактор сорбционной задержки в трещинах; k_m, D_m, n_m, R_m — то же применительно к пористой матрице). Одна из структурных идеализаций трещиноватой среды представлена на рис. 3.8.

Достоинства моделей (ЕРМ концепции):

— простота сопряжения транспортных механизмов и физико-химических реакций;

— эффективно учитывается массообмен между трещинами и пористой матрицей;

— существование удобных аналитических асимптотик;

— доступность параметрического обеспечения;

— адаптация с фильтрационными кодами.

Дифференциальное уравнение массового баланса в частных производных (3.1), записанное относительно концентрации сорбирующегося компонента, подверженного распаду в трещинах C , можно переписать в виде:

$$Rn \frac{\partial C}{\partial t} + W_m + \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) + Rn\lambda - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) = 0. \quad (3.37)$$

Оно является наиболее общей формой представления модели ЕРМ трещиноватой среды, учитывающей главные геомиграци-

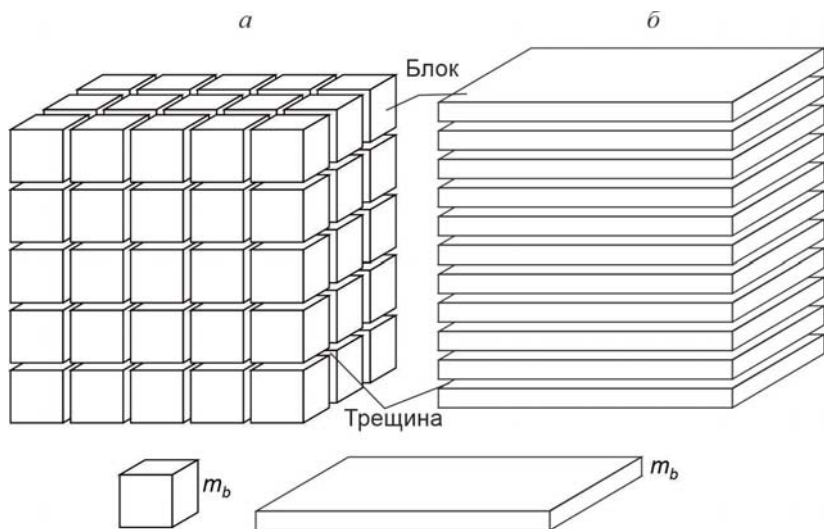


Рис. 3.8. Схематичное представление структуры трещинно-блочной среды.
 а — блоки кубической формы, б — блоки пластинчатой формы.

онные механизмы: конвекцию под влиянием фильтрационного потока со скоростью Дарси v , гидродинамическую дисперсию, диффузионный обмен веществом с пористой матрицей (источник/сток W_m), его сорбцию на поверхности трещин и распад (определяемый константой скорости распада λ). Частный случай $W_m = 0$ — гомогенная («чисто» трещиноватая) среда.

Для трещиноватой среды с двойной пористостью удельный диффузионный поток вещества через поверхность пористых блоков определяется градиентным законом Фика (функция-источник)

$$W_m = -S_b D_m \left\langle \frac{\partial C_a}{\partial \rho} \right\rangle_{\rho \in S}, \quad (3.38)$$

где $C_a(\rho, t)$ — текущая концентрация в блоке; ρ — внутренняя нормаль к внешней поверхности блока; D_m — эффективный коэффициент диффузии связанный с коэффициентом поровой диффузии D_p соотношением $D_m = D_p n_m$; S_b — удельная динамическая поверхность блоков, доступная для подвижной воды (в англоязычной литературе — specific flow-wetted surface, sFWS), другими словами, S_b — суммарная поверхность трещин, находящихся в контакте с подвижной водой в единичном

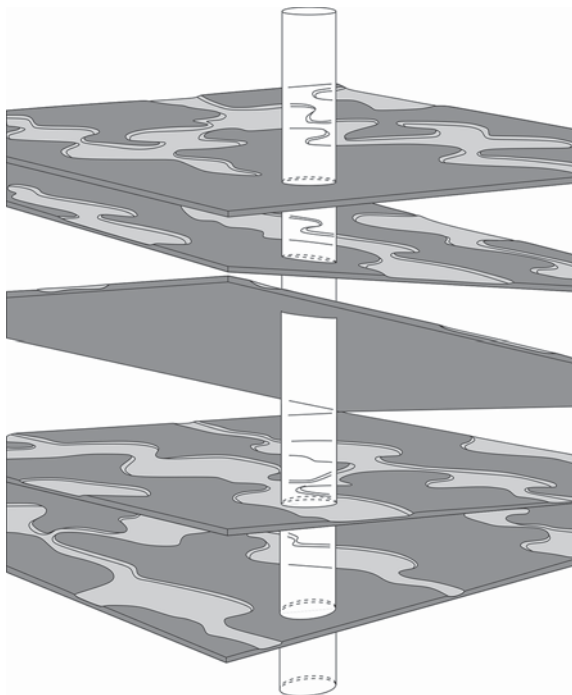


Рис. 3.9. Проточные (светло-серый цвет) и застойные зоны (темно-серый цвет) трещинного массива, вскрываемого скважиной (Tsang et al., 2015).

объеме породы. Эта поверхность отличается от характеристики трещиноватой среды P_{32} — объемная плотность трещин (суммарная поверхность трещин в единичном объеме трещиноватой породы). Для идеализированной структуры, представленной породными блоками кубической формы (рис. 3.8, а), $P_{32} = 6/m_b$, а для блоков пластинчатой конфигурации (рис. 3.8, б) — $P_{32} = 2/m_b$.

На рис. 3.9 схематично показана скважина, вскрывающая трещины с различной степенью заполнения подвижной (светло-серый цвет) водой. Темно-серым цветом показаны «застойные» области, занятые неподвижной водой; они снижают удельную величину контакта мигрирующих растворов и породных блоков.

Для нахождения W_m в общем случае решается уравнение внутрипоровой диффузии, которое для трещиноватых пород, сложенных блоками «правильной» геометрической формы, имеет одномерное представление (Haggerty, Gorelick, 1995):

$$R_m n_m \frac{\partial C_a}{\partial t} + R_m n_m \lambda = \frac{D_m}{\rho^{(\nu-1)}} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^{(\nu-1)} \frac{\partial C_a}{\partial \rho} \right), \quad (3.39)$$

где $\nu = 1, 2, 3$ отвечают блокам пластинчатой, цилиндрической и сферической форм. Факторы сорбционной задержки (разд. 2.5.1) в уравнениях (3.37) и (3.39) определяются соотношениями

$$R = 1 + K_a S_b / n, \quad R_m = 1 + K_d \rho_b / n_m, \quad (3.40)$$

где K_a и K_d — коэффициенты распределения для поверхностной и объемной (матричной) сорбции; ρ_b — плотность пористой матрицы в сухом состоянии.

Для удобства физико-математического описания выделяют асимптотические режимы переноса, связанные с выбором аналитических уравнений для аппроксимации диффузионного потока, W_m , на границе зон с резко различной проницаемостью (Рошаль, Шестаков, 1969; Шестаков, 1995). В трещиновато-пористых породах могут быть выделены три базовые модели (Мироненко, Румынин, 1998).

1) Модель неограниченной емкости (*unlimited capacity*, UC, модель) (Румынин, 2011)

$$W_m = -R_m n_m \sqrt{\lambda_m} \left[\lambda^{1/2} (\operatorname{erfc} \sqrt{\lambda t} - 1) - \frac{\exp(-\lambda t)}{\sqrt{\pi t}} \right] C, \quad (3.41)$$

$$\lambda_m = \frac{S_b^2 D_m}{R_m n_m}. \quad (3.41a)$$

Применение модели неограниченной емкости оправданно, пока за время миграционного процесса влиянию молекулярной диффузии подвергаются лишь зоны пористой матрицы, непосредственно прилегающие к трещинам. Поэтому, что следует из структуры выражений (3.41), массовый поток из трещин в блоки лишь косвенно связан с размером и формой последних: начальные этапы диффузионной «пропитки» блоков характеризуются переносом частиц вещества от поверхности блока к его центру по траекториям, которые слабо влияют друг на друга (фактически происходит плоскопараллельная диффузия вещества). Размер блоков находит отражение в их удельной поверхности S_b . Одним из параметров, контролирующих миграцию вещества, является комплексный массообменный параметр (3.41a), имеющий размерность $[\Gamma^{-1}]$.

Для условий поршневого одномерного переноса в трещинах ($D_L = 0$) консервативного стабильного компонента ($\lambda = 0$) этому режиму отвечает так называемое решение Ловерье, которое в безразмерном виде дается формулой

$$\bar{C} = \operatorname{erfc}\left(\frac{\eta}{2\sqrt{\tau}}\right)\tau \geq 0, \quad (3.42)$$

$$\eta = \sigma\lambda_m t_0, \quad \tau = \lambda_m(t - t_0), \quad \sigma = \frac{R_m n_m}{Rn}, \quad t_0 = \frac{xRn}{v}. \quad (3.42a)$$

Для водоносного пласта, представленного блоками преимущественно изометрической (кубической) конфигурации, расчетная схема неограниченной емкости (случай $\lambda = 0$) справедлива, пока выполняется приближенный критерий (Мироненко, Румынин, 1986)

$$\tau < 0.3—0.5. \quad (3.42b)$$

2) Модель сосредоточенной емкости (*rate limited*, RL, модель)

$$W_m = R_m n_m \frac{\partial C_m}{\partial t} + \lambda R_m n_m C_m, \quad (3.43)$$

$$R_m n_m \frac{\partial C_m}{\partial t} = \xi(C - C_m) - \lambda R_m n_m C_m, \quad \xi = \frac{15R_m n_m D_m}{(m_b/2)^2}, \quad (3.43a)$$

где C_m — средняя концентрация в блоке; ξ — коэффициент скорости кинетики обмена для пористых блоков, аппроксимированных сферами радиусом $m_b/2$ (Neville, 2006).

Данная модель описывает процесс обмена между трещинами и пористыми блоками за пределами временного диапазона, ограниченного неравенством (3.42b), когда массовым потоком охватывается значительный объем порового пространства блоков и режим переноса в них становится близким к квазистационарному.

В одномерном варианте без дисперсии в трещинах решение для стабильного компонента ($\lambda = 0$) дается в виде интегральной «функции Гольдштейна» (Goldstein, 1953) $J(\eta, \tau)$, графики которой можно найти в ряде работ (Рошаль, Шестаков, 1969; Мироненко, Румынин, 1986):

$$\bar{C} = J(\eta, \tau) = 1 - e^{-\tau} \int_0^{\eta} e^{-z} I_0(2\sqrt{\tau z}) dz, \quad (3.44)$$

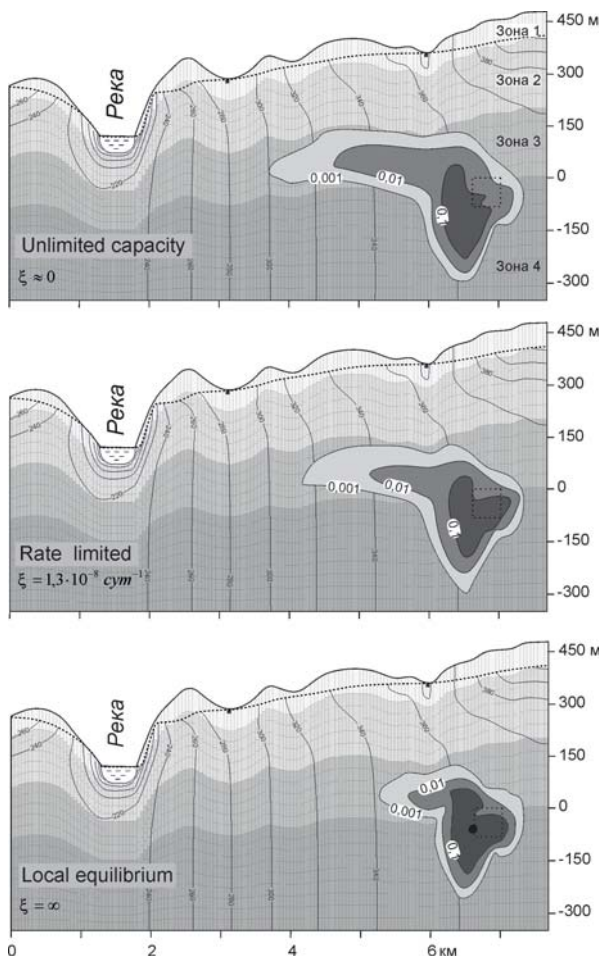


Рис. 3.10. Особенности формирования ореола загрязнения подземных вод радионуклидом I-129 ($R = R_m = 1$) в трещиновато-пористой среде (безнапорный фильтрационный поток) при различных коэффициентах массообмена между трещинами и пористой матрицей ξ (MODFLOW-MT3DMS).
 $t = 1000$ лет.

Изолинии — относительная концентрация. Горизонтальные коэффициенты фильтрации для зон 1—4 (м/сут): 0.1; 0.01; 0.001; 0.0001; вертикальный коэффициент фильтрации для всех зон 0.0001 м/сут. $n = n_m = 0.3\%$. Инфильтрационное питание 18—73 мм/год.

$$\eta = \sigma \alpha_m t_0, \quad \tau = \alpha_m (t - t_0), \quad \alpha_m = \frac{\xi}{R_m n_m}. \quad (3.44a)$$

3) Модель локального равновесия (*local equilibrium*, LE, модель) с эффективными параметрами макродисперсии — «макро-аналогами» коэффициентов модели микродисперсии; например, в одномерном варианте (Maloszewski, Zuber, 1985; Carrera et al., 1998; Rumynin, 2011)

$$u^* = \frac{u}{(1 + \sigma)}, \quad D^* = \frac{\sigma}{\alpha_m (1 + \sigma)} (u^*)^2, \quad u = \frac{v}{Rn}. \quad (3.45)$$

UC модель (неограниченной емкости) находит широкое применение для интерпретации кратковременных индикаторных опытов (Мироненко, Румынин, 1986). RL модель (сосредоточенной емкости) чаще всего используют в прогнозных расчетах. Так, система уравнений (3.37), (3.43) получила реализацию в программном комплексе MODFLOW-MT3D (Neville, 2006). LE модель используется в основном для прогнозирования перемещения фронтов поршневого вытеснения. Пространственно-временные границы применимости асимптотических моделей не являются строгими и зависят от выбираемой точности описания концентрационных фронтов при решении геомиграционных задач (Мироненко, Румынин, 1998).

Параметрическое наполнение моделей представляет самостоятельную проблему, решение которой предполагает привлечение разнообразных полевых и лабораторных методик.

Модельный пример. Влияние кинетики обмена с пористой матрицей иллюстрируется расчетом распространения ореола загрязнения в неоднородном по фильтрационным свойствам разрезе (рис. 3.10). Из представленных данных можно видеть, что LE модель является наименее консервативной, поскольку она занижает скорости распространения передового концентрационного фронта. Наоборот, модель, пренебрегающая обменом с пористой матрицей, является неоправданно консервативной, поскольку она резко завышает концентрации радионуклида на переднем фронте. С этих позиций оптимальными являются расчеты в рамках RL модели.

3.3.2. Физические эффекты, ограничивающие применение ЕРМ моделей

Среди них:

— фокусирование (канализация) фильтрационного потока в трещинах и трещинных зонах — явление концентрирования рас-

хода фильтрационного потока в отдельных трещинах (зонах), в то время как значительные объемы трещинного пространства, несмотря на наличие гидравлического градиента, остаются заполненными неподвижной водой;

— перколяция — возникновение связной структуры потока в трещинах, геометрия, плотность и пространственная ориентация которых отвечает определенным условиям (критериям); невыполнение соответствующих критериев делает невозможным протекание воды через массив трещиноватых пород.

Еще задолго до появления математических методов описания потоков жидкостей в трещиноватых средах было отмечено, что выходы воды в горных выработках, на откосах, а также стенках скважин концентрируются (фокусируются) в единичных трещинах, в то время как другие области массива (также пересеченные трещинами) остаются слабо обводненными или вовсе сухими.

Пример 1. Он касается натуральных исследований на участке Stripa (Швеция, бывший подземный рудник). Поверхность (стены, кровля и подошва) двух пересекающихся горных выработок (рис. 3.11), пройденных в трещиноватом гранитном массиве, была покрыта листами (всего 375 площадью 2 кв. м каждый), оснащенными индивидуальными водоприемными устройствами, позволяющими проводить замеры расхода воды.

Расход потока воды для каждого листа-дрены замерялся в течение нескольких лет (рис. 3.11). Оказалось, что величины расходов имеют большой разброс и распределены весьма неравномерно: один лист принимал 10 %, а 12 листов — 50 % общего потока. Также видно, что большие участки поверхности выработок вообще оказались сухими. Пути каналов фильтрации группируются в кластеры.

Решение задач фильтрации в массиве, представленном системой пересекающихся трещин (трехмерная постановка), качественно приводит к тем же результатам. Фокусирование фильтрационного потока происходит в большинстве случаев на пересечении двух и более трещин. Наличие таких пересечений определяется общими структурными особенностями массива, плотностью трещин, их геометрическими параметрами, степенью взаимосвязанности и многими другими. Влияние вариаций раскрытия индивидуальных трещин может отойти на второй план. Многочисленные исследования в рамках DFN моделей показывают, что в формировании основного расхода (70—90 %) потока воды может принимать незначительный процент (5—20 %) такого рода пересечений трещин (Rasmuson, Neretnieks, 1986; Salve, 2005).

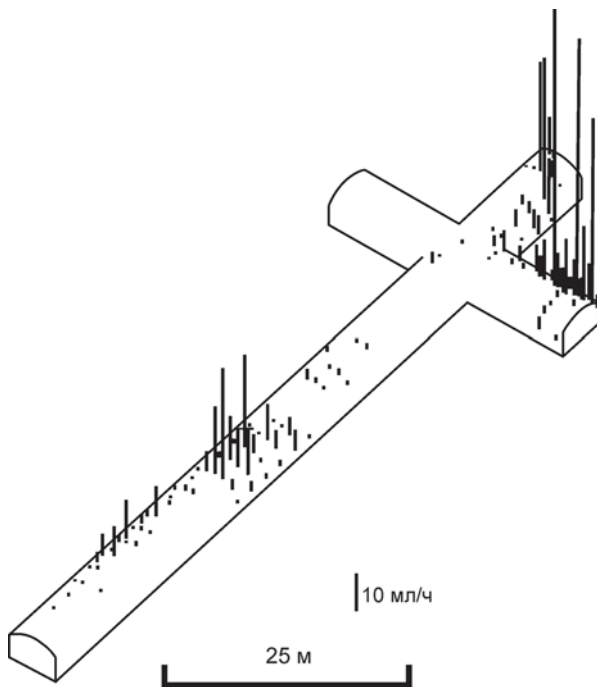


Рис. 3.11. Распределение расхода подземной воды, поступающей в горные выработки (Tsang et al., 2015).

Пример 2. Влияние эффекта фокусирования (или канализации) фильтрационного потока проще всего показать на примере фильтрации в единичной трещине с переменным раскрытием, δ , характеризующим расстояние между стенками трещины в плоскости двухмерного фильтрационного потока x, y .

Пусть изменения $\delta(x, y)$ описываются случайной коррелируемой функцией, определяемой интегральным корреляционным масштабом l и статистической дисперсией σ^2 . Решение такой задачи на численной модели показывает (Tsang, Tsang, 1990), что с ростом σ^2 растет количество областей с застойным режимом фильтрации, граничащих с активными в гидродинамическом отношении зонами (рис. 3.12). Последние формируют своего рода каналы, по которым происходит преимущественный перенос вещества. Действительная скорость его перемещения будет всегда выше скорости, рассчитанной из предпосылки расхода потока по средней площади сечения такой трещины. Связность каналов контролируется также интегральным корреляционным масштабом l .

Из общих физических соображений должно быть ясным, что фокусирование резко снижает площадь контакта движущейся

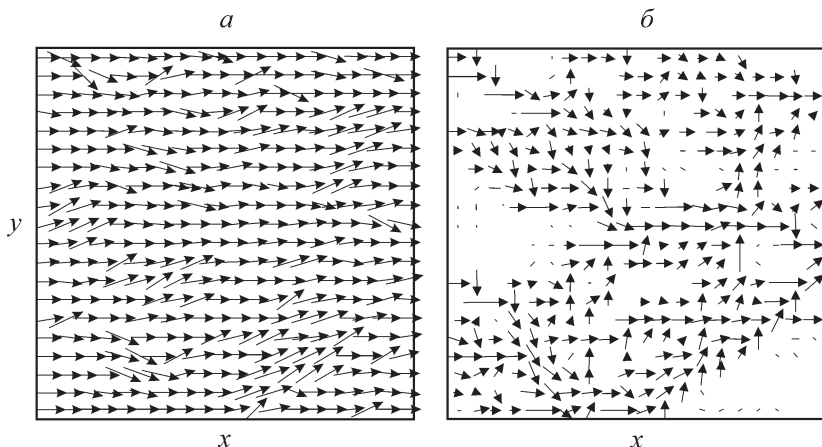


Рис. 3.12. Влияние σ^2 на фокусирование фильтрационного потока в трещине с переменным раскрытием.
 a — $\sigma^2 = 0.01$; b — $\sigma^2 = 0.36$ (Tsang, Tsang, 1990). Стрелки — вектора скорости фильтрации.

воды с поверхностью трещин, поскольку велика доля застойных зон, недоступных для вещества, находящегося в трещинных каналах. Поэтому объемная площадь трещин P_{32} (рассчитываемая по данным анализа кернового материала, или по замерам трещин в геологических обнажениях) радикально отличается от так называемой динамической удельной поверхности (specific flow-wetted surface, sFWS — удельная поверхность, находящаяся в контакте с подвижной водой), которая может обозначаться как S_b . Так, обобщение результатов специализированных исследований гранитогнейсовых массивов дает диапазон $sFWS = 0.01—1 \text{ м}^2/\text{м}^3$ (Elert, 1997; Crawford et al., 2003). Геометрическая характеристика P_{32} (разд. 3.3.1) обычно на один-два-три порядка выше.

Пример 3. Ограниченность ЕРМ моделей особенно наглядно проявляется при описании фильтрации в трещиноватых средах, представленных редкими хорошо проводящими трещинами, трещинными каналами или линейными зонами повышенной трещиноватости/проницаемости ограниченной протяженности (линейный масштаб от первых десятков до сотен метров), разделенными трещиноватой матрицей с резко пониженными фильтрационными свойствами. Характерный пример — гранитогнейсовые массивы, нарушенные зонами сдвиговой (тектонической) деформации (рис. 3.13, a). Центральная часть — ядро зоны деформации — может быть представлена дисперсным материалом и/или продуктами дислокационного метаморфизма. Периферийная область зоны деформа-

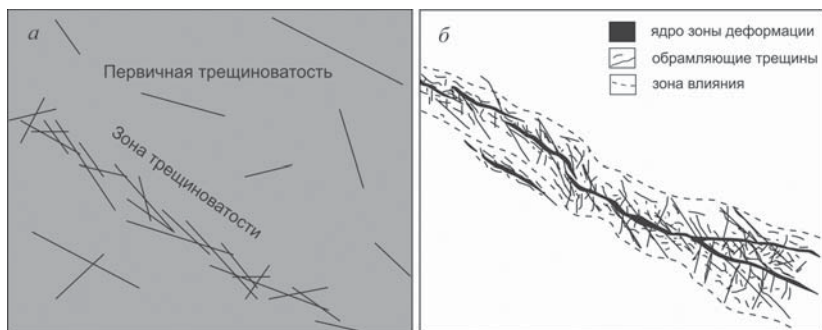


Рис. 3.13. Схематическое представление трещиноватого массива.

а — «фоновые» трещины и зона повышенной трещиноватости, связанная с проявлением в массиве сдвиговых деформаций; *б* — структура зоны сдвиговой деформации.

ции — вмещающая порода, характеризующаяся повышенным в сравнении с массивом модулем трещиноватости (рис. 3.13, *б*). Зональное строение зон сдвиговой деформации, представленных как трещиноватым, так и дисперсным материалом, особенно важно учитывать при анализе миграции сорбируемых компонентов (разд. 15.2.4).

Трещины или трещинные зоны в скальных массивах могут быть настолько разобщены, что порог перколяции не преодолевается и связный поток воды в трещинах не формируется, а вода фильтруется по межтрещинному пространству — матрице.

Исследовать проявление данного эффекта позволяет модель бинарной гетерогенной среды (Pozdniakov, Tsang, 2004). Пусть неограниченное пространство горной породы представлено сфероидами (эллипсоидами вращения) — хорошо проницаемыми включениями конечного размера (рис. 3.14, *а*), имитирующими трещины, и слабопроницаемой матрицей (это также может быть трещиноватый материал — блоки пород с первичными трещинами, возникшими, например, при охлаждении магматического расплава или в процессе седиментогенеза). Решение задачи фильтрации (Pozdniakov, Tsang, 2004) для такого анализа удобно записать относительно функции приведенного расхода:

$$\bar{Q} = Q/Q_{\max} = f(v, p, \varepsilon), \quad (3.46)$$

где Q_{\max} — максимальный расход, формируемый при матричной проницаемости, равной проницаемости трещин; p — относительная доля пустотного пространства в единичном объеме среды; $\varepsilon = \lambda_v/\lambda_h$ — соотношение линейных размеров короткой и длинной осей сфероида; $v = k_f/k_m$ — контраст проницаемости.

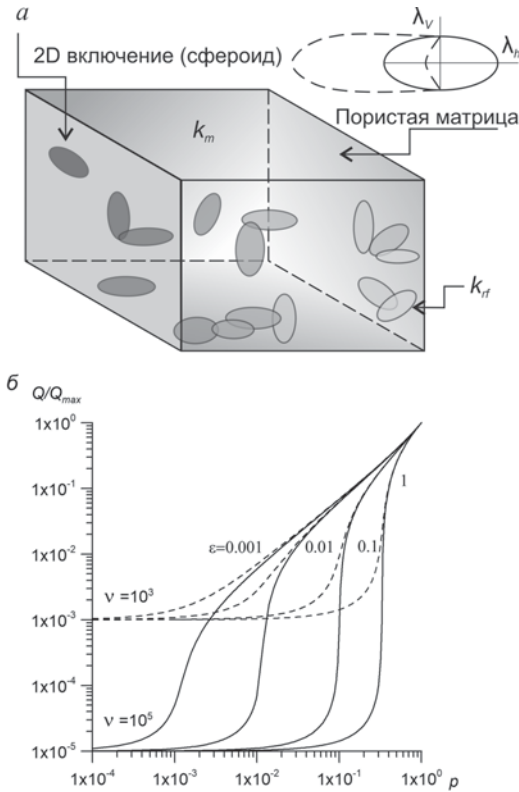


Рис. 3.14. Концептуальное представление трещиноватой среды (а); графики решения (б) (Pozdniakov, Tsang, 2004) для частных случаев $\nu = k_f/k_m = 10^3$ (штриховые линии) и 10^5 (сплошные линии).

Пример 4. Из графического представления решения (рис. 3.14, б) видно, что в зависимости от соотношения параметров вклад матричной и трещинной фильтрации в формирование суммарного расхода потока может быть различным. Так, при низкой плотности трещин (ρ), особенно если они не являются протяженными ($\epsilon > 0.01$), поток через массив определяется матричной проницаемостью ($\bar{Q} \approx 1/\nu$, или $k_{eff} \approx k_m$, k_{eff} — эффективный коэффициент фильтрации). Отсутствие фильтрации по трещинам подтверждается горизонтальными участками графиками (рис. 3.14, б), которые нечувствительны к изменениям ρ . Наоборот, конечные участки графиков относительного расхода имеют четкую тенденцию к росту с увеличением доли трещин. Эти участки свидетельствуют о преобладании трещинной фильтрации. Переход от одного режима фильтрации к другому имеет резкий, скачкообразный характер, свидетельствующий, очевидно, о преодолении порога перколяции. Особенно это видно для сред с высокой контрастностью (на рис. 3.14, б — это кривые $\nu = 10^5$): например,

при $\varepsilon = 0.01$ изменение p в два раза, с $1 \cdot 10^{-2}$ до $2 \cdot 10^{-2}$, приводит к увеличению расхода через массив примерно в 100 раз. Понятно, что если система представлена весьма протяженными трещинами, то вероятность их взаимного пересечения увеличивается, что снижает значимость рассматриваемого эффекта. Наконец, график на рис. 3.14, б отражает гипотетическую ситуацию, когда трещины представлены шарообразными включениями (кривые), что дает наиболее выраженный перколяционный эффект в силу образования проводящих каналов при соприкосновении или перекрытии сфер.

В природных массивах трещиноватых пород связность трещин и проницаемость массива определяются рядом факторов: плотность, раскрытие, длина и пространственная ориентация трещин. Обобщенными показателями могут служить: среднее количество пересечений с другими трещинами, приходящихся на одну трещину, количество пересекающихся трещин в единичном объеме, суммарная длина пересечений в единичном объеме. Учет напряженного состояния массива также имеет важное значение при такого рода оценках.

3.3.3. Модели стохастически-непрерывной среды (SCM)

В общем случае при построении SC (stochastic continuum) моделей трещиноватая среда рассматривается в качестве совокупности вложенных друг в друга непрерывных континуумов (Neuman, 1987), свойства каждого из которых соотносится с системой трещин или отдельных зон трещиноватости (связанных, например, с зонами тектонической деформации породы), — в отличие от моделей DFN, где находят отражение параметры и геометрия каждой трещины (см. далее). Эти свойства (проницаемость, объемная плотность, удельная поверхность) представляют случайные коррелируемые поля, описание которых на сеточных моделях предполагает обоснование выбора усредняющего объема и масштаба фрагментации модельной области, что является самостоятельной проблемой, получившей название «апскейлинг» (ремасштабирование параметров). SC модели оперируют понятиями эквивалентной пористой среды для представления блоков трещиноватых пород.

3.3.4. Модели дискретной трещиноватой среды (DFN)

Главные достоинства данного подхода, активно развивающегося с 1980-х гг., связаны с возможностью имитации процессов фильтрации в масштабах, при которых не выполняется предпосылка сплошности среды, а также с моделированием быстрой фильтрации по отдельным каналам и трещинам. Недостатки: моделирование требует детальных знаний о пространственной ориентации отдельных трещин и их параметрах, т. е. возможности параметрического наполнения моделей весьма ограничены; гидравлическая активность системы трещин плохо предсказывается геологической моделью трещиноватого массива; ограничен пространственный масштаб: десятки, реже — сотни метров; реализация подхода требует значительных вычислительных ресурсов; при этом возникают трудности моделирования массообмена трещин с матрицей.

Вот некоторые проблемы, вызывающие наибольший интерес:

- определение эффективных коэффициентов фильтрации и дисперсии для перехода к ЕРМ моделям;
- исследование эффектов структуризации фильтрационных потоков;
- сопряжение ближней и дальней зон для задач захоронения РАО в кристаллических массивах;
- моделирование откачек при невыполнении предпосылок сплошности среды.

Примеры использования DFN подхода можно найти в ряде работ (Berkowitz, 2002; Нуман et al., 2015; ConnectFlow verification... 2016).

Подводя итог рассмотренным выше процессам и моделям миграции в трещиноватых средах, отметим, что данная среда отличается высокой степенью гетерогенности и плохо поддается детерминированному описанию. Поэтому вероятностные и стохастические модели приобретают особую значимость. Сочетание различных механизмов геомиграции и структурных особенностей породы могут образовывать пути быстрого транспорта загрязняющих веществ. С другой стороны, критерии перколяции могут не выполняться вовсе, что исключает значимую фильтрацию через массивы скальных трещиноватых пород.

Глава 4

МИГРАЦИОННЫЕ МОДЕЛИ НЕЛИНЕЙНЫХ СОРБЦИОННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ТРАНСФОРМАЦИЙ

В дополнение к линейной сорбции (разд. 2.5.1) в настоящей главе мы рассмотрим межфазовые взаимодействия, отличающиеся нелинейным видом сорбционных и ионообменных изотерм, в том числе поверхностное комплексообразование, а также простейшие реакции растворения/осаждения солей. Они будут дополнены реакциями комплексообразования в жидкой фазе. Все процессы рассматриваются в равновесной постановке, пренебрегающей их кинетической стадией, что оправдано в большинстве случаев в приложении к задачам долговременного прогнозирования изменения качества подземных вод под влиянием техногенных факторов.

4.1. Нелинейная физическая сорбция

Среди изотерм, предназначенных для описания нелинейных зависимостей

$$N = f(C), \quad (4.1)$$

наиболее широкое распространение получили *двухпараметрические* изотермы сорбции Фрейндлиха и Лэнгмюра (рис. 4.1).

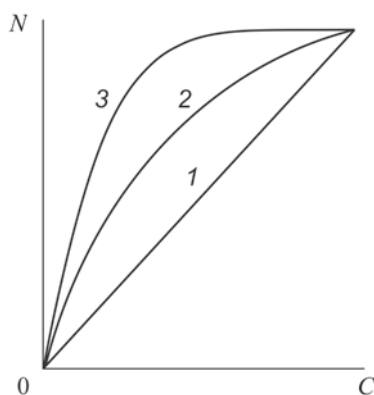


Рис. 4.1. Линейная изотерма Генри (1) и нелинейные выпуклые изотермы сорбции Фрейндлиха (2) и Лэнгмюра (3).

Частое обращение к ним объясняется, с одной стороны, их способностью описывать практически все разнообразие экспериментальных данных, с другой стороны — относительной простотой аналитических форм и ограниченным количеством включаемых параметров.

Изотерма Фрейндлиха

$$N(C) = K_F C^\eta \quad (4.2)$$

достаточно часто используется для описания адсорбции таких веществ, как радионуклиды, тяжелые металлы и пестициды; здесь K_F [$M^{1-\eta} L^{3(\eta-1)}$] и η [—] — эмпирические (линейная и экспоненциальная) константы; параметр η ($\eta > 0$), характеризующий нелинейность процесса, зависит от степени гетерогенности адсорбционной поверхности минеральных зерен.

При значимых диапазонах изменения концентрации достаточно общей является изотерма Лэнгмюра

$$N(C) = \frac{N_v K_L C}{1 + K_L C}, \quad (4.3)$$

где N_v — сорбционная емкость породы [ML^{-3}]; $N_v = N_{\max} S_b$ — в трещиноватых породах; K_L — константа, характеризующая степень сродства адсорбента и адсорбата (постоянная энергия связи) [$L^3 M^{-1}$]; при низких значениях последней ($K_L C \ll 1$) формула (4.3) переходит в зависимость (2.125а) при $K_d \rho_b = K_L N_v$, а при высоких концентрациях $N \rightarrow N_v = \text{const}$.

4.1.1. Поршневое вытеснение

Доминирование конвекции над дисперсией (одномерный случай — $vx/D_L \gg 1$) позволяет записать уравнение переноса (2.9а) стабильного компонента (2.126) в форме:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{n} \frac{\partial N}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = 0. \quad (4.4)$$

Поскольку в случае равновесной сорбции справедливо равенство

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{dN}{dC} \frac{\partial C}{\partial t} = f'(C) \frac{\partial C}{\partial t}, \quad (4.5)$$

$$f'(C) = \frac{df(C)}{dC}, \quad (4.5a)$$

то уравнение (4.4) преобразуется к виду

$$\left(1 + \frac{f'(C)}{n}\right) \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = 0. \quad (4.6)$$

Рассмотрим решение уравнения (4.6) при постоянном начальном условии

$$C(x, t = 0) = C_0 \quad (4.7a)$$

и граничном условии, отвечающему пакетной входной функции

$$C(0, 0 < t \leq t_p) = C_0, \quad (4.7б)$$

$$C(0, t > t_p) = 0, \quad (4.7в)$$

где t_p — промежуток времени, в течение которого концентрация компонента C_0 остается постоянной. Такая постановка задачи позволяет исследовать влияние нелинейной сорбции на характер передового и заднего фронта концентрационной функции, для которой концентрационный градиент $\partial C/\partial x$ (или $\Delta C/\Delta x$ — при сохранении контрастной границы между вытесняемым и вытесняющим растворами) имеет различные знаки.

Уравнение (4.6) является квазилинейным дифференциальным уравнением первого порядка, которое описывает перемещение различных точек концентрационной волны с различной характеристической скоростью, определяемой как

$$\left(\frac{dx}{dt}\right)_C = \frac{u}{1 + \frac{f'(C)}{n}}. \quad (4.8)$$

Решение показывает, что скорость смещения любой концентрации происходит с постоянной скоростью. Решение (4.8) называется характеристическим решением дифференциального уравнения (4.6). Интегрирование (4.8) для произвольной концентрации позволяет определить расстояние x_C , на которое происходит смещение концентрационной точки C от исходного положения x_s , которое она занимала в момент t_s :

$$\int_{x_s}^{x_C} dx = \int_{t_s}^t \frac{u dt}{1 + f'(C)/n}, \quad (4.9)$$

что дает

$$x_C = x_s + \frac{u(t - t_s)}{1 + f'(C)/n}. \quad (4.10)$$

Решение справедливо, если первоначально прямоугольный фронт испытывает тенденцию к растяжению, т. е. в том случае, когда скорость перемещения малых концентраций превосходит скорость перемещения высоко концентрационных точек фронта. Это может быть в том случае, когда изотерма сорбции является вогнутой при $C_0 > C^0$, или выпуклой при $C^0 > C_0$. В противном случае, как следует из решения (4.8), точки концентрационного фронта с более высокой концентрацией должны были опередить точки фронта с малыми значениями концентрации, что привело бы к физически невозможному эффекту «опрокидывания» фронта. Такое противоречие может быть снято, если допустить, что фронт сохраняет свою прямоугольную форму — ступенчатый вид.

Математически можно записать две системы неравенств, отражающие две типовые ситуации, при которых фронт остается контрастным:

— первая ситуация для $C_0 > C^0$:

$$df(C)/dC > 0, \quad d^2f(C)/dC^2 < 0; \quad (4.11)$$

— вторая ситуация для $C^0 > C_0$:

$$df(C)/dC > 0, \quad d^2f(C)/dC^2 > 0. \quad (4.12)$$

Пример. Рассмотрим нелинейную изотерму Фрейндлиха (4.2). Когда $\eta = 1$ изотерма имеет линейный вид, и показатель K_F имеет смысл нормированного коэффициента сорбционного распределения $K_d \rho_b$. Пусть $C_0 > C^0$.

$$\frac{df(C)}{dC} = K_F \eta C^{\eta-1} > 0 \quad (4.13)$$

и при $0 < \eta < 1$ (выпуклая изотерма)

$$\frac{df^2(C)}{dC^2} = K_F \eta(\eta - 1) C^{\eta-2} < 0, \quad (4.14)$$

согласно (4.11), концентрационный фронт должен иметь контрастный (ступенчатый) характер. От обратного: если допустить, что решение

(4.12), в котором $f'(C)$ определяется (4.13), является справедливым, то при $C \rightarrow 0$ $C^{\eta-1} \rightarrow \infty$ и $(dx/dt)_C \rightarrow 0$, а и при $C \rightarrow \infty$ $C^{\eta-1} \rightarrow 0$ $(dx/dt)_C \rightarrow u$, т. е. чем выше концентрация, тем выше скорость миграции, что физически невозможно и привело бы к опрокидыванию фронта.

Таким образом, сорбция из раствора при нелинейной выпуклой изотерме и условии $C_0 > C^0$ не меняет первоначальной (прямоугольной) формы концентрационного фронта (Рачинский, 1964; Веницианов, Рубинштейн, 1983). Составляя уравнение баланса вещества для любой ленты или трубки тока, подобно тому как это делается в работах (Голубев, 1981; Шестаков, 1995), приходим к выражению

$$\left(\frac{\Delta x}{\Delta t}\right)_{\Delta C} = \frac{u}{1 + \frac{1}{n} \frac{\Delta f}{\Delta C}}, \quad (4.15)$$

где $\Delta C = C_0 - C^0$ — скачок концентрации на фронте волны. Для изотермы Фрейндлиха

$$x_f = \frac{ut(C_0 - C^0)}{(C_0 - C^0) + K_F (C_0^\eta - C^{0\eta})/n}. \quad (4.16)$$

Условие контрастного фронта, согласно (4.12), не может быть выполнено для заднего фронта концентрационной волны ($t > t_p$, $C_0 < C^0$) при $0 < \eta < 1$ (вторая производная $df^2(C)/dC^2 < 0$), поэтому задний фронт подвержен «растяжению» и для описания его движения используется решение (4.10)

Задний фронт, согласно (4.12), формирующийся при вытеснении загрязненного раствора пластовой водой $C_0 = 0 < C^0$, будет контрастным при $\eta > 1$ $df^2(C)/dC^2 > 0$:

$$x_f = \frac{utC^0}{C^0 + K_F C^{0\eta}/n} = \frac{ut}{1 + K_F C^{0(\eta-1)}/n}. \quad (4.17)$$

При этом передний фронт будет испытывать растяжение.

4.1.2. Влияние нелинейной сорбции на характер дисперсионного фронта

В случае нелинейных изотерм сорбции (4.2) и (4.3) производная $f' \equiv df(C)/dC$ в ранее приведенной формуле (4.6) оказывается зависящей от текущей концентрации C компонентов в фильтрующемся растворе, и поэтому фактор сорбционной задержки не является постоянной величиной

$$R(C) = 1 + \frac{f'(C)}{n}. \quad (4.18)$$

Уравнение массопереноса сорбируемого нестабильного ($\lambda > 0$) компонента в гомогенных породах (2.95) трансформируется к виду:

$$nR(C)\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(v_i C) - \frac{\partial}{\partial x_i}\left(D_{ij}\frac{\partial C}{\partial x_j}\right) + \lambda nC\left(1 + \frac{N}{C}\right) = 0, \quad (4.19)$$

где, в частности,

$$R(C) = 1 + \eta K_F C^{n-1}/n \quad (4.20a)$$

— для изотермы сорбции Фрейндлиха (4.2);

$$R(C) = 1 + N_v K_L/n(1 + K_L C)^2 \quad (4.20б)$$

— для изотермы сорбции Лэнгмюра (4.3).

Характер влияния нелинейной сорбции на *конвективно-дисперсионный* перенос во многом определяется типом изотермы (рис. 4.1), а также соотношением концентраций — граничной (C_0) и начальной («фоновой», C^0). Особенности миграции и возникающие в пласте эффекты зависят также от типа входной концентрационной функции — ступенчатой, пакетной или импульсной.

Так, при *выпуклой изотерме* (производная f' уменьшается с ростом концентрации) емкость пород оказывается более высокой для точек концентрационного фронта с относительно низким содержанием компонента (случай ступенчатого входного «сигнала», $C_0 > C^0$). В результате изолинии с повышенными значениями концентрации перемещаются быстрее, и ширина переходной зоны испытывает тенденцию к сокращению со временем. Так, в одномерных миграционных потоках в противоположных направлениях действуют два фактора: первый — продольная дисперсия — направлен на размыв фронта; второй — адсорбция — способствует сжатию фронта. Эти две тенденции позволили выдвинуть физическую предпосылку о возможности взаимной компенсации действия двух механизмов на некоторой стадии переноса, отвечающей асимптотическому (теоретически при $t \rightarrow \infty$) режиму (Веницианов, Рубинштейн, 1983; Vosma, Van der Zee, 1993); фронт перемещается параллельно самому себе (увеличения размера зоны рассеяния по времени не происходит) с постоянной скоростью, определяемой фактором за-

держки (Рачинский, 1964; Van der Zee, 1990; Румынин, 2011: 832—836):

$$R(C_0, C^0) = 1 + \frac{\Delta N}{n\Delta C}, \quad (4.21)$$

где $\Delta C = C_0 - C^0$; $\Delta N = N_0 - N^0$; N_0 и N^0 — концентрации компонентов на породе, равновесные граничной и начальной концентрациям в растворе ($C_0 > C^0$).

Отсюда следует, что нелинейная адсорбция рассматриваемого типа может оказывать благоприятный эффект при переносе загрязнений, опасных даже в малых концентрациях (например, радионуклидов): благодаря нелинейности процесса подавляется наиболее продвинутая часть ореола загрязнения. Отметим также, что в таком представлении, в отличие от линейной сорбции, дающей $R = \text{const}$, фактор сорбционной задержки в случае нелинейной изотермы зависит от начальных и граничных условий задачи — от соотношения концентраций C_0 и C^0 (4.21).

При *вогнутой изотерме* адсорбции оба фактора — механическая дисперсия и нелинейная сорбция — действуют однонаправленно. Однако, учитывая, что дисперсия обуславливает растяжение фронта со скоростью, пропорциональной \sqrt{t} (одномерные миграционные потоки), а нелинейность адсорбционного процесса обеспечивает рост размера переходной зоны со скоростью, пропорциональной t , можно предположить, что со временем вклад продольной гидродисперсии в суммарный процесс рассеяния станет незначительным (Веницианов, Рубинштейн, 1983).

При десорбции ранее адсорбированных компонентов характер развития концентрационных полей во времени для случаев выпуклой и вогнутой изотерм меняется на противоположный — в сравнении с только что рассмотренными закономерностями. Важно, что взаимное наложение адсорбционных и десорбционных волн, происходящее, в частности, при смене граничной концентрации, способствует погашению суммарного концентрационного возмущения, причем значимость такого рода эффектов может быть выше, чем дисперсионное «сглаживание» максимальных концентраций.

Пример. Отмеченные тенденции хорошо проявляют себя в процессе лабораторных сорбционных экспериментов в динамическом режиме при импульсном или пакетном характере входного концентрационного сигнала (рис. 4.2). Поскольку передний и задний фронты концентрационной волны испытывают различные тенденции к деформации в зависимости от

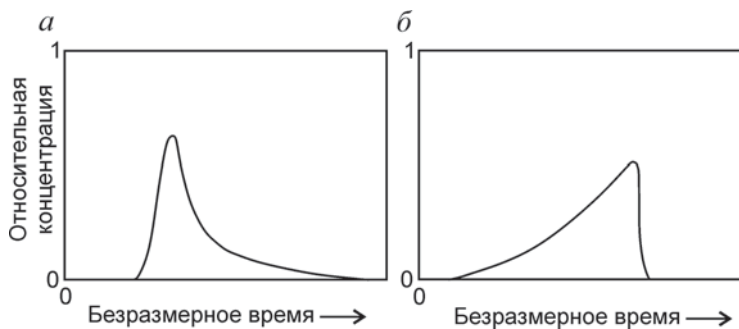


Рис. 4.2. Характер индикаторных графиков $\bar{C} = f(\tau)$ при выпуклой (а) и вогнутой (б) изотермах сорбции.

$\tau = vt/Ln$ — безразмерное время — кратность порового объема; v — скорость Дарси; L — длина колонны; n — пористость.

вида изотермы сорбции, индикаторные кривые, регистрируемые на выходе из фильтрационной колонны, различаются формой. Так, при выпуклой изотерме задний фронт испытывает тенденцию к растяжению, так что соответствующие концентрационные точки отстают от фронта пиковых значений, а выходные кривые $C = f(t)$ характеризуются выраженными «хвостовыми эффектами» (рис. 4.2, а). Обратная тенденция отмечается при миграции компонента, сорбция которого контролируется вогнутой изотермой сорбции (рис. 4.2, б).

Анализируя конкретные опытные данные, необходимо, однако, иметь в виду, что «хвостовые» эффекты могут быть обусловлены также кинетикой сорбции.

4.2. Ионный обмен

4.2.1. Общие представления о процессе

Ионообменный процесс относят к сорбционному типу взаимодействия, поскольку он схож по своему внешнему проявлению с физической сорбцией и протекает нередко параллельно с ней. Наиболее выразительно данный процесс (объединяющий, как правило, несколько ионообменных реакций) проявляется на участках засоления/загрязнения подземных вод техногенными рассолами. Ионный обмен здесь затрагивает макрокомпонентный, катионный состав системы раствор-порода (катионы щелочных и щелочноземельных элементов Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , Mg^{2+}); активным компонентом в поглощенном комплексе является ион водорода (H^+), также участвующий в обменных реакциях. Поэтому ионный обмен в этих условиях способствуют смене гидро-

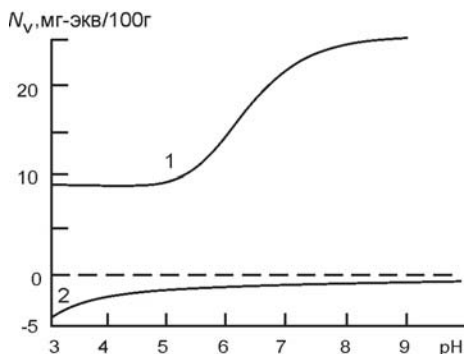


Рис. 4.3. Характерные кривые изменения концентрации положительных (1) и отрицательных (2) зарядов на породе.

химического типа подземных вод, а также изменению значения кислотно-щелочной реакции среды (рН). Ионный обмен, наряду с реакциями поверхностного комплексообразования (разд. 4.3), контролирует миграцию тяжелых металлов, а также многих радионуклидов. Характерные примеры приводятся в разд. 10.2.1 и 16.4.3.

Наличие хорошо выраженных ионообменных свойств характерно для породообразующих глинистых и слюнистых минералов, обменная весовая емкость *CEC* (Cation-Exchange Capacity, мг-экв/100 г) у которых меняется в пределах: 70—150 — для монтмориллонита и вермикулита; 10—40 — для гидрослюд, хлорита и иллита; 3—15 — для каолинита и галлуазита. Для кварцита, кальцита и минералов группы алюмосиликатов значения *CEC* обычно не превышают 3—5 мг-экв/100 г, а для окисей и гидроокисей железа и алюминия они составляют 0.5—5 мг-экв/100 г. Органический материал почв *CEC* составляет 150—400 мг-экв/л (рН = 8).

Характер ионообменных взаимодействий растворов с аморфной группой только что упомянутых и некоторых других минеральных образований существенно зависит от кислотности/щелочности среды — параметра рН, который контролирует отношение между активностями (количеством) отрицательно и положительно заряженных площадок — активных центров на поверхности минералов (рис. 4.3). Таким образом, возможна инверсия ионообменных свойств минералов: в определенных условиях они могут поглощать не только катионы, но и анионы. Однако анионообменные свойства ощутимо проявляются, как правило, лишь при низких значениях рН (3—4).

Для большинства ионов тяжелых металлов и радионуклидов достаточно типичным является рост сорбционной способности при увеличении

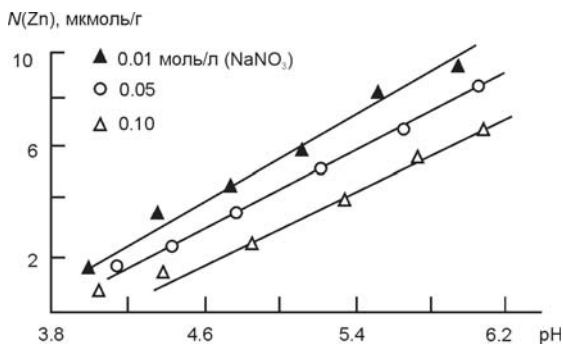
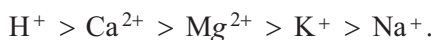


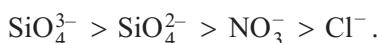
Рис. 4.4. Влияние pH раствора на величину сорбции ионов цинка из раствора NaNO_3 с исходной концентрацией Zn^{2+} 0.24 ммоль/л (Shuman, 1986).

pH раствора, при этом увеличение концентрации солей других электролитов приводит к падению сорбируемости, как это видно на графике (рис. 4.4).

По своей энергии поглощения упомянутые «макро»-ионы образуют следующий селективный ряд:



Менее значимыми для гидрогеохимических систем являются реакции анионного обмена. Тем не менее следует отметить, что значительное содержание в породе гидратированных форм железа и алюминия может потребовать включения в модели и анионообменных реакций. Как показывает анализ (Cresser, Edwards, 1987), способность анионов к такого рода обмену описывается следующим селективным рядом:



Анионообменные реакции весьма чувствительны к изменениям pH и ионной силе. Отмечается (Cresser, Edwards, 1987) определенное влияние анионного обмена и на содержания катионов. Например, при обмене SiO_4^{2-} на OH^- последний анион выходит из породы и взаимодействует с H^+ . Убыль иона H^+ в растворе приводит к его десорбции с последующим замещением свободной емкости катионами Ca^{2+} , Mg^{2+} , Na^+ и K^+ .

Ионный обмен представляет собой стехиометрическое замещение разноименных ионов, поэтому интерпретация обменного

процесса может основываться на фундаментальном законе действующих масс, устанавливающим термодинамическое соотношение между концентрациями катионов в растворе. Предположив, что катионный обмен протекает до установившегося подвижного химического равновесия между катионами в растворе и на породе, реакцию обмена для бинарной системы (M_1 и M_2) можно представить в следующем общем виде:

$$z_2 M_1^{z_1} + z_1 (M_2^{z_2} X_{z_2}) = z_2 (M_1^{z_1} X_{z_1}) + z_1 M_2^{z_2}, \quad (4.22)$$

где M_1 и M_2 — обменивающиеся катионы; X — символ активной площадки в обменном комплексе породы с зарядом «минус 1»; $(M_1 X)$ и $(M_2 X)$ — катионы в обменном комплексе породы; z_1 и z_2 — валентности для катионов 1 и 2.

В соответствии с законом действующих масс, устанавливающим соотношение между активностями продуктов реакций и исходных веществ, равновесное состояние системы (4.22) при активностях катионов (M_1 и M_2) в растворе a_1 , a_2 и на породе a_{x1} , a_{x2} определяется уравнением:

$$K_{12}^T = \left(\frac{a_{x1}}{a_1} \right)^{z_2} \left(\frac{a_2}{a_{x2}} \right)^{z_1}, \quad (4.23)$$

где K_{12}^T — термодинамическая константа равновесия. Активность катионов в растворе a_1 , a_2 определяется его ионной силой, и для бинарной системы связь аналитических концентраций с активностями устанавливается посредством несложного пересчета. Основные трудности использования уравнения (4.23) связаны с необходимостью расчета термодинамических функций a_{x1} и a_{x2} , однако и для этого существуют достаточно разработанные аналитические подходы. Далее мы остановимся на рассмотрении процесса ионного обмена в предельно упрощенной постановке, допускающей использование концентрационных функций вместо активностей.

Перепишем (4.22) в терминах аналитических концентраций — обозначений, использованных нами при формализации сорбции

$$z_2 C_1^{z_1} + z_1 N_2 = z_2 N_1 + z_1 C_2^{z_2}, \quad (4.24)$$

где C_i и N_i — концентрации катионов в растворе и в обменном комплексе ($i = 1, 2$).

Типичные единицы измерения концентраций C_1 и C_2 в растворе — мг-экв/л. Для концентраций катионов в обменном комп-

лексе N_i' обычно используется единица измерения мг-экв/г (или мг-экв/100 г породы), однако в дальнейшем мы будем использовать для N_1 и N_2 размерность мг-экв/л ($N_i = N_i' \rho_b$, где ρ_b — плотность породы в г/л).

Для коэффициента селективности (K_{12}) — «концентрационного аналога» термодинамической константы в (4.23) — справедливо равенство:

$$K_{12} = \left(\frac{N_1}{C_1} \right)^{z_2} \left(\frac{C_2}{N_2} \right)^{z_1}. \quad (4.25)$$

Дальнейшее развитие принципов описания ионообменных равновесий может идти по пути их сведения к изотермическим зависимостям, которые, как и в случае сорбции, устанавливают связь между концентрацией данного компонента на породе (в составе ее обменного комплекса) N и в растворе C при заданных температурах и давлении. В основу такого подхода может быть положен достаточно очевидный *принцип эквивалентности*, согласно которому в ходе обменной реакции должны выполняться предпосылки сохранения электронейтральности раствора и постоянной емкости поглощения:

$$\begin{aligned} C_1 + C_2 &= C_0, \\ N_1 + N_2 &= N_v, \end{aligned} \quad (4.26)$$

где C_0 — сумма эквивалентных концентраций двух конкурирующих катионов в растворе, равная общей концентрации анионов, мг-экв/л; N_v — полная (эквивалентная) емкость катионного поглощения, мг-экв/л. Таким образом, концентрация одного из катионов может быть выражена через концентрацию другого катиона, например:

$$C_2 = C_0 - C_1, \quad N_2 = N_v - N_1. \quad (4.27)$$

Подставляя соотношения (4.27) в выражение для коэффициента селективности (4.25), приходим к уравнению:

$$K_{12} = \left(\frac{N_1}{C_1} \right)^{z_2} \left(\frac{C_0 - C_1}{N_v - N_1} \right)^{z_1}, \quad (4.28)$$

записанному в терминах концентраций катиона 1.

Уравнение (4.28) допускает представление ионного обмена в форме изотермической зависимости (4.1), т. е. уравнение (4.28) может быть переписано относительно обменной концентрации N_1 как функции концентрации катиона в жидкой фазе C_1 . Ниже приводятся безразмерные формы изотермических зависимостей для основных реакций ионного обмена, протекающих с участием двух катионов.

Для гомовалентного обмена

$$\bar{N}_1 = \frac{K_{12}^z \bar{C}_1}{1 + (K_{12}^z - 1) \bar{C}_1} \quad (4.29)$$

— с участием одновалентных ($z = 1$) и двухвалентных ($z = 1/2$) катионов (например, обмен $\text{Na}^+ : \text{K}^+$ или $\text{Ca}^{2+} : \text{Sr}^{2+}$);

для гетеровалентного обмена

$$\bar{N}_1 = \delta(z) + \frac{z}{2\alpha} (1 - \sqrt{1 + 4\alpha}) \quad (4.30)$$

— с участием одно- и двухвалентных катионов (например, $\text{Na}^+ : \text{Ca}^{2+}$ или $\text{Ca}^{2+} : \text{Na}^+$), причем

$$\alpha = \frac{N_v}{C_0} \left[\frac{K_{12} \bar{C}_1^{z_2}}{(1 - \bar{C}_1)^{z_1}} \right]^z, \quad z = z_1 - z_2, \quad (4.30a)$$

а функция $\delta(z) = 1$ при $z > 0$ и $\delta(z) = 0$ при $z < 0$;

$$\bar{C}_i = \frac{C_i}{C_0}, \quad \bar{N}_i = \frac{N_i}{N_v}. \quad (4.30б)$$

Графическое представление уравнений (4.29) и (4.30) дает все три основные формы изотерм $N_i - C_i$ (см. рис. 4.1). Для гомовалентного обмена форма изотермы $N_1(C_1)$ контролируется значением константы обмена: $K_{12} = 1$ — линейная; $K_{12} > 1$ — выпуклая; $K_{12} < 1$ — вогнутая изотерма. Вид изотерм гетерогенного обмена также определяется значением коэффициента селективности K_{12} (Valocchi et al., 1981), причем следует отметить, что одно-двухвалентный обмен $\text{Na}^+ : \text{Ca}^{2+}/\text{Mg}^{2+}$ представляет наибольший интерес, поскольку натриевые рассолы являются одним из основных типов загрязняющих растворов, воздействующих на питьевые подземные воды, в составе которых преобладающими являются катионы кальция и магния.

4.2.2. Формирование ионообменных фронтов (поршневое вытеснение)

В одномерном потоке без дисперсии ионообменный процесс описывается системой уравнений, состоящей из двух уравнений переноса катионов (индексы 1 и 2) и уравнения переноса аниона (индекс 0)

$$n \frac{\partial C_1}{\partial t} + \frac{\partial N_1}{\partial t} + v \frac{\partial C_1}{\partial x} = 0, \quad (4.31a)$$

$$n \frac{\partial C_2}{\partial t} + \frac{\partial N_2}{\partial t} + v \frac{\partial C_2}{\partial x} = 0, \quad (4.31б)$$

$$n \frac{\partial C_0}{\partial t} + v \frac{\partial C_0}{\partial x} = 0, \quad (4.31в)$$

дополненной соответствующими краевыми условиями, о которых речь пойдет ниже.

Ионный обмен является стехиометрическим процессом и поэтому не может менять суммарную нормальность растворенных компонентов. Кроме того, анионы не участвуют в обменных реакциях, а скорость их продвижения по пласту определяется истинной скоростью фильтрации $u \equiv u_0 = v/n$. Это позволяет считать, что при постоянных краевых условиях и незначительной гидродисперсии обмен в области $x < u_0 t$ происходит при неизменных термодинамических условиях, в частности при постоянном содержании в растворе анионов.

При выпуклой изотерме обмена (соответствующие критерии см. в разд. 4.1.1) со скоростью $u_2 = u_0$ должен перемещаться и передний фронт катионов, первоначально находящихся в составе поглощенного комплекса породы. Если задаться «нулевыми» начальными условиями, пренебрегающими содержанием вытесняющего катиона в пластовой воде, т. е. $C_1(x > 0, t = 0) = 0$, то концентрация катионов C_2 эквивалентна концентрации анионов: $C_2 = C_0$. Естественно, что ионообменная сорбция катионов внедряющегося раствора снижает интенсивность их миграции по пласту: единый концентрационный фронт сорбируемого и десорбируемого катионов перемещается со скоростью, определяемой эффективной емкостью

$$u_1 = \frac{vt}{n + \Delta N_1 / \Delta C_1}, \quad \Delta N_1 / \Delta C_1 = \Delta N_{10} / \Delta C_{00}, \quad (4.32)$$

что находит отражение на графике линий-характеристик $t-x$ (рис. 4.5, а).

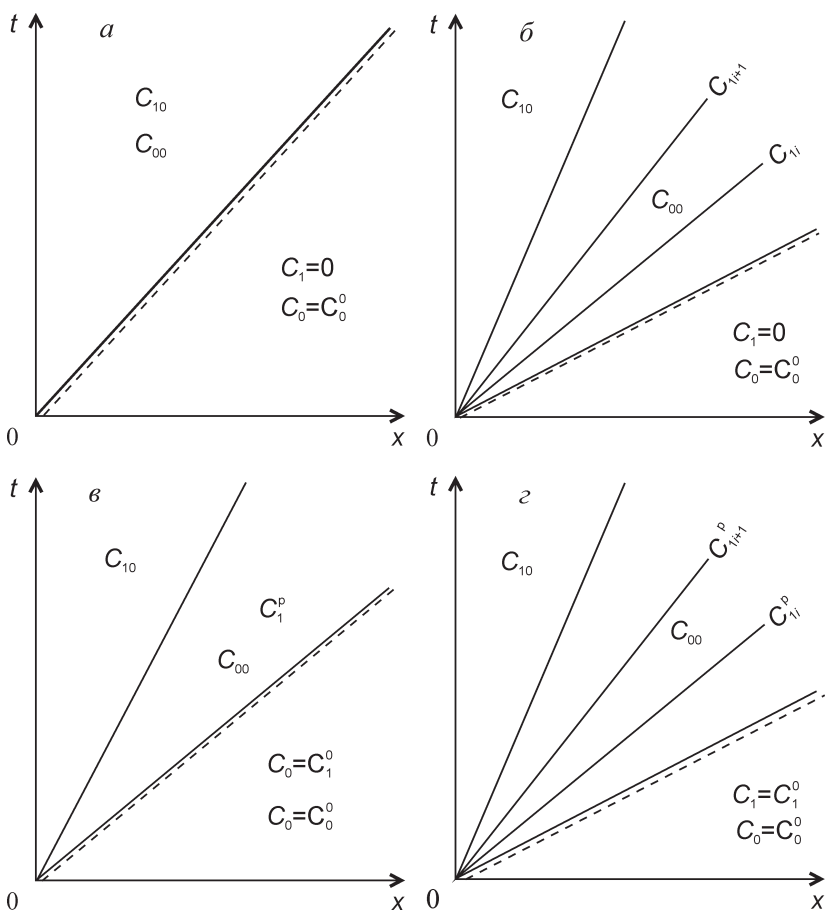


Рис. 4.5. Графики линий-характеристик $t-x$.

a — нулевые начальные условия (выпуклая изотерма); b — нулевые начальные условия (вогнутая изотерма); v — ненулевые начальные условия (выпуклая изотерма); z — ненулевые начальные условия (вогнутая изотерма). Пунктир — линии-характеристики для анионов.

Как было сказано, постоянство C_0 позволяет исключить концентрацию анионов из числа неизвестных переменных. Тогда бинарная (двухкомпонентная) модель переноса, описываемая системой уравнений (4.31), допускает дальнейшее упрощение. Для этого перепишем уравнение (4.28) для константы селективности в форме

$$K_{12} = \left(\frac{N_1}{C_1} \right)^{z_2} \left(\frac{C_2}{N_v - N_1} \right)^{z_1}. \quad (4.33)$$

Из последнего равенства следует алгебраическое уравнение

$$K_{12}C_1^{z_2}(N_v - N_1)^{z_1} - N_1^{z_2}C_2^{z_1} = 0. \quad (4.34)$$

Дифференцируя (4.34) относительно t и выполняя небольшие дополнительные преобразования, получаем (Rubin, James, 1973)

$$g \frac{\partial N_1}{\partial t} = f_1 \frac{\partial C_1}{\partial t} - f_2 \frac{\partial C_2}{\partial t} = 0, \quad (4.35)$$

где

$$g = z_1 K_{12} C_1^{z_2} (N_v - N_1)^{z_1-1} + z_2 C_2^{z_1} N_1^{z_2-1}, \quad (4.35a)$$

$$f_1 = z_2 K_{12} C_1^{z_2-1} (N_v - N_1)^{z_1}, \quad (4.35b)$$

$$f_2 = z_1 N_1^{z_2} C_2^{z_1-1}. \quad (4.35b)$$

Система уравнений (4.31) принимает вид:

$$n \frac{\partial C_1}{\partial t} + \frac{f_1}{g} \frac{\partial C_1}{\partial t} - \frac{f_2}{g} \frac{\partial C_2}{\partial t} + v \frac{\partial C_1}{\partial x} = 0, \quad (4.36a)$$

$$n \frac{\partial C_2}{\partial t} + \frac{f_2}{g} \frac{\partial C_2}{\partial t} - \frac{f_1}{g} \frac{\partial C_1}{\partial t} + v \frac{\partial C_2}{\partial x} = 0. \quad (4.36b)$$

Нетрудно заметить, что концентрация катиона 1 в твердой фазе, N_1 , входящая в коэффициенты g , f_1 и f_2 (4.35), определяется решением уравнения (4.34). Кроме того, при постоянной концентрации анионов ($C_0 = C_1 + C_2 = \text{const}$) производные концентраций обменивающихся катионов в растворе C_1 и C_2 в системе уравнений (4.31) связаны соотношением $\partial C_1 / \partial t = -\partial C_2 / \partial t$. Тогда для описания миграционного процесса, осложненного ионным обменом, достаточным оказывается либо первое, либо второе уравнение системы (4.31). Например, для катиона C_1 имеем уравнение в частных производных

$$\left(n + \frac{f_1 + f_2}{g} \right) \frac{\partial C_1}{\partial t} + v \frac{\partial C_1}{\partial x} = 0, \quad (4.37)$$

или

$$R(C_1) \frac{\partial C_1}{\partial t} + u \frac{\partial C_1}{\partial x} = 0, \quad (4.38)$$

$R(C_1)$ — фактор ионообменной задержки, определяемый валентностью обменивающихся катионов

$$R(C_1) = 1 + \frac{1}{n} \frac{f_1 + f_2}{g}. \quad (4.39)$$

Подставляя в формулу (4.39) выражения для коэффициентов g, f_1, f_2 (4.35) и выполняя необходимые алгебраические преобразования, получаем:

— для моновалентного обмена 1 : 1 (например, обмен $\text{Na}^+ : \text{K}^+$)

$$R(C_1) = 1 + \frac{1}{n} \frac{K_{12} N_v C_0}{[C_1(K_{12}^S - 1) + C_0]^2}; \quad (4.39a)$$

— для моновалентного обмена 2 : 2 (например, обмен $\text{Ca}^{2+} : \text{Sr}^{2+}$)

$$R(C_1) = 1 + \frac{1}{n} \frac{K_{12}^{1/2} N_v C_0}{[C_1(K_{12}^{1/2} - 1) + C_0]^2}; \quad (4.39б)$$

— для гетеровалентного обмена 1 : 2 (например, обмен $\text{Na}^+ : \text{Ca}^{2+}$)

$$R(C_1) = 1 + \frac{1}{n} \frac{N_1^2 + 2K_{12} C_1 (N_v - N_1)}{2N_1(C_0 - C_1) + K_{12} C_1^2}, \quad (4.39в)$$

где концентрация вытесняющего катиона 1 в обменном комплексе N_1 определяется как положительный корень квадратичного уравнения

$$K_{12} C_1^2 (N_v - N_1) - N_1^2 (C_0 - C_1) = 0; \quad (4.39г)$$

— для гетеровалентного обмена 2 : 1 (например, обмен $\text{Ca}^{2+} : \text{Na}^+$)

$$R(C_1) = 1 + \frac{1}{n} \frac{K_{12} (N_v - N_1)^2 + 2N_1 (C_0 - C_1)}{2K_{12} C_1 (N_v - N_1) + (C_0 - C_1)^2}, \quad (4.39д)$$

где концентрация вытесняющего катиона 1 в обменном комплексе N_1 определяется как положительный корень квадратичного уравнения

$$K_{12} C_1 (N_v - N_1)^2 - N_1 (C_0 - C_1)^2 = 0. \quad (4.39е)$$

Таким образом, включение фактора $R(C_1)$ в транспортную модель ионного обмена сводит задачу двухкомпонентного переноса к задаче однокомпонентной миграции, для решения которой могут использоваться аналитические подходы, рассмотренные для нелинейных изотерм физической сорбции (см. разд. 4.1).

Например, методом характеристик (рис. 4.5, б) находится распределение концентраций в пределах переходной зоны, содержащей как катионы поглощенного комплекса, так и внедряющегося в пласт раствора:

$$\left(\frac{dx}{dt}\right)_{C_1} = \frac{v}{n + dN_1/dC_1}. \quad (4.40)$$

Как видно на графике линий-характеристик (рис. 4.5, б), нелинейный характер изотерм ионного обмена определяет индивидуальные скорости переноса концентрационных точек фронта контакта взаимовытесняющихся растворов.

В дополнение к представленному выше анализу рассмотрим особенности поведения концентрационных фронтов вытесняющего катиона при начальных условиях ($t = 0, x > 0$), отличающихся от нулевых:

$$C_0 = C_0^0, \quad C_1 = C_1^0, \quad C_2 = C_2^0, \quad N_1 = N_1^0, \quad N_2 = N_2^0. \quad (4.41)$$

Начнем с наиболее простого случая гомовалентного обмена (4.29) при $K_{12} = 1$; $N_1 = N_v C_1 / C_0$ — линейная изотерма (рис. 4.6).

Различие в значениях концентраций анионов вытесняющего раствора и раствора в пласте ($C_{00} \neq C_0^0$) приводит к нарушению физико-химического равновесия на подвижном фронте, перемещающемся со скоростью движения частиц воды $u_0 = u(C_0)$, поскольку меняется эквивалентная концентрация аниона C_0 . Это способствует изменению концентраций катионов в растворе C_1 и C_2 , однако эти изменения не должны затрагивать содержания катионов в обменном комплексе, т. е. должно выполняться условие $dN_i = 0$, в частности, концентрация вытесняющего катиона на контакте должна оставаться постоянной, $dN_1 = 0$, поскольку он должен перемещаться на переднем фронте со скоростью миграции анионов $u_0 = u(C_0)$ (в противном случае будет нарушено условие электронейтральности). Как видно из рис. 4.6, при заданном соотношении граничной и исходной концентраций анионов (C_{00} и C_0^0) для сохранения постоянства N_1 концентрация катиона в растворе должна уменьшаться на величину $\Delta C_1 = (C_{10} - C_1^p)$. Отсюда следует, что новое равновесное значение C_1^p может быть определено из условия

$$N_1(C_1^p, C_{00}) - N_1(C_1^0, C_0^0) = 0. \quad (4.42)$$

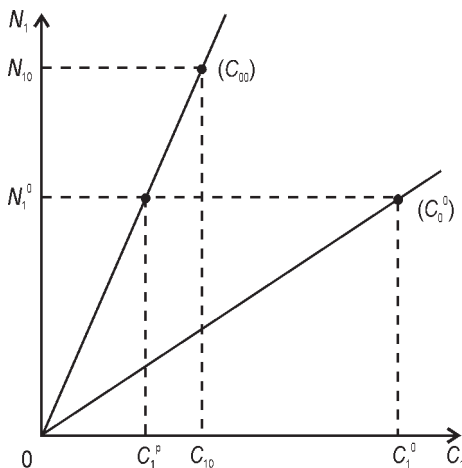


Рис. 4.6. График к оценке равновесной концентрации C_1^p (линейная изотерма при $C_0^0 > C_{00}$).

В рассматриваемом случае гомовалентного обмена (4.29) $N_v C_1^p / C_{00} = N_v C_1^0 / C_0^0$, откуда

$$C_1^p = \frac{C_1^0 C_{00}}{C_0^0}. \quad (4.43)$$

Соотношение (4.42) справедливо для любых форм изотерм обмена. Рассмотрим, например, изотерму обмена 1:2, определяемую формулами (4.30) и (4.30а) при $z = -1$:

$$N_1 = \frac{K_{12} C_1^2}{2(C_0 - C_1)} \left[\sqrt{1 + \frac{4N_v (C_0 - C_1)}{K_{12} C_1^2}} - 1 \right]. \quad (4.44)$$

Отсюда следует, что условие $N_1 = \text{const}$ соблюдается только в том случае, если отношение $C_1^2 / (C_0 - C_1)$ сохраняет одинаковые значения с обеих сторон анионного фронта (Charbeneau, 1981):

$$\frac{(C_1^p)^2}{C_{00} - C_1^p} = \frac{(C_1^0)^2}{C_0^0 - C_1^0}, \quad (4.45)$$

откуда

$$C_1^p = \frac{1}{2} \frac{(C_1^0)^2}{C_0^0 - C_1^0} \left[\sqrt{1 + \frac{4C_{00}(C_0^0 - C_1^0)}{(C_1^0)^2}} - 1 \right]. \quad (4.46)$$

Можно показать, что концентрация катионов C_1^P в пределах переходной зоны может колебаться в широком диапазоне значений в зависимости от соотношения содержаний ионов во внедряющемся и пластовом растворах, причем C_1^P может даже превышать значение входной концентрации C_{10} . Последнее свидетельствует о том, что десорбция катиона может происходить и в том случае, когда его концентрация в вытесняющем растворе превышает фоновые значения.

В общем случае гетеровалентного обмена равновесная концентрация C_1^P находится по формуле

$$C_1^P/C_{00} = \delta(z) + \frac{z}{2\alpha} \left[1 - \sqrt{1 + 4\alpha} \right], \quad (4.47)$$

где $\alpha = C_{00} \left[\frac{(C_1^0)^{z_2}}{(C_2^0)^{z_1}} \right]^z$; здесь $z = z_1 - z_2$, $C_2^0 = C_0^0 - C_1^0$; единичная функция $\delta(z)$ определяется так же, как в формуле (4.30).

Координата заднего фронта поршневого вытеснения при выпуклой изотерме контролируется величиной дополнительной емкости Δn_1 :

$$x_{C_{10}} = \frac{vt}{n + \Delta n_1}, \quad (4.47a)$$

где $\Delta n_1 = \Delta N_1 / \Delta C_1^P = (N_{10} - N_1^0) / (C_{10} - C_1^P)$. График линий характеристик имеет вид, как показано на рис. 4.5, в. В случае вогнутой изотермы скорость движения концентрационных точек заднего фронта индивидуальна (рис. 4.5, з).

4.2.3. Ионный обмен при конвективно-дисперсионном переносе

Описание ионообменных взаимодействий в потоках с дисперсией требует рассмотрения задачи в более общей постановке, учитывающей, в частности, что процесс протекает в условиях непостоянства концентрации анионов в растворе. Исходная система дифференциальных уравнений баланса масс (для общего случая двухкомпонентной системы) имеет вид

$$n \frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial N_i}{\partial t} + L(C_i) = 0, \quad i = 1, 2, \quad (4.48a)$$

$$n \frac{\partial C_0}{\partial t} + L(C_0) = 0, \quad (4.48б)$$

причем уравнение для интенсивности равновесного ионного обмена может быть представлено в форме (Charbeneau, 1981)

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = \sum_{j=1}^2 (\partial N_i / \partial C_j) (\partial C_j / \partial t), \quad i = 1, 2; \quad (4.48в)$$

здесь $L(C_i) = v \partial C_i / \partial t + D_L \partial^2 C_i / \partial x^2$ — дифференциальный оператор для одномерного конвективно-дисперсионного переноса i -го катиона; $L(C_0)$ — то же для аниона.

Очевидно, что решение сформулированной задачи возможно только на численных моделях, использование которых позволяет наряду с дисперсионными эффектами исследовать влияние переменных граничных условий, которые, как и в случае нелинейной сорбции, приводят к «шоковым» эффектам в пласте. Формально говоря, роль гидродисперсии неоднозначна: с одной стороны, она приводит к прямому размыву катионных фронтов, а с другой — обуславливая рассеяние анионов, текущие концентрации которых контролируют эффективную емкость среды [см. (4.28)], может повлиять на интенсивность перемещения этих фронтов и на их форму.

Существуют несложные аналитические приемы, позволяющие сократить число дифференциальных уравнений в системе (4.48), исключив, например, транспортное уравнение для одного из катионов, рассматривая его влияние на процесс обмена опосредованно, — в коэффициентах уравнения, описывающего перенос другого катиона (Rubin, James, 1973; Lewis et al., 1986). Такой подход использовался, например, при анализе некоторых частных задач, которые иллюстрируются следующими численными примерами.

Пример 1. На рис. 4.7 представлены результаты моделирования одномерного конвективно-дисперсионного переноса, сопровождающегося ионным обменом одновалентных ионов при коэффициенте селективности $K_{12} = 1$ — линейная изотерма (4.29). Условия задачи, заимствованные из статьи А. Валоччи с соавторами (Valocchi et al., 1981), следующие. Действительная скорость миграции химически неактивных частиц (компонентов) $u = 0.369$ м/ч; пористость породы $n = 0.3$; коэффициент продольной гидродисперсии $\delta_L = 0.187$ м; ионообменная емкость породы $N_v = 12$ мг-экв/л. Начальные условия: $C_0(x, t = 0) = C_0^0 = 100$ мг-экв/л; $C_1(x, t = 0) = C_1^0 = 20$ мг-экв/л. Граничные условия: $C_0(x = 0, t) = C_{00} = 10$ мг-экв/л; $C_1(x = 0, t) = C_{10} = 9.5$ мг-экв/л.

Кривые распределения $C_0(x)$ (рис. 4.7, а) монотонны и имеют типичный для конвективно-дисперсионного процесса вид — положение концентрационной точки $C_0 = 0.5$ отвечает текущей координате фронта вы-

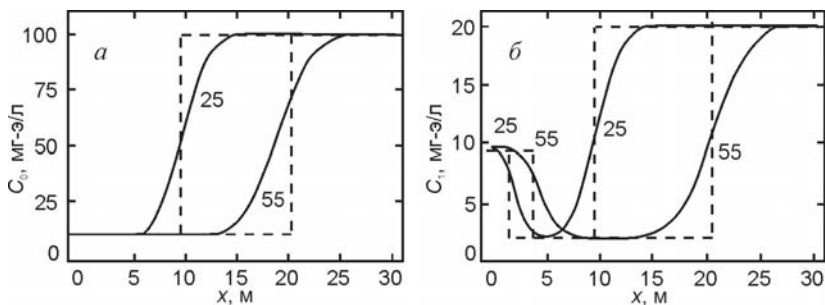


Рис. 4.7. Результаты сопоставления результатов моделирования задачи одномерной гидродисперсии компонентов, участвующих в ионном обмене (сплошные кривые), и аналитических расчетов по схеме поршневого вытеснения (штриховые линии).

Числа у кривых — время t_p , ч.

теснения $x_0 = ut_p$ ($t_p = 25$ и 55 ч — расчетные моменты времени) — штриховые линии на графике. Концентрационные кривые катиона 1 (рис. 4.7, б) немонотонны и характеризуются наличием платообразного участка $C_1 = C_1^p < C_{10} < C_1^0$, отделяющего пластовую воду от гранично-го раствора, внедряющегося в пласт.

Нанесем на график рис. 4.7, б линии, отвечающие положению контакта вод C_1^0 с исходными (вытесняемыми) водами (передний фронт), а также с вытесняющим раствором C_{10} (задний фронт) в предпосылке поршневого (без дисперсии) движения компонентов. Если координата передового фронта очевидна ($x_0 = ut_p$), то для расчета текущего положения заднего фронта надо воспользоваться формулой (4.47а), переписанной в виде

$$x_{C_{10}} = \frac{ut}{1 + \Delta n_1/n},$$

$$\Delta n_1 = \frac{N_1(C_{10}) - N_1(C_1^0)}{C_{10} - C_1^p} = \frac{N_v \cdot 1 \cdot 9.5/10 - N_v \cdot 1 \cdot 20/100}{9.5 - 2} = 1.2.$$

В этой формуле для определения концентрации $N_1(C_1)$ использовалась изотерма (4.29) (случай $K_{12} = 1$), концентрация C_1^p рассчитывалась по формуле (4.43): $C_1^p = 20 \cdot 10/100 = 2$ мг-экв/л. В результате получаем $x_{C_{10}}$ ($t_p = 25$ ч) = 1.85 м, $x_{C_{10}}$ ($t_p = 55$ ч) = 4.06 м.

Вид графиков, отвечающих двум моделям, различается главным образом контрастностью фронтов: гидродисперсия размывает контакт зон, различающихся содержанием компонентов. В то же время следует отметить, что и модель, и аналитический расчет дали одно и то же значение C_1^p , а положение средних точек переходных зон практически отвечают координатам фронтов, рассчитанных на основе аналитических зависимостей.

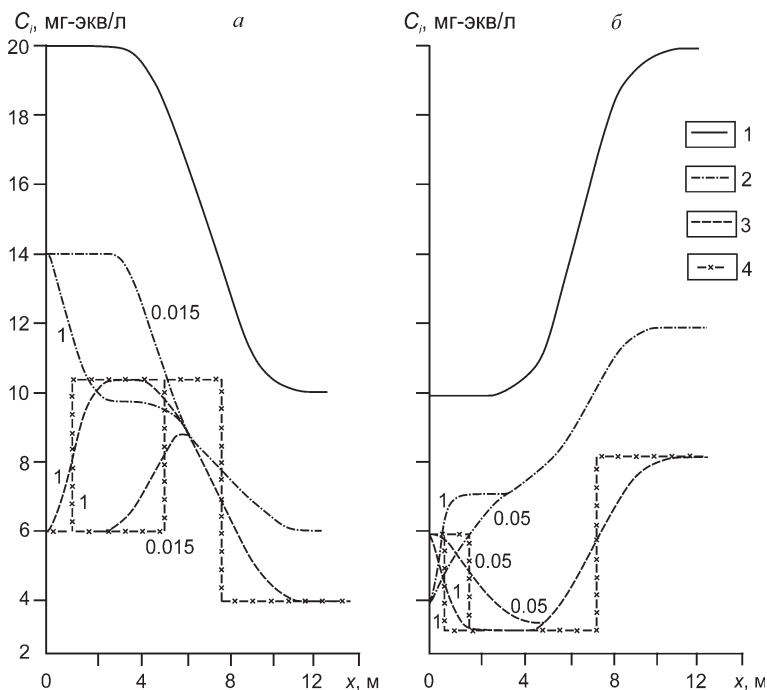


Рис. 4.8. Результаты численного моделирования и аналитических расчетов массопереноса с учетом гетеровалентного (2:1) ионного обмена.

$z_1 = 2; z_2 = 1; N_v = 10$ мг-экв/л, $v = 0.5$ м/сут; $n = 0.1; D_L = 0.09$ м²/сут; $t_p = 1.5$ сут. Числа на графиках — параметр $K^* = K_{12}N_v/C_{00}$. *a* — $C_{00} = 20; C_0^0 = 10, C_{10} = 6, C_1^0 = 4$ мг-экв/л; *б* — $C_{00} = 10, C_0^0 = 20, C_{10} = 6, C_1^0 = 8$ мг-экв/л. Концентрационные профили: 1 — анионов; 2 — вытесняемого катиона; 3 — вытесняющего катиона (конвективно-дисперсионный перенос — результаты моделирования); 4 — вытесняющего катиона (поршневое вытеснение — аналитический расчет).

Пример 2. В отличие от предыдущего примера, в рамках одномерной модели рассматривался гетерогенный ионный обмен 2:1 — нелинейная изотерма (4.30) (Румынин и др., 1988). Авторы программного кода — П. К. Коносавский и Л. Савадина. Также выполнено сравнение численного решения задачи конвективной дисперсии с аналитическим расчетом по схеме поршневого вытеснения (рис. 4.8). На рисунке видно, что в зависимости от соотношения концентраций ионов в вытесняющем и вытесняемом растворах концентрационные распределения C_1 и C_2 имеют различный вид. В частности, в одном случае (рис. 4.8, *a*) графики $C_1(x)$ имеют минимумы, а в другом случае (рис. 4.8, *б*) — максимумы. Модельные решения показали их близость к аналитическим расчетам — если говорить о погрешностях в оценках положения на восходящих и нисходящих ветвях индикаторных графиков характерных точек с относительной концентрацией $\bar{C}_i = 0.5$, которые могут соотноситься с расчетными координатами

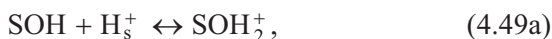
фронтов поршневого вытеснения (рис. 4.8). Во всех случаях эти погрешности не превышали 10 %. То же самое можно сказать о сопоставимости пиковых значений концентраций катионов в пределах переходных зон десорбции вытесняемого катиона с расчетными значениями $C_1^p(C_2^p)$ (4.47).

Таким образом, наблюдаемое гидродисперсионное «размывание» фронтов и соответствующее сглаживание экстремумов концентрационных функций не вносят принципиальных изменений в характер полученных ионных распределений, так что в масштабе прогнозных (региональных) задач этими эффектами, по всей видимости, можно пренебречь.

4.3. Модель поверхностного комплексообразования

В 1970—1980 гг. были достигнуты значительные успехи в развитии теории термодинамического описания взаимодействия растворенных компонентов и минеральных поверхностей. Особое внимание было уделено развитию представлений, положенных в основу моделей поверхностного комплексообразования (Davis, Kent, 1990; Goldberg, 1995; Banwart, 1997; Appelo, Postma, 2005), которые могут дополнять или служить альтернативой моделям ионного обмена. Ключевой является идея описания межфазовых (на границе раствор-порода) реакций, подобно тому как это делается для реакций комплексообразования в растворах (Goldberg, 1995; разд. 4.5.1).

В классической теории поверхностного комплексообразования сорбция описывается в терминах реакций между растворенными компонентами и *поверхностными функциональными группами* SOH, причем S символизирует собой ион металла в составе минеральной структуры, расположенный на границе раздела минерал-жидкость, а OH представляет реактивный гидроксил, находящийся в термодинамическом равновесии с ионом металла S. Поверхностные функциональные группы влияют на электрические свойства контакта фаз, а их плотность контролирует адсорбционную емкость породы. Модель двухосновной кислоты используется для того, чтобы описать комбинацию двух основных равновесных реакций (комплексообразования) протонирования (SOH_2^+) и депротонирования (SO^-)



Сорбция ионов описывается также реакциями поверхностного комплексообразования, например:

— для одновалентного катиона



— для двухвалентного катиона



или, если катион участвует в адсорбционно-гидролизном типе реакции,



— для одновалентных анионов



— для двухвалентных анионов



Здесь M^{z+} — ион металла с зарядом z^+ ; A^{z-} — лиганд-ион с зарядом z^- ; подстрочный индекс s обозначает поверхность. Таким образом, SCM модель рассматривает ионную сорбцию подобно реакции комплексообразования в растворе (Goldberg, 1995). Константы равновесия определяются согласованием сорбционных данных и потенциометрического титрования.

Считается, что данные типы взаимодействия достаточно характерны для минеральных сред, представленных оксидами (например, SiO_2 и Al_2O_3) и аморфными окислами железа (общая химическая формула $\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$), переходящими со временем в гетит $\alpha\text{-FeOOH}$. Аморфные окислы железа (общепринятое сокращение НФО — hydrous ferric oxides) — вещества с рыхлой кристаллической структурой и высокой удельной поверхностью (200—750 м²/г). Величина и знак заряда поверхности контакта НФО с водными растворами зависят от кислотно-щелочной реакции среды, pH. НФО являются достаточно распространенными соединениями, входящими в состав горных пород. Они — весьма активные сорбенты и поэтому играют важную роль в формировании сорбционных свойств пород, слагающих зону аэрации и водоносные горизонты. В реакциях соосаждения с НФО на гидрохимических барьерах может участвовать ряд загрязняющих компонентов, что также приводит к самоочищению подземных вод. Все сказанное объясняет повышенный интерес

к НФО, адсорбция на которых может описываться в рамках моделей поверхностного комплексообразования.

Таким образом, поверхностные комплексы гидроксильных функциональных групп $>SOH^0$ представлены $>FeOH^0$ (для НФО) и $>SiOH^0$ (для SiO_2).

Из формы представления реакций (4.49) видно, что поверхностное комплексообразование дает объяснение наблюдаемым в экспериментах зависимостям интенсивности адсорбции от рН, и в этом отношении данной модели трудно найти альтернативу. В результате модель поверхностного комплексообразования получает все более широкое применение в практике гидрогеологических расчетов, особенно тех из них, которые посвящены прогнозированию загрязнения подземных вод радионуклидами и тяжелыми металлами.

Поверхности большинства минералов и окислов несут электрический заряд, величина которого зависит от рН и состава контактирующего раствора. Поэтому сорбция ионов на заряженных поверхностях происходит в поле электрического потенциала ψ , определяющего различия в активности ионов в растворе $[i^{z\pm}]$ и на заряженной минеральной поверхности $[i_s^{\pm}]$:

$$[i_s^{\pm}] = [i^{z\pm}] (e^{-\psi F/RT})^{\pm z} \equiv [i^{z\pm}] (e^{-e\psi/kT})^{\pm z}. \quad (4.50)$$

где F — число Фарадея ($= eN_A = 9.64935 \cdot 10^4$ Кл·моль⁻¹; $e = 1.602 \cdot 10^{-19}$ Кл — элементарный заряд; $N_A = 6.0225 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹ — число Авагадро); R — универсальная газовая постоянная (8.314 Дж·К⁻¹·моль⁻¹); k — постоянная Больцмана ($= R/N_A = 1.3806 \cdot 10^{-23}$ Дж·К⁻¹); T — абсолютная температура (К); z — заряд иона. Экспоненциальный член $e^{-\psi F/RT}$ («фактор Больцмана») описывает электрическую работу, необходимую для преодоления электростатических сил, которые и обеспечивают различия активностей ионов.

Очевидно, что дальнейшие расчеты гидрохимического состояния системы, включающей адсорбирующиеся компоненты, должны связываться с выбором (обоснованием) электростатической схемы, позволяющей рассчитать эффективные значения потенциала ψ . Широкое распространение получила модель тройного слоя (triple-layer model) (Hayes, Leckie, 1987; Davis, Kent, 1990; Appelo, Postma, 2005). Модель постулирует существование трех типов заряженных поверхностей: α -, β - и δ (рис. 4.9).

Внутренняя α -поверхность представлена поверхностями, контролирующими реакции протонирования и депротонирова-

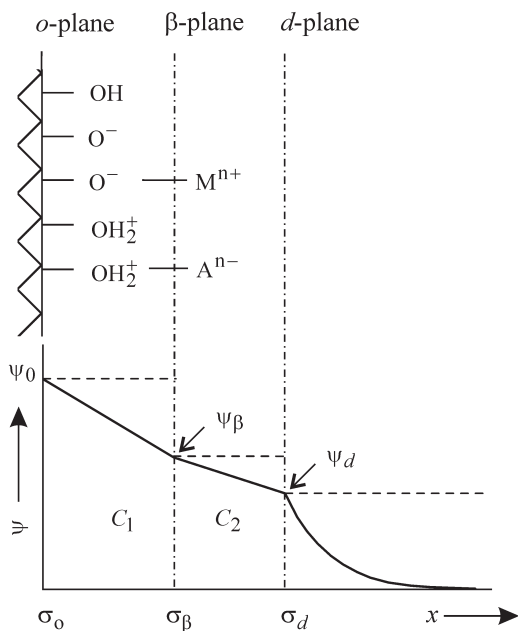


Рис. 4.9. Концептуальное представление электростатического поля границы раздела минерал-раствор и положение ионов в трехслойной модели.

ния. Все другие специфически сорбируемые ионы взаимодействуют с β -поверхностью или другими внешними слоями, каждый из которых имеет свой заряд и потенциал. В модели «триплета» слабо связанные ионы моделируются как комплексы ионных пар, а сильно связанные ионы — как поверхностно-координационные комплексы.

Для задания отношения между поверхностным зарядом и потенциалом используются две емкостные характеристики. Электрическая емкость внутреннего слоя C_1 устанавливает отношение заряда и потенциала между *o*- и β -плоскостями. Емкость внешнего слоя C_2 устанавливает отношение заряда и потенциала между β - и *d*-плоскостями. Потенциалы ψ_o , ψ_β и ψ_d характеризуют электрическое поле заряженных минеральных поверхностей (рис. 4.9).

Дальнейшие шаги построения замкнутой системы уравнений, описывающей взаимосвязанные физико-химические и электростатические равновесия, связываются с трансформацией уравнений равновесия, примером которых могут служить реакции (4.49), в систему уравнений для соответствующих констант

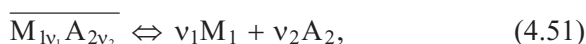
равновесий с учетом корректировочного равенства (4.50); в соответствии с этим равенством активность каждого из компонентов контролируется либо потенциалом $\psi = \psi_o$, либо $\psi = \psi_\beta$. Более подробно с модельным анализом такого рода систем можно ознакомиться в ряде публикаций (Rumynin, 2011).

4.4. Закономерности миграции компонентов, участвующих в процессах растворения/осаждения

4.4.1. Термодинамика процессов растворения/осаждения

При неограниченно длительном взаимодействии минеральной и жидкой фаз наступает равновесное состояние, при котором молекулы или ионы переходят из одной фазы в другую в эквивалентных соотношениях и с одинаковой интенсивностью. Устанавливающиеся при этом равновесные содержания i -ых компонентов в растворе отвечают так называемым концентрациям насыщения C_i^H , являющимся мерой растворимости твердых веществ. Очевидно, что такого рода равновесия в значительной степени контролируют естественный состав природных вод. Действие внешних (техногенных) факторов приводит к отклонению содержаний C от равновесных значений ($C_i \leq C_i^H$): гидрогеохимическая система приходит в неравновесное состояние, характеризующееся концентрированием дополнительного количества солей на породе (осаждение) или в растворе (растворение).

Наиболее приемлемыми для термодинамического анализа являются равновесные реакции растворения, имеющие конгруэнтный характер. Такие реакции протекают с сохранением стехиометрического соотношения компонентов в растворе и в растворяемом минерале:



где черта над буквенным символом указывает на нахождение соединения в кристаллической (твердой) фазе.

В соответствии с законом действующих масс уравнение (4.51) при активности кристаллической фазы, равной 1, может быть записано в виде ионного произведения (произведения растворимости $PP_{12} = K^\gamma$):

$$PP_{12} = a_{M_1}^{v_1} a_{A_2}^{v_2} = (\gamma_1 C_1^H)^{v_1} (\gamma_2 C_2^H)^{v_2}. \quad (4.52)$$

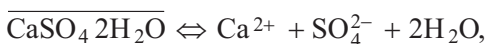
Значения констант PP_{12} для большинства труднорастворимых соединений определены и приводятся в справочной химической литературе; численные величины PP_{12} для этих веществ колеблются в весьма широком диапазоне значений (10^{-3} — 10^{-4}). Растворы, состав которых характеризуется более высокими, по сравнению с термодинамическими величинами PP_{12} , ионными произведениями, являются перенасыщенными, а с более низкими значениями соответствующего показателя — недонасыщенными по отношению к кристаллическому веществу M_1A_2 (стехиометрические индексы в формуле состава далее опускаются); растворимость последнего определяется по формуле

$$S_{12} = \left(\frac{PP_{12}}{\gamma_1^{v_1} \gamma_2^{v_2}} \right)^{1/(v_1+v_2)}. \quad (4.52a)$$

При проведении таких расчетов необходимо учитывать возможность существенных отклонений ионных концентраций C_1^H и C_2^H от суммарных (определяемых аналитически) при нахождении в растворах ионов-комплексообразователей, их присутствие увеличивает значение S_{12} .

За условную границу устойчивости исходного твердого соединения (осадка) M_1A_2 обычно принимается суммарная концентрация C_2^H равновесных с ним растворенных форм, равную 10^{-6} моль/л. Иными словами, осадок неустойчив, если он дает в той или иной гидрохимической обстановке концентрацию компонента, превышающую 10^{-6} моль/л. Это же значение принимается за критерий полноты осаждения компонентов в неравновесных процессах.

По схеме (4.51) протекают реакции растворения/осаждения таких порообразующих минералов, как кальцит, гипс, кварц, флюорит:



$$PP_{12} = 10^{-4.61}, \quad S_{12} = 5 \cdot 10^{-3};$$



(S_{12} — растворимость в моль/л).

При растворении нескольких породообразующих минералов встает вопрос о выборе равновесий, определяющих заданную активность в водном растворе того или иного иона, в составе этих минералов. Ответ на него дает простое правило: таким контролирующим равновесием является то из совокупности возможных, которое обеспечивает наименьшую активность иона. В обобщенном виде относительную устойчивость минералов в многокомпонентных системах характеризуют диаграммы их состояния (диаграммы полей преобладания компонентов и фаз).

Здесь же необходимо отметить, что существенные погрешности в такого рода расчетах обусловлены исходной предпосылкой о нахождении осаждающихся и растворяющихся минералов в стандартном состоянии, при котором их активность ($a_{M_1A_2}$) может быть принята равной 1. Достижению этого состояния могут препятствовать: повышенная степень дисперсности кристаллов и зерен, их дефекты, образование промежуточных (метастабильных) аморфных соединений с низкими показателями кинетики перекристаллизации, а также изоморфное замещение одних ионов кристаллической решетки на другие в процессе совместного осаждения нескольких веществ.

4.4.2. Простейшая модель равновесного растворения минерала в потоке подземных вод

Рассмотрение миграционных процессов целесообразно начать с упрощенных расчетных ситуаций в условиях растворения или кристаллизации солей (минералов), исключающих возможность их повторного переосаждения. Как правило, эти условия выполняются для растворов простого состава, содержащих ограниченное количество активных компонентов. Для многокомпонентных систем достаточно характерным является зональное концентрирование компонентов, обусловленное процессами переосаждения в фильтрационном потоке образованных ими солей (Миرونенко, Румынин, 1998).

Пусть в минеральном комплексе породы содержится в ограниченном количестве N_1 соль M_1A_2 , растворяющаяся по схеме (4.51) при поступлении в пласт вод, недонасыщенных компонентами M_1 и A_2 (их входные концентрации $C_1^{(0)}$ и $C_2^{(0)}$) по отношению к этой соли. С термодинамических позиций это значит, что в рассматриваемой системе выполняется соотношение

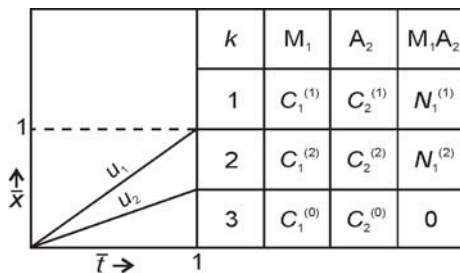


Рис. 4.10. Матрица концентрационных волн (зон) растворения при внедрении в пласт недонасыщенного раствора.

$$[C_1^{(0)}]^{v_1} [C_2^{(0)}]^{v_2} < [C_1^{(1)}]^{v_1} [C_2^{(1)}]^{v_2} = K_{12}^{pp}, \quad (4.53)$$

где $C_1^{(1)}$ и $C_2^{(1)}$ — начальные концентрации компонентов, равновесные M_1A_2 ; K_{12}^{pp} — концентрационная константа равновесия, связанная с произведением растворимости PP_{12} соотношением $K_{12}^{pp} = PP_{12}/(\gamma_1)^{v_1}(\gamma_2)^{v_2}$ (γ_1 и γ_2 — коэффициенты активности). Здесь и далее в обозначении $C_i^{(k)}$ нижний индекс отвечает номеру компонента, а верхний — номеру характерной зоны, где этот компонент концентрируется, — см. график характеристик на рис. 4.10. Предположим также, что ионы M_1 и A_2 доминируют в составе граничного раствора, т. е. $C_1^{(0)} = C_2^{(0)}$.

В данных условиях миграционный процесс формирует зону $x < u_2t$ полного растворения соли $N_1 = 0$, $C_1 = C_1^0$ ($C_2 = C_2^0$), граница («фронт») растворения которой, по мере поступления раствора в пласт смещается по потоку со скоростью $u_2 < u_1$ (u_1 — действительная скорость переноса частиц воды). Образующиеся при этом компоненты идут на насыщение раствора в пределах второй концентрационной зоны $u_2t < x < u_1t$ (рис. 4.10), где $C_1 = C_1^{(2)}$, $C_2 = C_2^{(2)}$, $N = N_1$. Так как в составе входного раствора отсутствуют ионы, которые могли бы повлиять на растворимость соли M_1A_2 , то по содержанию компонентов C_1 и C_2 эта волна неотличима от передовой волны вытесняемого раствора ($C_1^{(2)} = C_1^{(1)}$ и $C_2^{(2)} = C_2^{(1)}$).

Для того чтобы определить скорость u_2 , составим элементарное балансовое соотношение

$$N_1 u_2 t = n(C_1^{(2)} - C_1^{(0)})(u_1 - u_2)t = n(C_2^{(2)} - C_2^{(0)})(u_1 - u_2)t, \quad (4.54)$$

откуда легко показать, что скорость движения фронта волны растворения может быть рассчитана по значению эффективной емкости пород

$$n_3 = n + \Delta n \quad (4.55)$$

при $\Delta n = \Delta N_1 / \Delta C_1 = \Delta N_1 / \Delta C_2$ ($\Delta N = \Delta N_1$, $\Delta C_1 = C_1^{(2)} - C_1^{(0)}$, $\Delta C_2 = C_2^{(2)} - C_2^{(0)}$).

Более общим является случай поступления в пласт растворов, существенно отличающихся своим гидрогеохимическим обликом от пластовых вод. Например, присутствие в этих растворах нового аниона A_3 (считается, что он не может образовывать труднорастворимую соль $\overline{M_1A_3}$), который свободно (вследствие своей инертности) проникает в область второй концентрационной волны, изменяя в ее пределах соотношение концентраций $C_1^{(2)}$ и $C_2^{(2)}$. Тем самым меняется интенсивность растворения соли $\overline{M_1A_2}$, контролирующая скорость движения u_2 .

Для расчета концентраций $C_1^{(2)}$ и $C_2^{(3)}$, которые обычно отличаются как от фоновых, так и от граничных содержаний компонентов M_1 и A_2 , используется система уравнений:

$$\begin{aligned} [C_1^{(2)}]^{v_1} [C_2^{(2)}]^{v_2} &= K_{12}^{\text{пр}}, \\ z_1 C_1^{(2)} &= z_2 C_2^{(2)} + z_3 C_3^{(2)}. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Первое из них характеризует равновесную реакцию растворения, второе — условие электронейтральности раствора (z_i — заряды ионов); очевидно, что $C_3^{(2)} = C_3^{(0)}$.

Численный пример. Рассмотрим особенности миграции слабоминерализованного ($M \approx 30$ мг/л) хлоридного раствора, вытесняющего природные воды сульфатного состава, которые находятся в равновесии с сульфатом стронция ($\overline{\text{SrSO}_4}$). Исходные данные для этого примера, характеризующие начальные и граничные условия задачи, приведены в табл. 4.1 (первая и последняя строки); примем также $PP_{12} = 10^{-6.5}$, $\gamma_1 \cdot \gamma_2 = 0.817$ (расчет согласно Дебаю—Гюккелю), скорость фильтрации $v = 1.8 \cdot 10^{-2}$ см/мин, пористость пород $n = 0.32$. Приведенные значения заимствованы из работы (Willis, Rubin, 1987), где массоперенос, осложненный дисперсией солей ($\delta_L = 2/3$ см), исследовался на численной модели.

Таблица 4.1

k	C ^(k) , моль/л			$\frac{N_1, \text{ моль/л}}{\text{SrSO}_4}$
	i			
	1(Sr ²⁺)	2(SO ₄ ²⁻)	3(Cl ⁻)	
1	6.22 · 10 ⁻⁴	6.22 · 10 ⁻⁴	0	8.82 · 10 ⁻⁵
2	7.30 · 10 ⁻⁴	5.30 · 10 ⁻⁴	4 · 10 ⁻⁴	8.82 · 10 ⁻⁵
3	2.00 · 10 ⁻⁴	0	4 · 10 ⁻⁴	0

Решение системы (4.56) при $z_1 = z_2 = 2, z_3 = 1, v_1 = v_2 = 1$ позволяет рассчитать концентрации ионов Sr²⁺ и SO₄²⁻ в пределах второй концентрационной волны (табл. 4.1). Подставляя их значения в формулу (4.55a), находим $\Delta n = 0.166 \approx 0.17$. Графически решение задачи (в координатах $C_i - x$) для трех моментов времени представлено на рис. 4.11. На этот же график нанесены результаты численного моделирования. Как видно, гидродисперсия, заметно «размазывает» концентрационные фронты, одновременно сглаживает экстремумы функции C_1 , которые примерно на 15 % превышают фоновое значение $C_1^{(1)}$.

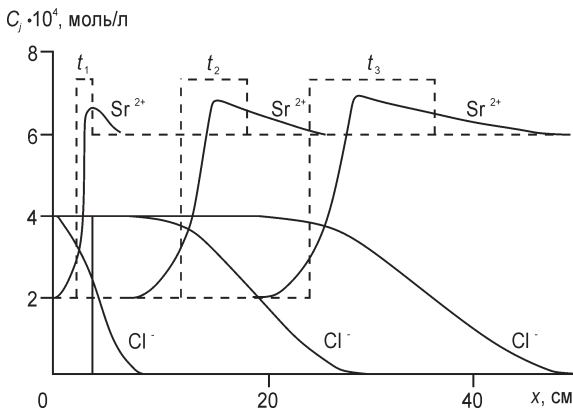


Рис. 4.11. Результаты расчета концентрационных волн Sr²⁺ и Cl⁻ при растворении SrSO₄ в процессе фильтрации Sr – Cl раствора; сплошные и пунктирные линии отвечают оценкам по схеме микродисперсии и поршневого вытеснения и ($t_1 = 62$ мин, $t_2 = 333$ мин, $t_3 = 667$ мин).

4.4.3. Процессы равновесного растворения/осаждения вещества применительно к растворам сложного состава на подвижных гидрогеохимических барьерах

4.4.3.1. Общее уравнение массового баланса

Миграция раствора, в котором каждый из i -ых химических элементов существует в нескольких связанных формах (в жидкой или твердой фазах), описывается (при $D_L = 0$) системой дифференциальных уравнений (Jennings et al., 1982; Dria et al., 1987):

$$n \frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial N_i}{\partial t} + v \frac{\partial C_i}{\partial x} = 0, \quad i = 1, \dots, I, \quad (4.57)$$

где

$$C_i = \sum_{j=1}^J h_{ij} C_j, \quad i = 1, \dots, I \quad (4.57a)$$

— суммарная концентрация i -го элемента в подвижной (жидкой) фазе, образующего J видов растворенных соединений (компонентов) в концентрациях C_j ; h_{ij} — стехиометрический коэффициент для i -го элемента в j -м соединении;

$$N_i = \sum_{s=1}^S g_{is} N_s, \quad i = 1, \dots, I \quad (4.57b)$$

— суммарная концентрация i -го элемента, образующего S видов солей (осадков, минералов) с текущими концентрациями N_s ; g_{is} — стехиометрический коэффициент для i -го элемента в s -й соли.

Система (4.57) дополняется условием минерального равновесия

$$\prod_{i=1}^I C_i^{y_i} = PPP, \quad (4.58)$$

рассматриваемым совместно с условием электронейтральности раствора.

Накопление элемента в жидкой фазе при растворении осадка (или, наоборот, концентрирование его в твердой фазе) контролирует скорость миграции вещества в фильтрационном потоке:

$$u_i = \frac{v}{n + \left(\partial \sum_{s=1}^S g_{is} N_s / \partial C_i \right)}. \quad (4.59)$$

Последнее выражение является характеристической формой представления исходной системы дифференциальных уравнений (4.57). Отгалкиваясь от него, можно получить конечные соотношения, описывающие распространения волн (зон) растворения/осаждения вещества в пористых средах.

4.4.3.2. Описание волнового режима переноса компонентов, участвующих в реакциях растворения/осаждения

Рассмотрим условия внедрения в пласт раствора, недонасыщенного в исходном состоянии ионами M_1 , M_2 и A_3 по отношению к одной из минеральных составляющих породы M_1A_3 ($C_1^{(0)} \cdot C_3^{(0)} = K_{13}^{np}$, где $C_1^{(0)}$ и $C_3^{(0)}$ — концентрации компонентов M_1 и A_3 на границе) — см. рис. 4.12 и 4.13. Это создает предпосылки для растворения соединения M_1A_3 (его начальное содержание в породе $N_1^{(1)}$). Поэтому вслед за передовой («солевой») волной, отвечающей концентрационным распределениям $C_1^{(1)}$, $C_2^{(1)}$, $C_3^{(1)}$ в зоне вытесненного раствора, с одной стороны, и в зоне насыщения вытесняющего раствора продуктами растворения (здесь $C_1^{(2)}$, $C_2^{(2)}$ и $C_3^{(2)}$, причем $C_1^{(2)} \cdot C_3^{(2)} = K_{13}^{np}$) — с другой, формируется вторая волна. Поскольку раствор во второй зоне — насыщенный, концентрация минерала M_1A_3 в ней остается неизменной $N_1^{(2)} = N_1^{(1)}$, т. е. отвечает исходному содержанию. Скорость распространения второй волны — $u_2 < u_1$, что обусловлено насыщением раствора компонентами при растворении соединения M_1A_3 .

Концентрирование раствора в области $u_2t < x < u_1t$ до значений $C_3^{(2)} > C_3^{(0)}$ препятствует свободному переходу через границу катиона M_2 , имеющего при содержаниях $C_2 = C_2^{(0)}$ потенциально более высокую (по сравнению с u_2) скорость переноса. Поэтому часть вещества при переходе через вторую концентрационную волну, выполняющую роль подвижного гидрогеохимического барьера, выпадает в осадок в виде соли M_2A_3 (замещающей соединения M_1A_3): формируется новая — третья — концентрационная зона, характеризующаяся распределением концентраций $C_1^{(3)}$, $C_2^{(3)}$ и $C_3^{(3)}$ (причем $C_2^{(3)} \cdot C_3^{(3)} = K_{23}^{np}$) — в растворе и $N_2^{(3)}$ — на породе.

Если же вещество M_2A_3 и граничный раствор равновесны, ($C_2^{(0)} \cdot C_3^{(0)} = K_{23}^{np}$), то процесс в целом приобретает метасоматический характер: происходит замещение минерала M_1A_3 на

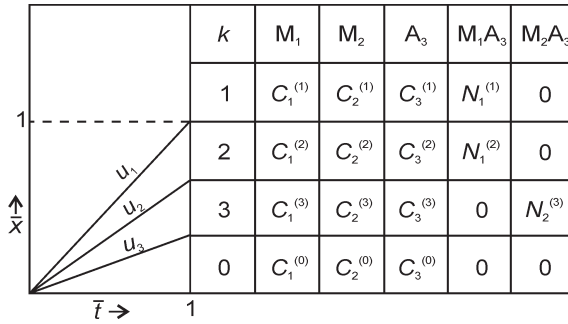


Рис. 4.12. Матрица концентрационных волн (зон) растворения/осаждения при миграции трехкомпонентного раствора.

минерал $\overline{M_2A_3}$, причем в этом случае из выражения (4.54), справедливого при $C_1^{(0)} = 0$, легко установить скорость u_2 .

Очевидно, что в более общем случае ненасыщенного раствора вблизи входной границы постепенно образуется зона полного выщелачивания солей катионов M_1 и M_2 , где $C_1 = C_1^{(0)}$, $C_2 = C_2^{(0)}$ и $C_3 = C_3^{(0)}$. Скорость смещения соответствующей концентрационной волны будет $u_3 < u_2$ (рис. 4.12).

Рассуждая подобным образом, можно определить последовательность осаждения солей при наличии в растворе других активных компонентов (Мироненко, Румынин, 1998).

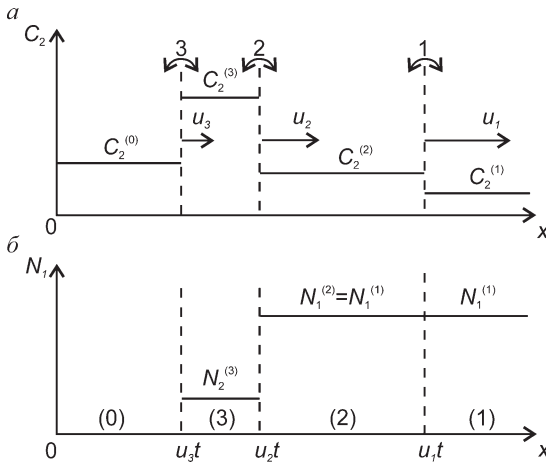


Рис. 4.13. Закономерности концентрирования одного из растворенных компонентов в пределах подвижных гидрогеохимических зон (а) и накопления твердых солей ($s = 1, 2$) на породе в этих зонах (б).

Итак, в фильтрационном потоке формируется волновой (зональный) режим переноса компонентов, концентрация которых как в растворе, так и на породе сложным образом перераспределяется между отдельными зонами, способствуя разубоживанию или концентрированию в них веществ. Последовательно сменяющие друг друга волны осаждения/растворения (например, тяжелых металлов) резко замедляют перенос, но могут теоретически приводить к образованию новых токсичных соединений, даже если исходный раствор был нетоксичным. Поэтому наряду с качественным описанием рассмотренного процесса особую значимость приобретают количественные оценки, которые могут быть получены, если придерживаться правил, сформулированных в работе (Dria et al., 1987):

1) равновесные концентрации компонентов в жидкой фазе какой-либо из фиксированных зон контролируются как величиной растворимости (произведением растворимости — K_{ij}^{np}) соли, осаждающейся из раствора в пределах данной зоны, так и значением аналогичного параметра для соли, осажденной в пределах концентрационной зоны выше по потоку;

2) состав ионов в зоне, расположенной ниже по потоку, определяется осажденными в ее пределах солями, а также компонентами (в жидкой и твердой фазах) предшествующей, расположенной выше по потоку, зоны;

3) концентрация соли в твердой фазе зоны, расположенной выше по потоку, контролируется содержанием твердых солей в пределах нижерасположенной зоны и концентрацией компонентов в жидкой фазе обеих зон;

4) волновые скорости миграции на границе двух смежных зон всех i -ых компонентов равны.

Последнее правило, выражающее так называемый принцип когерентности, имеет следующее математическое представление:

$$u_k = \frac{v}{n + \Delta n_1^{(k)}} = \frac{v}{n + \Delta n_2^{(k)}} = \dots = \frac{v}{n + \Delta n_i^{(k)}}, \quad (4.60)$$

где $\Delta n_i^{(k)}$ — дополнительная емкость пород, контролирующая скорость движения всех i -ых компонентов k -й волны:

$$\Delta n_i^{(k)} = \frac{(g_{is} N_s)^k - (g_{is} N_s)^{k+1}}{C_i^k - C_i^{k+1}}, \quad (4.60a)$$

g_{is} — стехиометрический коэффициент; при $k = 1$, $N_s^{(1)} = N_s^{(2)}$, и тогда $n_i^{(1)} = 0$, а $u_1 = v/n$.

Соотношение (4.60а) остается справедливым и при осаждении в пределах любой концентрационной волны нескольких ($s = 1, \dots, S$) солей i -го элемента, причем в этом варианте:

$$\Delta n_i^{(k)} = \frac{\left(\sum_{s=1}^S g_{is} N_s \right)^k - \left(\sum_{s=1}^S g_{is} N_s \right)^{k+1}}{C_i^k - C_i^{k+1}}. \quad (4.60б)$$

Из условия когерентности (4.60) следуют балансовые соотношения

$$\Delta n_1^{(k)} = \Delta n_2^{(k)} = \dots = \Delta n_i^{(k)} = \Delta n^{(k)}, \quad (4.60в)$$

позволяющие рассчитывать концентрации солей N_s в каждой $(k+1)$ -й зоне при известных значениях $N_s^{(k)}$ и $C_i^{(k)}, C_i^{(k+1)}$.

Рассмотрим последовательность расчетов для гидрогеохимической системы, представленной на рис. 4.12. Так как здесь во второй зоне происходит осаждение соли M_1A_3 , то следует записать:

$$\begin{cases} [C_2^{(3)}]^{v_2} [C_3^{(3)}]^{v_3} = K_{23}^{\text{нр}}, \\ z_1 C_1^{(3)} + z_2 C_2^{(3)} = z_0 C_0 + z_3 C_3^{(3)}, \\ C_1^{(3)} = C_1^{(0)}, \end{cases} \quad (4.61)$$

где $z_0 C_0 = z_1 C_1^{(0)} + z_2 C_2^{(0)} + z_3 C_3^{(0)}$ — эквивалентная концентрация избыточного иона. Отсюда находим значения $C_2^{(3)}$ и $C_3^{(3)}$. Другая система уравнений, описывающих равновесие в первой зоне, имеет вид:

$$\begin{cases} [C_1^{(2)}]^{v_1} [C_2^{(2)}]^{v_2} = K_{12}^{\text{нр}}, \\ [C_2^{(2)}]^{v_2} [C_3^{(2)}]^{v_3} = K_{23}^{\text{нр}}, \\ z_1 C_1^{(2)} + z_2 C_2^{(2)} = z_0 C_0 + z_3 C_3^{(2)}. \end{cases} \quad (4.62)$$

Ее решение дает еще три неизвестных величины $C_1^{(2)}, C_2^{(2)}$ и $C_3^{(2)}$. Таким образом, концентрационное поле по жидкой фазе определено. Теперь, воспользовавшись соотношениями (4.60а) и (4.60в) при $g_{is} = 1$, получаем:

$$\frac{N_1^{(2)}}{C_1^{(2)} - C_1^{(3)}} = -\frac{N_2^{(3)}}{C_2^{(2)} - C_2^{(3)}} = \frac{N_1^{(2)} - N_2^{(3)}}{C_3^{(2)} - C_3^{(3)}}. \quad (4.63)$$

Отсюда легко находится $N_2^{(3)}$ при заданном содержании $N_1^{(2)} = N_1^{(1)}$. Окончательное решение миграционной задачи определяют эффективные параметры:

$$\Delta n^{(2)} = \frac{N_1^{(1)}}{C_1^{(2)} - C_1^{(3)}},$$

$$\Delta n^{(3)} = \frac{(C_2^{(2)} - C_2^{(3)})N_1^{(1)}}{(C_2^{(3)} - C_2^{(0)})(C_1^{(2)} - C_1^{(3)})}. \quad (4.64)$$

4.4.3.3. Примеры миграционных расчетов

Пример 1. Достаточно характерными минералами, находящимися в водоносных породах в рассеянном состоянии, являются гипс ($\overline{\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}}$) и кальцит ($\overline{\text{CaCO}_3}$). Внедрение техногенных растворов нередко приводит к растворению и переотложению этих минералов, которые замещаются слаборастворимыми солями компонентов-загрязнителей.

В табл. 4.2 приведены результаты расчетов загрязнения водоносного пласта ионами свинца Pb^{2+} (M_2), выпадающими в осадок на подвижном гидрогеохимическом барьере между водами SO_4^{2-} (A_3)— Ca^{2+} (M_1) состава в виде минерала англазита PbSO_4 (M_2A_3). Вычисление дополнительной емкости пород для двух характерных гидродинамических зон по формулам (4.64) дает $\Delta n^{(2)} = 0.52 \cdot 10^3 \cdot N_1^{(1)}$ и $\Delta n^{(3)} = 1.1 \cdot 10^3 N_1^{(1)}$ (C_i, N_i — в моль/л). Обратим внимание на накопление свинца в третьей зоне до концентрации $C_2^{(3)} = 3.99 \cdot 10^{-5}$ моль/л (8.3 мг/л) — при концентрациях его в граничном растворе $C_2^{(0)} = 2.41 \cdot 10^{-5}$ моль/л (5 мг/л).

Таблица 4.2

k	$M_1 (\text{Ca}^{2+})$	$M_2 (\text{Pb}^{2+})$	$A_3 (\text{SO}_4^{2-})$	$\overline{M_1 A_3} (\overline{\text{CaSO}_4})$	$\overline{M_2 A_3} (\overline{\text{PbSO}_4})$
	$C_1^{(k)}$	$C_2^{(k)}$	$C_3^{(k)}$	$N_1^{(k)}$	$N_2^{(k)}$
2	$10.9 \cdot 10^{-3}$	$0.56 \cdot 10^{-5}$	$2.24 \cdot 10^{-3}$		0
3	$9.0 \cdot 10^{-3}$	$3.99 \cdot 10^{-5}$	$0.316 \cdot 10^{-3}$	0	$1.76 \cdot 10^{-2} N_1^{(1)}$
0	$9.0 \cdot 10^{-3}$	$2.41 \cdot 10^{-5}$	$0.30 \cdot 10^{-3}$	0	0

$$K_{13}^{\text{нр}} = 2.45 \cdot 10^{-5}; K_{23}^{\text{нр}} = 1.26 \cdot 10^{-8}.$$

Пример 2. Он касается анализа процесса вытеснения $\text{Ca}^{2+}(M_1)$ — $\text{SO}_4^{2-}(A_2)$ — раствора, находящегося в равновесии с гипсом $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (M_1A_2), содовыми водами, содержащими в повышенных концентрациях ионы $\text{CO}_3^{2-}(A_3)$. В этом случае исходный минерал на отрезке $u_2t < x < u_3t$ замещается кальцитом CaCO_3 (M_1A_3). Закономерности процесса характеризуются расчетными величинами, приведенными в табл. 4.3.

Таблица 4.3

k	$M_1 (Ca^{2+})$	$A_2 (SO_4^{2-})$	$A_3 (CO_3^{2-})$	$\overline{M_1 A_2} (CaSO_4)$	$\overline{M_1 A_3} (CaCO_3)$
	$C_1^{(k)}$	$C_2^{(k)}$	$C_3^{(k)}$	$N_1^{(k)}$	$N_2^{(k)}$
2	$4.457 \cdot 10^{-3}$	$5.474 \cdot 10^{-3}$	$7.39 \cdot 10^{-3}$		0
3	$2.299 \cdot 10^{-6}$	0	$1.0033 \cdot 10^{-3}$	0	$0.183 N_1^{(1)}$
0	0	0	10^{-3}	0	0

$$K_{12}^{np} = 2.45 \cdot 10^{-5}; K_{13}^{np} = 3.31 \cdot 10^{-9}.$$

Для определения скоростей движения гидрогеохимических границ u_2 и u_3 в соответствии с зависимостями (4.64) получены значения эффективных параметров $\Delta l^{(2)} = 1.83 \cdot 10^2 N_1^{(1)}$ и $\Delta l^{(3)} = 5.5 \cdot 10^4 N_1^{(1)}$.

4.5. Модели многокомпонентного переноса

Рассмотренные выше модели, несмотря на то что в них учитывались сорбция и распад, оставались, по сути, гидродинамическими моделями, пригодными для описания миграции фиксированного компонента в неизменных термодинамических условиях, когда, собственно, движения раствора не могло повлиять на эти условия, а сам компонент не мог изменить свою химическую активность в новых условиях. К сожалению, такие идеалистические сценарии геомиграции не всегда реализуются в природной обстановке и тем более в условиях техногенеза. Довольно часто загрязняющий компонент вступает в химическое взаимодействие не только с породой по простейшей схеме линейной сорбции, но и с другими участниками миграционного процесса, формируя подвижные частицы с другими параметрами межфазового обмена. Поэтому для корректного описания миграции необходимо учитывать еще целый ряд реакций и многокомпонентный характер системы в целом. Одним из видов таких реакций является комплексообразование, которое до сих пор нами не рассматривалось.

4.5.1. Комплексообразование с участием неконсервативных компонентов

Данный процесс отражает формирование в природных растворах наряду с диссоциированными ионами ионных и молекулярных ассоциаций (в том числе органических) различной степени сложности, называемых комплексными соединениями

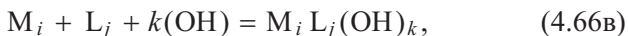
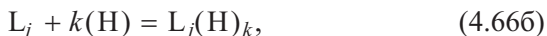
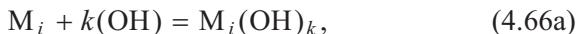
(Гаррелс, Крайст, 1968; Крайнов, Швец, 1980; Тютюнова, 1987). К таким прежде всего относятся устойчивые заряженные или электронейтральные образования, состоящие из иона металла (комплексообразователя M_i) и иона, группы ионов или электронейтральных молекул (лигандов — L_j). В принятых обозначениях, опуская валентности, общую формулу комплексного соединения можно представить в виде $M_i(L_j)_k$ (k — координационное число). Простейшие реакции комплексообразования неорганических соединений протекают путем последовательного присоединения к центральным ионам лигандов (при одновременно идущих обратных реакциях диссоциации промежуточных соединений) по схеме



$i = 1, \dots, m; j = m + 1, \dots, m + l$ (m и l — число ионов — комплексообразователей и лигандов).

Реакции комплексообразования (4.65) отвечает константа устойчивости комплексного соединения K_{ijk} , численные значения которой при известных значениях стандартных свободных энергий образования соответствующих равновесных форм рассчитываются известными термодинамическими методами (Гаррелс, Крайст, 1968).

Параллельно с процессом (4.65) в водных растворах обычно идут реакции гидратации и протонирования ионов — комплексообразователей и лигандов с образованием комплексов $M_i(OH)_k$, $L_j(H)_k$, $M_iL_j(OH)_k$, $M_iL_j(H)_k$. Эти реакции могут быть формализованы следующим образом (Jennings et al., 1982):



Очевидно, эти реакции контролируются кислотно-щелочными условиями среды (рН).

Процесс комплексообразования, в частности реакции (4.65)—(4.66), дает объяснение многообразию водных форм миграции одного и того же химического элемента, который может находиться в соединениях, различающихся зарядом, моле-

кулярной массой и размером. Характер участия того или иного элемента в физико-химических процессах определяется не только (а часто и не столько) его общим содержанием в растворах, как это подразумевалось нами ранее, но и степенью дифференциации элемента по отдельным группам водорастворенных соединений. Первостепенный интерес представляет определение истинного содержания в мигрирующих растворах ионных форм элементов, принимающих наиболее активное участие в межфазовых превращениях.

Поскольку каждой реакции комплексообразования (4.65)—(4.66) соответствует свое уравнение для константы равновесия (в данном случае константы устойчивости комплексного соединения) K_{ijk} , K_{ik}^{OH} , K_{jk}^{H} , K_{ijk}^{OH} , K_{ijk}^{H} , то нетрудно найти обобщенные соотношения между суммарными (практически определяемыми) концентрациями металлов C_i^{T} и лигандов C_j^{T} и парциальными концентрациями этих компонентов в химически несвязанных формах C_i и C_j :

$$C_i^{\text{T}} = C_i(1 + B_{Ci}); \quad C_j^{\text{T}} = C_j(1 + B_{Li}); \quad (4.67)$$

$$B_{Ci} = \sum_k K_{ik}^{\text{OH}} [\text{OH}]^k + \sum_j \sum_k \{K_{ijk} C_j^k + K_{ijk}^{\text{H}} C_j [\text{H}]^k + K_{ijk}^{\text{OH}} C_j [\text{OH}]^k\}, \quad (4.67a)$$

$$B_{Li} = \sum_k K_{jk}^{\text{H}} [\text{H}]^k + \sum_i \sum_k \{kK_{ijk} C_i C_j^{k-1} + K_{ijk}^{\text{H}} C_i [\text{H}]^k + K_{ijk}^{\text{OH}} C_i [\text{OH}]^k\}, \quad (4.67b)$$

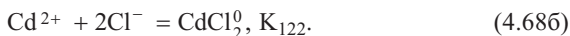
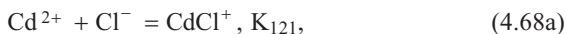
где B_{Ci} и B_{Li} — коэффициенты, определяющие степень закомплексованности элементов; $[\text{H}]$ и $[\text{OH}]$ — концентрации ионов водорода и гидроксидов. Здесь и далее размерность концентраций — [моль/л].

Запись балансовых формул (4.67) основывается на крайне упрощенном представлении уравнений для констант устойчивости комплексов, приравнявшем активности концентрациям, что приемлемо для весьма разбавленных растворов.

Численные значения констант K_{ijk} , K_{ik}^{OH} , K_{jk}^{H} , K_{ijk}^{OH} , K_{ijk}^{H} , входящих в уравнение (4.67a)—(4.67b), при известных значениях стандартных свободных энергий образования соответствующих равновесных форм могут быть рассчитаны известными термодинамическими методами. Решение алгебраической системы (4.67) позволяет определить (в статических условиях!) концент-

рации C_i и C_j ; при необходимости, базируясь на уравнениях для констант устойчивости, рассчитывают и другие вероятные формы миграции элементов.

Пример. Пусть в хлоридном растворе, содержащем ион кадмия Cd^{2+} (тяжелый металл), протекают следующие реакции комплексообразования:



Для этих реакций $\log K_{121} = 1.8$ и $\log K_{122} = 2.2$, поэтому

$$B_{C1} = 10^{1.8} C_2 + 10^{2.2} C_2^2,$$

$$B_{L2} = 10^{1.8} C_1 + 10^{2.2} C_1 C_2.$$

Таким образом, если известны суммарные концентрации C_1^T и C_2^T , то, решая систему уравнений (4.67), находим значения концентраций C_1 и C_2 (Cd^{2+} и Cl^-).

Особую группу соединений составляют металлоорганические комплексы: сильными комплексообразователями в природных водах являются фульво- и гуминовые кислоты (Крайнов, Швец, 1980); для техногенных стоков характерна комплексообразователи ионов металлов с синтетическими органическими веществами. Несмотря на массовый характер миграции элементов (особенно микрокомпонентов) в форме органокомплексов, анализ процесса обычно затруднен ввиду дефицита термодинамической информации. Только в последнее время в литературе начинают появляться более-менее достоверные данные о термодинамических параметрах такого рода систем.

Так, в работе (Тютюнова, 1987) приведены результаты определения констант устойчивости K_{121} хелатных комплексов, образованных ионами тяжелых металлов с фульвокислотами (ФК) и нитрилтриуксусной кислотой (НТА) по схеме (4.65, $i = 1, j = 2, k_1 = 1$) — см. нижеследующую таблицу.

L ₂	M ₁					
	Mn ²⁺	Ni ²⁺	Zn ²⁺	Cd ²⁺	Pb ²⁺	Cu ²⁺
НТА	1.65 · 10 ⁷	7.83 · 10 ⁸	8.23 · 10 ⁹	9.39 · 10 ⁷	2.44 · 10 ⁸	6.48 · 10 ¹⁰
ФК	5.41 · 10 ³	4.85 · 10 ⁴	2.82 · 10 ³	2.18 · 10 ³	4.34 · 10 ³	6.32 · 10 ⁶

Обычно считается, что наиболее сорбируемым является ион металла, а водорастворенные комплексы менее сорбируемы, или даже их сорбцией

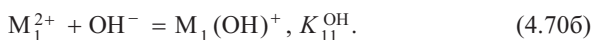
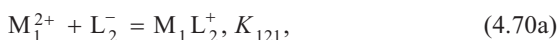
можно вовсе пренебречь. В последнем случае расчетный коэффициент сорбционного распределения зависит от степени закомплексованности иона металла:

$$K_d(K_a) = \frac{K_{d1}(K_{a1})}{(1 + B_{Ci})}, \quad (4.69)$$

где $K_{d1}(K_{a1})$ — коэффициент распределения для ионной формы металла.

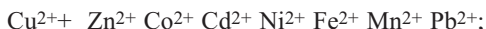
Зависимость (4.69) дает качественное объяснение часто наблюдаемому расхождению в расчетных значениях констант распределения K_d , определяемых в идеализированных (лабораторных) и полевых условиях. В ряде работ отмечается многократное (более чем на порядок) уменьшение величин K_d , найденных в полевых условиях для ионов тяжелых металлов в органических комплексах, — по сравнению со значениями K_d для их ионных форм (лабораторные определения).

Экспериментальные исследования (Тютюнова, 1987; Мироненко, 2005) свидетельствуют о возможности сорбции положительно заряженных комплексных форм M_1L_2 , $M_1(OH)^+$, $M_1(NO_3)^+$, где M_1 — ион тяжелого двухвалентного металла или радионуклида (например, Sr-90):



Так, в работе (Тютюнова, 1987) можно найти значения коэффициентов распределения хлоридных M_1Cl^+ и гидроксидных $M_1(OH)^+$ комплексов тяжелых металлов (M_1^{2+} : Pb²⁺, Cu²⁺, Zn²⁺, Ni²⁺, Mn²⁺, Co²⁺, Pb²⁺ Cd²⁺, Fe²⁺) при их сорбции на песчаном и супесчаном материале. Полученные результаты свидетельствуют:

1) интенсивность сорбции свободных катионов возрастает с ростом потенциала ионизации, так что они образуют ряд:



2) за некоторыми исключениями, комплексные формы сорбируются слабее, чем их катионные основания;

3) во всех вариантах наблюдается уменьшение констант сорбционного равновесия с ростом ионной силы растворов (минерализации подземных вод).

Уменьшение расчетных значений коэффициента распределения за счет присутствия в растворе иона-комплексобразования (4.69) увеличивает потенциал массопереноса загрязняющих компонентов, что будет показано далее на конкретных примерах (разд. 16.1).

4.5.2. Модельные подходы к описанию миграции многокомпонентных растворов

Обращение к моделям многокомпонентного переноса позволяет избавиться от ряда недостатков, свойственных однокомпонентным моделям с эффективными коэффициентами в изотермах сорбции (например, K_d в случае линейной изотермы). О причинах возможного несоответствия прогнозных (расчетных) и реальных концентрационных распределений, возникающих за счет непостоянства величины K_d , будет дополнительно сказано в разд. 15.2.1. Существует два основных подхода (алгоритма) для интеграции физико-химических взаимодействий в общий миграционный расчет: «одношаговый» и «двухшаговый» (Jennings et al., 1982; Yeh, Tripathi, 1991).

4.5.2.1. Одношаговый алгоритм

Он предполагает включение уравнений химических реакций (через их константы) в транспортные уравнения, подобно тому как в однокомпонентных моделях для учета сорбции используется фактор сорбционной задержки (или эффективная пористость). Таким образом формируется единая система нелинейных уравнений конвективно-дисперсионного переноса. Покажем, каким образом строится алгоритм расчета (моделирования) на примере переноса сорбируемого компонента M_1 , принимающего участие в двух реакциях комплексообразования (4.65, $i = 1$, $j = 2$, $k = 1$), так что система описывается тремя реакциями (Lewis et al., 1986):

$$M_1 + \bar{X} = \overline{M_1\bar{X}}, \quad K = \rho_b K_d, \quad (4.71a)$$

$$M_1 + L_2 = M_1L_2, \quad K_{121}, \quad (4.71b)$$

$$M_1 + L_3 = M_1L_3, \quad K_{131}. \quad (4.71в)$$

Константы равновесия в соответствии с законом действующих масс определяют соотношения между концентрациями

$$K_{121} = \frac{C_{12}}{C_1 C_2}, \quad K_{131} = \frac{C_{13}}{C_1 C_3}, \quad (4.72)$$

или

$$C_{12} = K_{121} C_1 C_2, \quad C_{13} = K_{131} C_1 C_3. \quad (4.72a)$$

Система транспортных уравнений может быть представлена в терминах суммарной (total) концентрации (C_1^T , C_2^T и C_3^T) для каждого компонента

$$n \frac{\partial C_1^T}{\partial t} + \frac{\partial N_1}{\partial t} = L(C_1^T), \quad (4.73a)$$

$$n \frac{\partial C_2^T}{\partial t} = L(C_2^T), \quad (4.73б)$$

$$n \frac{\partial C_3^T}{\partial t} = L(C_3^T), \quad (4.73в)$$

$$C_1^T = C_1 + C_{12} + C_{13} = C_1(1 + K_{121}C_2 + K_{131}C_3), \quad (4.73г)$$

$$C_2^T = C_2 + C_{12} = C_2(1 + K_{121}C_1), \quad (4.73д)$$

$$C_3^T = C_3 + C_{13} = C_3(1 + K_{131}C_1), \quad (4.73е)$$

$L(C)$ представляет линейный (1D, 2D или 3D) дифференциальный оператор, отвечающий за конвективную и дисперсионную компоненты массопереноса

$$L(C) = \nabla \cdot (nD_p \nabla C) - n\mathbf{u} \nabla C. \quad (4.73ж)$$

Для линейной равновесной сорбции

$$\frac{\partial N_1}{\partial t} = \frac{\partial N_1}{\partial C_1} \frac{\partial C_1}{\partial t} = K \frac{\partial C_1}{\partial t}, \quad (4.74)$$

и уравнение (4.73а) принимает форму

$$n \frac{\partial C_1^T}{\partial t} + K \frac{\partial C_1}{\partial t} = L(C_1^T). \quad (4.75)$$

Дальнейшие преобразования сводятся к нахождению аналитической связи между производной $\partial C_1/\partial t$ с другими концентрациями системы (4.73б—4.73в). Для этого из уравнения (4.73г) находим

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_1^T}{\partial t} &= \frac{\partial C_1}{\partial t} (1 + K_{121}C_2 + K_{131}C_3) + \\ &+ K_{121}C_1 \frac{\partial C_2}{\partial t} + K_{131}C_1 \frac{\partial C_3}{\partial t}, \end{aligned} \quad (4.76)$$

а из двух других уравнений (4.73д) и (4.73е) производные

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} = \left(\frac{1}{(1 + K_{121}C_1)} \right) \frac{\partial C_2^T}{\partial t} - \frac{K_{121}C_2^T}{(1 + K_{121}C_1)^2} \frac{\partial C_1}{\partial t}, \quad (4.77a)$$

$$\frac{\partial C_3}{\partial t} = \left(\frac{1}{(1 + K_{131}C_1)} \right) \frac{\partial C_3^T}{\partial t} - \frac{K_{131}C_3^T}{(1 + K_{131}C_1)^2} \frac{\partial C_1}{\partial t}. \quad (4.77б)$$

Подставляя производные $\partial C_2/\partial t$ и $\partial C_3/\partial t$ из (4.77) в равенство (4.76), находим производную

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = \frac{1}{H} \frac{\partial C_1^T}{\partial t} - \frac{G}{H}, \quad (4.78)$$

$$H = 1 + K_{121}C_2 + K_{131}C_3 - \left(\frac{K_{121}}{1 + K_{121}C_1} \right)^2 C_2^T C_1 - \left(\frac{K_{131}}{1 + K_{131}C_1} \right)^2 C_3^T C_1, \quad (4.78a)$$

$$G = \left(\frac{K_{121}C_1}{1 + K_{121}C_1} \right)^2 \frac{\partial C_2^T}{\partial t} + \left(\frac{K_{131}C_1}{1 + K_{131}C_1} \right)^2 \frac{\partial C_3^T}{\partial t}. \quad (4.78б)$$

Таким образом, транспортное уравнение для суммарной концентрации сорбируемого компонента (4.75) приобретает следующий окончательный вид:

$$n \frac{\partial C_1^T}{\partial t} + K \left(\frac{1}{H} \frac{\partial C_1^T}{\partial t} - \frac{G}{H} \right) = L(C_1^T). \quad (4.79)$$

Уравнения (4.79), (4.73б—4.73в) составляют систему уравнений, описывающих трехкомпонентную миграцию.

Алгоритм решения этой системы выглядит следующим образом. Сначала решаются линейные уравнения переноса несорбируемых частиц (4.73б—4.73в), позволяющие определить суммарные концентрации C_2^T и C_3^T в момент t^k . Затем ищется решение для C_1^T на том же шаге t^k из уравнения (4.79), которое является нелинейным в силу присутствия в нем переменных G и H , с использованием «глобальной» итерационной схемы. Определение G и H требует знания C_2^T и C_3^T на момент t^k вместе с их производными и концентраций ионных форм C_1 , C_2 и C_3 . Производные берутся из предположения линейного изменения концентрационных

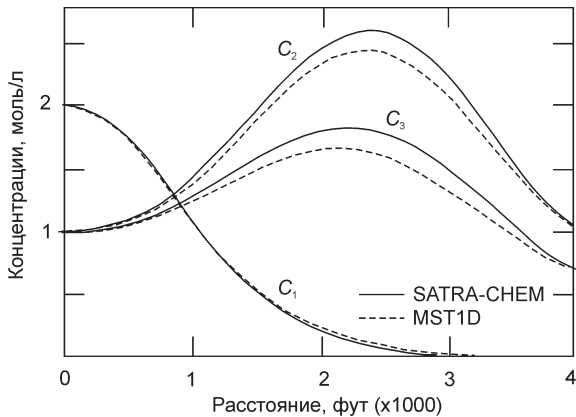


Рис. 4.14. Распределения концентрационных функций $C_1(x)$, $C_2(x)$ и $C_3(x)$, рассчитанные на программных кодах SATRA-CHEM и MST1D.

Исходные данные — в тексте.

функций за временной шаг, например, $\partial C_2^T / \partial t = [(C_2^T)^k - (C_2^T)^{k-1}] / \Delta t$, а значения C_1 , C_2 и C_3 берут с предыдущей глобальной итерации. Определив C_1^T , C_2^T и C_3^T , мы должны рассчитать новые значения ионных концентраций. Для этого используются уравнения (4.73г—4.73е). Вычитая (4.73д) и (4.73е) из (4.73г) и используя соотношения для C_2 и C_3 , мы получаем решение, где остается неизвестной только одна концентрация C_1 :

$$\begin{aligned}
 C_1^T - C_2^T - C_3^T &= C_1 - C_2 - C_3 = \\
 &= C_1 - C_2^T / (1 + K_{121} C_1) - C_3^T / (1 + K_{131} C_1).
 \end{aligned}
 \quad (4.79a)$$

Это уравнение преобразуется в кубическое уравнение относительно неизвестной переменной C_1 , которое может быть решено с помощью Ньютон—Раштон итерационной процедуры. Определив C_1 , находим C_2 и C_3 из (4.73д—4.73е). Данный алгоритм реализован численным кодом SATRA-CHEM (Lewis et al., 1986).

Численный пример. На рис. 4.14 приведен расчет концентрационных фронтов, сформированных в одномерном фильтрационном потоке: $u = 1.28 \cdot 10^{-5}$ фут/с (1.106 фут/сут), $n = 0.2$, $\delta_L = 100$ ft. Коэффициенты химических реакций: $K = \rho_b K_d = 1.1$, $K_{121} = 0.5$, $K_{131} = 1.0$. Граничные условия: $C_1(0, t) = C_{10} = 2$, $C_2(0, t) = C_{20} = 1$, $C_3(0, t) = C_{30} = 1$. В соответствии с уравнениями (4.73г—4.73е), $C_{10}^T = 5$, $C_{20}^T = 2$, $C_{30}^T = 3$. Начальные условия: $C_1(x, 0) = C_2(x, 0) = C_3(x, 0) = 0$. Концентрации компонентов даны в [моль/л]. Расчетное время $t = 3285$ сут (9 лет).

Фактор сорбционной задержки для иона в отсутствии реакций комплексообразования $R_1 = 1 + K/n = 6.5$. Тогда фронт поршневого вытеснения должен был бы за расчетное время переместиться на расстояние

$x_0^s = ut/R_1 = 559$ фут. На самом деле перемещение фронта, если с ним отождествлять положение концентрационной точки $C_1 = 1$ моль/л [$\bar{C}_1 = 0.5$ (50 %)], почти в два раза превышает это значение. Данное обстоятельство может быть объяснено влиянием комплексообразования, — процесса, удерживающего часть сорбируемого компонента в растворе в форме химически инертных металлокомплексов M_1L_2 и M_1L_3 . На графике также видно, что сорбция M_1 непосредственно влияет и на распределение лигандов L_2 и L_3 , концентрации которых возрастают по сравнению с их граничными значениями ($C_{20} = C_{30} = 1$ моль/л) вблизи фронта вытеснения M_1 . Сорбционный вывод из раствора ионов металла приводит к нарушению химического равновесия и появлению на фронте дополнительного их количества, что и формирует волнообразные концентрационные распределения, причем, как видно, пик концентрации C_3 превышает максимум концентрационного распределения C_2 , что объясняется соотношением констант равновесия K_{121} и K_{131} ($K_{131} > K_{121}$). Так как K_{131} больше K_{121} , то диссоциация M_1L_3 дает больше лигандов, чем диссоциация M_1L_2 . К этому примеру мы еще вернемся в разд. 4.5.2.2. Пока же отметим, что фронт лигандов перемещается за расчетное время t на расстояние 3633 фут.

4.5.2.2. Двухшаговый алгоритм

В этом алгоритме физико-химический и транспортный блоки численной программы работают последовательно: на первом шаге решается система линейных уравнений конвективной дисперсии для каждого из компонентов в предположении об их консервативности; полученное концентрационное распределение используется как начальное условие для решения системы нелинейных алгебраических уравнений, отвечающих термодинамическому (равновесному) представлению физико-химических реакций. В результате этого решения находятся концентрации всех миграционных форм, суммарные концентрации и определяется функция источника Q_j^T . Затем на втором шаге эта функция используется для получения новых концентрационных распределений при решении тех же уравнений массопереноса с функцией источника. Формальная запись выглядит следующим образом

$$\begin{aligned}
 n \frac{\partial T_j}{\partial t} + \lambda_j n T_j + Q_j^T - L(T_j) &= 0, \quad j = 1, \dots, N_C, \\
 Q_j^T &= \frac{\partial}{\partial t} \left[S_j + \sum_{k=1}^{N_p} a_{jk} P_k \right] + \lambda_j \left[S_j + \sum_{k=1}^{N_p} a_{jk} P_k \right], \quad (4.80) \\
 T_j &= C_j + \sum_{k=1}^{N_s} a_{ji} x_i, \\
 L(\cdot) &= D \nabla^2(\cdot) - v \nabla(\cdot),
 \end{aligned}$$

где C_j ($j = 1, \dots, N_c$) — концентрация базовых частиц, содержащих j -й компонент, x_i ($i = 1, \dots, N_x$) — концентрация x_i комплексов; T_j — суммарные аналитические концентрации j -го компонента; Q_j^T — изменение массы вещества за счет включаемых обменных физико-химических процессов; S_j — концентрация компонентов в адсорбционном состоянии; P_k — концентрация осажденного или растворенного минерала (соли); a_{ji} — стехиометрический коэффициент (количество молей C_j на один моль x_i); a_{jk} — то же для растворения/осаждения (количество молей базовых компонентов на моль вещества P_k); λ_j — константа распада.

Решение уравнений (4.80) осуществляется методом конечных разностей с использованием чисто неявной схемы и итерационной процедуры Гаусса—Зейделя с верхней релаксацией для ускорения сходимости итерационного процесса. Уравнение (4.80) решается вместе с уравнениями действующих масс, замыкающих систему.

В качестве примера представим результаты моделирования задачи трехкомпонентного переноса (разд. 4.5.2.1) на программе MST1D (Мироненко, Румынин, 1998), основанной на двухшаговом алгоритме (рис. 4.14). Как видно, концентрационные кривые C_1 сорбируемого компонента M_1 практически совпадают, т. е. обе модели дают близкие результаты. В то же время концентрационные распределения лигандов L_2 и L_3 , полученные с помощью MST1D, оказываются более размытыми, хотя максимальные расхождения, наблюдаемые в области пиковых значений концентраций лигандов, не превышают 10—12 %.

Часть II

ЗАГРЯЗНЕНИЕ ПОДЗЕМНЫХ ВОД НА ВОДОЗАБОРАХ

При подготовке материалов по оценке (подсчету) и утверждению эксплуатационных запасов месторождения подземных вод наряду с комплексом полевых геолого-гидрогеологических работ, анализом гидрогеологических условий (по фондовым материалам и литературным источникам) и гидродинамическим моделированием, направленным на обоснование возможности и целесообразности организации хозпитьевого водоснабжения, выполняются работы (исследования), связанные с проблемой качества воды (Боревский и др., 1989; 2002). Они включают: обоснование зон санитарной охраны (ЗСО) водозабора, прогнозирование возможных изменений качества отбираемой воды под влиянием техногенных и природных факторов, а также обоснование гидрогеоэкологического мониторинга и возможных водоохраных мероприятий инженерного характера.

Обоснование границ ЗСО предполагает выделение трех поясов:

ЗСО-1 — пояса строгого режима — в радиусе 30—50 м от скважин водозабора; данный размер регламентируется нормативным документом;

ЗСО-2 — пояса ограничений для защиты от микробного загрязнения — в пределах траекторий движения подземных вод к водозабору, отвечающего периоду времени жизнеспособности бактерий (100—400 суток в зависимости от климатических условий); обоснование конфигурации и размеров ЗСО-2 предполагает выполнение гидрогеологических расчетов (обычно с использованием моделирования — численного на сеточных моделях или численно-аналитического);

ЗСО-3 — пояса ограничений для защиты от химического загрязнения — в пределах области движения подземных вод к водозабору за расчетный срок его эксплуатации; в основе обоснования ЗСО-3 также лежат гидрогеологические расчеты.

Прогноз изменений качества подземных вод предполагает оценку времени поступления к водозаборным скважинам некондиционных (загрязненных) вод, длительности последующего периода, в течение которого качество эксплуатируемых вод может оставаться в пределах установленных норм, а также расчет максимальных концентраций компонентов-загрязнителей в них на период эксплуатации водозабора.

Водоохранные мероприятия в зависимости от выполнения требований к ЗСО и прогнозов могут носить как контрольно-профилактический, так и активный характер, направленный на борьбу с выявленными случаями ЗПВ.

Гидрогеоэкологические условия эксплуатации водозаборов определяются, с одной стороны, совокупностью природных факторов, контролирующих естественную защищенность подземных вод, а с другой стороны — характером возможного влияния на них тех или иных источников загрязнения. В практическом плане типизация этих условий, нацеленная на облегчение решения задач контроля и прогнозирования качества подземных вод, предполагает их увязку с существующими (нормативными) представлениями о ЗСО водозаборов, рассматриваемых как первоочередная водозащитная мера (Боревский и др., 2002). С этих позиций типизация предполагает подразделение условий водозаборов подземных вод на следующие категории (рисунок):

1) водозаборы в грунтовых потоках, тяготеющие к водораздельным областям и склонам долин и удаленные вместе с тем от питающих границ (схема *a* на рисунке), а также водозаборы в неглубоких субнапорных водоносных системах, характеризующихся относительно тесной взаимосвязью эксплуатируемых (напорных) водоносных горизонтов с приповерхностными грунтовыми водами;

2) водозаборы инфильтрационные (береговые), расположенные в речных долинах или вблизи крупных природных водоемов, а также сочетающиеся с поверхностными системами искусственного восполнения запасов подземных вод (схема *б* на рисунке);

3) водозаборы как в напорных (глубокозалегающих), так и безнапорных водоносных горизонтах/системах, характеризующихся наличием выраженной профильной или плановой гидрохимической зональности и/или изменением минерализации воды (схема *в* на рисунке);

4) водозаборы, химический состав воды в которых формируется под влиянием процессов растворения природных минералов в зоне аэрации, образующейся при снижении уровня подземных вод (схема *г* на рисунке).

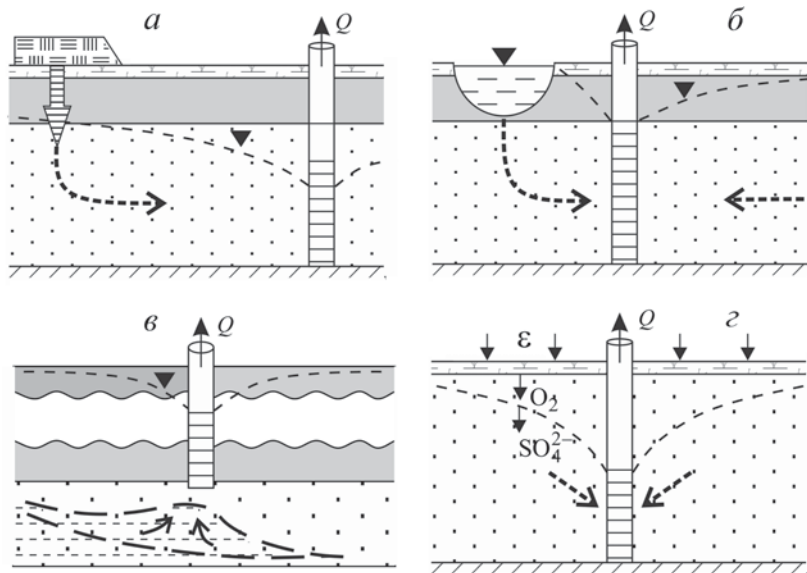


Рисунок. Типизация водозаборов по условиям возможного загрязнения.

а — водозаборы в грунтовых потоках; *б* — водозаборы инфильтрационные (береговые); *в* — водозаборы, эксплуатируемые в условиях исходной гидрохимической зональности подземных вод; *г* — водозаборы, эксплуатация которых инициирует растворения природных минералов в зоне аэрации.

К особому виду (типу) воздействия на эксплуатируемые водоносные горизонты следует отнести упругое отжатие некондиционных вод из слабопроницаемых толщ и/или перетекание через них растворов с пониженным качеством из смежных водоносных комплексов (см. пример в гл. 5).

На водозаборах первых двух категорий (см. рисунок) основная опасность ухудшения качества воды чаще всего связана с влиянием поверхностных источников бытового, промышленного или сельскохозяйственного загрязнения. Важным элементом является расчет границ ЗСО в сочетании с анализом структуры потока и скоростных характеристик частиц воды в их пределах. Наряду с этими двумя характерными типами площадей загрязнения в целом особо выделяется непосредственно прилегающая к источнику область инфильтрации (преимущественно нисходящей) загрязнений. Ввиду несовершенного (в большинстве случаев) характера фильтрационной связи поверхностных источников загрязнения с подземными водами важная роль в оценке санитарной защищенности водозаборов отводится изучению

свойств покровных и донных отложений, во многом предопределяющих не только фильтрационную, но и миграционную ситуацию — физико-химическую трансформацию загрязнений.

На основной же площади распространения грунтовых вод решающее значение для оценки санитарных условий их эксплуатации имеют инфильтрационное питание и защитные свойства пород зоны аэрации. Методика соответствующих расчетных оценок вертикального влагопереноса и миграции загрязнений через высокопроницаемые гомогенные (трещиноватые или раздельнозернистые) толщи хорошо освещена в литературе. Основные трудности вызывает оценка защитных свойств слоистых песчано-глинистых и гетерогенных трещиновато-пористых пород большой мощности.

На водозаборах третьей категории (рисунок) на первый план выходят задачи прогнозирования изменения качества подземных вод под влиянием миграции некондиционных растворов природного происхождения. Такого рода изменения являются результатом смешения подземных вод, поступающих в водозаборные скважины из различных гидрогеохимических зон. Характерными примерами являются: подтягивание к водозбору глубоких высокоминерализованных вод природного генезиса; внедрение в прибрежные горизонты, эксплуатируемые скважинами, соленых морских вод.

На водозаборах четвертой категории (рисунок) ухудшение качества воды связано с появлением в ней компонентов, которые не свойственны как потенциальным источникам загрязнения, так и природной водоносной системе. Эти компоненты являются следствием химических реакций, протекающих в аэрированных породах выше уровня подземных вод, сниженного в результате эксплуатационного водоотбора.

Таким образом, сочетание таких факторов, как тип месторождения подземных вод, характер и расположение водозабора, структура водовмещающей среды, тип источника загрязнения (засоления), определяет основные механизмы миграции и параметры, необходимые для выделения ЗСО и прогнозирования качества подземных вод. Экспериментальным методам изучения этих механизмов и параметров посвящена специальная литература (Веригин и др., 1977; Мироненко, Румынин, 1986; Коносовский и др., 1993; Мироненко и др., 1998).

Решение собственно задач геофильтрации и миграции в настоящее время осуществляется чаще всего с использованием численных (сеточных, математических) моделей, позволяющих в полной мере учесть упомянутые выше факторы. Однако при-

ложение математического моделирования оказывается малоэффективным при плохом знании базовых аналитических решений, которые позволяют правильно схематизировать гидрогеологические условия, выполнить предварительные экспертные оценки, обоснованно выбрать комплексные параметры для калибровки моделей и осуществить проверку корректности получаемых результатов. Рассматриваемые ниже модели способствуют в какой-то степени реализации такого подхода.

Глава 5

ОСНОВЫ ГИДРОГЕОЛОГИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ ДЛЯ ОБОСНОВАНИЯ ЗСО И ТЕСТОВЫЕ ПРИМЕРЫ

В настоящем разделе рассматриваются простейшие аналитические и численно-аналитические модели, которые позволяют:

1) рассчитать траектории движения частиц воды, связывающие различные области водоносного горизонта с водозаборными скважинами;

2) определить геометрию области (зоны) захвата, которую удобно представить в виде *изохроны* — линии, которая соединяет точки, характеризующие одновременное поступление частиц воды в скважину, т. е. в общем случае размер области захвата (и ее конфигурация) является динамической (меняющейся во времени) характеристикой.

Применительно к расчетам ЗСО такие оценки выполняются в предпосылке поршневого вытеснения (дисперсионные эффекты здесь малозначимы) для химически неактивного компонента, что делает гидрогеологическое прогнозирование предельно консервативным. В качестве примера в настоящем учебном пособии даются расчетные схемы (модели) применительно к условиям эксплуатации одиночной водозаборной скважины в напорном пласте или компактно расположенной группы скважин, аппроксимируемой «большим» колодцем.

В реальных условиях должны учитываться схемы размещения скважин и режим их эксплуатации, а также конкретные гидрогеологические условия. На практике в пределах выделенных областей по мере необходимости проводят детальные миграционные расчеты, учитывающие характер загрязняющих компонентов, тип источника загрязнения, изменчивость фильтрационных свойств пород и другие факторы. Такие расчеты приобрета-

ют особую значимость в том случае, если «стандартный» (консервативный) расчет показывает, что в пределах ЗСО существуют источники потенциального загрязнения подземных вод. Необходимость в таких оценках может возникнуть также в связи с получением разрешения на промышленное либо городское освоение территорий в зоне влияния действующего водозабора или в случае аварийного поступления загрязняющих веществ в эксплуатируемый водоносный горизонт.

Обоснование ЗСО обычно предполагает анализ процесса переноса загрязнений в рамках плановых моделей. В основе решения плановой задачи лежит построение карты линий равных напоров (гидроизогипс), являющейся результатом интерполяции значений напора в фиксированных точках $H(x, y)$. Линии тока, отвечающие траекториям частиц, проводятся нормально гидроизогипсам, что позволяет построить гидродинамическую сетку движения подземных вод. На ней отыскиваются водораздельные точки, где сходятся несколько линий тока и изолиний напора (соответственно скорость потока равна нулю). Раздельные (нейтральные) линии тока, проходящие через раздельные точки, ограничивают участки фильтрации подземных вод к месту их отбора из различных источников питания. К сожалению, графическая реализация данной процедуры на бумажных картах достаточно трудоемка и страдает известной долей субъективизма.

Распределение $H(x, y)$ может быть получено методом моделирования геофильтрации — либо (и чаще всего) посредством решения задачи на численной (сеточной) модели, либо численно-аналитическим методом. В последнем случае собственно значения $H(x, y)$ — результат суперпозиции частных аналитических решений для функции-понижения $\Delta H_i(x, y)$, записанной для того или иного источника-стока, и заданного распределения естественного напора подземных вод, H_e , т. е.

$$H(x, y) = H_e(x, y) + \sum_{i=1} \Delta H_i(x, y), \quad (5.1)$$

где $\Delta H_i(x, y)$ — функция-понижения. Например, для источников-стоков с радиальной симметрией, характеризуемых заданным расходом водозаборной скважины, Q_i ,

$$\Delta H_i(x, y) = \frac{Q_i}{4\pi T} W(r_i, t), \quad (5.1a)$$

$W(r_i, t)$ — функция-скважины, например, входящая в решение Тейса для напорного пласта (Веригин и др., 1977; Шестаков,

1995), $r_i = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}$ — расстояние от скважины до расчетной точки.

Среди вычислительных программ, используемых для расчета параметров ЗСО на основе решения (5.1), дополненного расчетами траекторий движения частиц вдоль линий тока, достаточно известными являются программные комплексы WHPA (Blandford, Wu, 1993) и ANSDIMAT (Синдаловский, 2014).

5.1. Водозабор в потоке грунтовых вод

С позиций санитарной защищенности условия эксплуатации водозаборов в грунтовых потоках вдали от питающих границ (первая категория водозаборов — см. рисунок во введении к ч. II) во многом определяются его дебитом, структурой и скоростью регионального фильтрационного потока, интенсивностью инфильтрационного питания, характером связи подземных вод с техногенными источниками загрязнения, а также мощностью и составом пород зоны аэрации, выполняющей важные защитные функции. Консервативный сценарий определения конфигурации и временной динамики развития зон захвата водозабором потока подземных вод учитывает только первые два фактора.

5.1.1. Конфигурация зон захвата и изохроны при отсутствии инфильтрации

Рассмотрим идеализированные условия эксплуатации скважины (дебит Q), расположенной в напорном горизонте мощностью m . Пусть направление и скорость (v_0) естественного (бытового) потока заданы (рис. 5.1). Как видно из рисунка, поле фильтрационного течения разбивается на две области: внутреннюю и внешнюю (Гольдберг, 1976). Во внутренней области, примыкающей к скважине, все линии тока замыкаются на скважине, во внешней области линии тока минуют скважину. Внутренняя область, которая может быть названа областью питания, отделена от внешней области так называемой *нейтральной линией тока*.

Определение геометрических характеристик нейтральной линии, а также положения изохрон, характеризующих время поступления частиц воды в скважину в пределах области питания водозабора, основывается на решении гидродинамической задачи в терминах напора или потенциала скорости фильтрации (Strack, 2017).

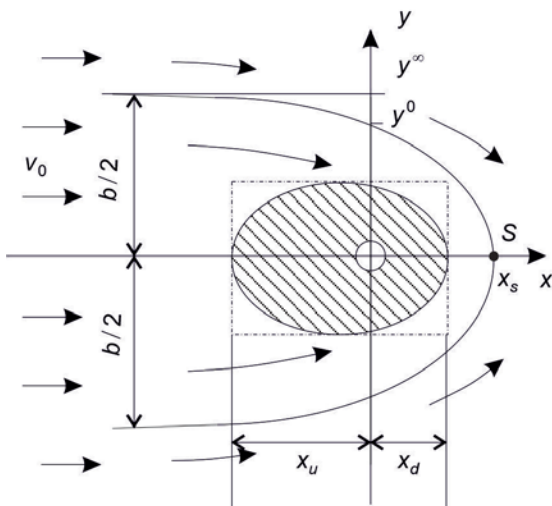


Рис. 5.1. Схема движения подземных вод при откачке из скважины в естественном фильтрационном потоке.

Графо- и численно-аналитические приближенные решения. Решение задачи предполагает построение сетки движения подземных вод — изолиний напоров и ортогональных им линий тока (среди которых будет и нейтральная линия тока). Распределение напора $H(x, y)$ может быть получено методом «сложения течений» в форме (5.1). В случае расположения одной скважины в естественном потоке слагаемыми решения (5.1) будут две функции:

— функция естественного напора, определяющего поток в горизонте (со скоростью v_0)

$$H_e(x) = H_1 - Ix, \quad (5.2)$$

— функция понижения напора, обусловленного эксплуатацией водозаборной скважины (формула Дюпюи)

$$\Delta H(x, y) = \frac{Q}{2\pi T} \ln \frac{R}{r}, \quad (5.2a)$$

где I — естественный градиент потока; H_1 — некоторый (референтный) напор; $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ — текущий радиус в декартовых координатах; T — проводимость горизонта ($T = km$, k — коэффициент фильтрации); R — радиус влияния.

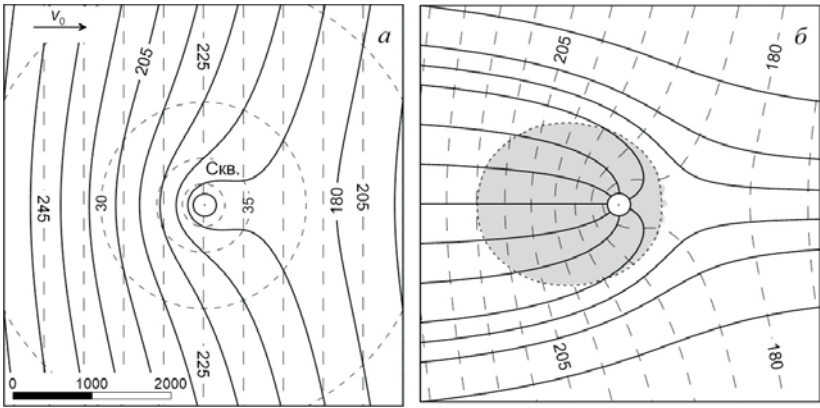


Рис. 5.2. Концептуальная схема, иллюстрирующая построение сетки движения подземных вод и расчет зоны захвата потока.

a — распределение напоров естественного $H(x)$ (штриховые линии) и нарушенного водоотбором $H(x, y)$ (сплошные линии) фильтрационного поля. Пунктирные линии — понижение напора от скважины (ΔH); *б* — структура сетки движения (линии равных напоров — штриховые линии, линии тока — сплошные линии) и зона захвата (серый цвет).

Таким образом, результирующее поле напоров определяется следующей аналитической зависимостью:

$$H(x, y) = H_1 - Ix - \frac{Q}{2\pi T} \ln \frac{R}{r}. \quad (5.3)$$

На рис. 5.2, *a* показан пример расчета $H(x, y)$, выполненный на основе формулы (5.3). Основываясь на построенной таким образом карте гидроизогипсе, можно графически определить положение линий тока и по средним градиентам потока в различных расчетных точках (при известных параметрах) определить время перемещения частиц растворенного вещества.

Надежность расчетов может быть повышена, а трудозатраты сокращены посредством определения поля скоростей фильтрации/массопереноса в явном виде. Так, задавшись коэффициентом фильтрации k и пористостью n , и последовательно продифференцировав функцию $H(x, y)$ (5.3), легко находим выражения для двух главных компонент скорости миграции

$$u_x = \frac{v_x}{n} = -\frac{k}{n} \frac{\partial H}{\partial x} = \frac{v_0}{n} - \frac{Qx}{2\pi mn r^2},$$

$$u_y = \frac{v_y}{n} = -\frac{k}{n} \frac{\partial H}{\partial y} = -\frac{Qy}{2\pi mn r^2}. \quad (5.4)$$

Скорости u_x и u_y связаны между собой системой обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка:

$$\frac{dt}{1} = \frac{dx}{u_x} = \frac{dy}{u_y}, \quad (5.5)$$

которая может быть переписана в виде двух независимых уравнений:

$$\frac{dx}{dt} = u_x, \quad \frac{dy}{dt} = u_y. \quad (5.6)$$

Эти уравнения описывают некоторые кривые в двухмерном пространстве, дающие представление о положении частицы в момент времени t , т. е. траектории движения частиц в этом пространстве (Bear, 1972). Так как u_x и u_y определяются из (5.4) в каждой точке, то, используя метод характеристик, легко найти новые координаты точек после их смещения за интервал времени Δt_k методом Эйлера.

Такая процедура реализована, например, в программном комплексе ANSDIMAT (Синдаловский, 2014; см. разд. 5.4). Основываясь на том же принципе, можно определить конфигурацию зон захвата на фиксированные моменты — положение в плане изохрон. Пример, иллюстрирующий возможности такого подхода, представлен на рис 5.2, б.

Частные решения. Они могут быть получены непосредственно на основе анализа (5.4). Так, очевидно, на линии симметрии ($y = 0$) существует водораздельная точка S (см. рис. 5.1), где горизонтальная компонента скорости равна нулю. Тогда непосредственно из первой формулы (5.4), полагая $u_x(y = 0) = 0$, получаем простое аналитическое выражение для координаты нейтральной (водораздельной) точки

$$x_s = \frac{Q}{2\pi m v_0}. \quad (5.7)$$

Далее максимальная ширина ленты тока, $b = 2y^\infty$ (см. рис. 5.1), определяется, очевидно, общим притоком воды к скважине (Q): $2y^\infty v_0 m = Q$, откуда находим:

$$y^\infty = \frac{Q}{2v_0 m}. \quad (5.8)$$

Полное аналитическое решение. Решение эквивалентной задачи для нагнетательной скважины впервые получено Бэром и Джейкобсом (Bear, Jacobs, 1965). С особенностями поиска этого решения в системе эквипотенциальных (криволинейных) координат можно ознакомиться в ряде работ монографического

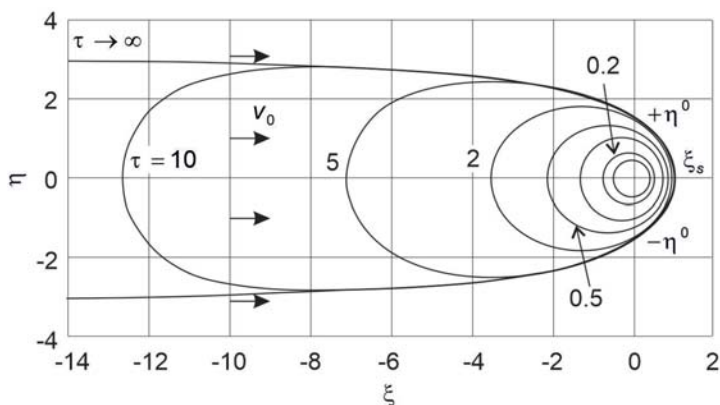


Рис. 5.3. Контур зоны захвата (изохроны) на различные моменты безразмерного времени τ .

характера и учебниках (Bear, 1972; Румынин, 2011; Strack, 2017).

Адаптация этого решения в части нахождения координат границы зоны захвата в различные моменты времени к условиям откачивающей скважины приводит к трансцендентному уравнению

$$\exp(-\xi - \tau) = \cos \eta - \frac{\xi}{\eta} \sin \eta, \quad (5.9)$$

графическое представление которого дано на рис. 5.3. Связь безразмерных переменных ξ , η , τ с реальными x , y , t (см. рис. 5.1) определяется соотношениями:

$$\xi = \frac{2\pi m v_0}{Q} x, \quad \eta = \frac{2\pi m v_0}{Q} y, \quad \tau = \frac{2\pi m v_0^2}{nQ} t. \quad (5.9a)$$

Как видно, расчеты по формуле (5.9) позволяют оконтурить зоны захвата в любой момент времени. Кроме того, анализ решения (5.9) дает полезные аналитические пределы (McElwee, 1991). Так, при $\tau \rightarrow \infty$ мы имеем выражение для расчета положения водораздельной линии:

$$\xi = \frac{\eta}{\operatorname{tg} \eta}, \quad (5.10)$$

откуда могут быть определены все характерные точки нейтральной линии тока:

1) безразмерная координата ξ_s водораздельной точки, ограничивающей приток пластовой воды из области, расположенной ниже по потоку от скважины

$$\xi_s = 1, \quad (5.11)$$

2) безразмерная координата η^0 (пересечение с нейтральной линией тока с осью η при $\xi = 0$) и η^∞ (асимптоты для η при $\xi \rightarrow \infty$)

$$\eta^0 = \pm \pi/2, \quad \eta^\infty = \pm \pi, \quad (5.12)$$

что устанавливает связь y^∞ и y^0 :

$$y^\infty = 2y^0. \quad (5.13)$$

т. е. максимальная ширина ленты тока, обеспечивающая приток воды к скважине, составляет $b = 2y^\infty = 4y^0$ (см. формулу 5.8).

Из решения (5.9) также следует (McElwee, 1991), что скорость расширения зоны захвата по оси ξ ($\eta = 0$) вниз по потоку будет определяться текущими координатами точки ξ_d :

$$\xi_d = -\tau - \ln(1 - \xi_d), \quad (5.14a)$$

а вверх по потоку ξ_u :

$$\xi_u = \tau + \ln(1 + \xi_d). \quad (5.14b)$$

Соответствующие размерные координаты x_d и x_u показаны на рис. 5.1.

Легко показать, что при $\tau = v_0 t / \eta x^0 < 0.1$

$$\frac{\tau}{\xi^2} = \frac{\tau}{\eta^2} \approx \frac{1}{2}, \quad (5.15)$$

тогда конфигурация фронта близка к окружности, так что безразмерный радиус захвата

$$\xi = \eta = \bar{R} = \sqrt{2\tau}, \quad \text{или} \quad x = y = R = \sqrt{\frac{Qt}{\pi mn}} \quad (5.16)$$

($\bar{R} = R/x_s$). В работе (Cerić, Haitjema, 2005) перед квадратным корнем во второй формуле рекомендуется использовать множитель 1.1543 — своего рода коэффициент запаса.

В диапазоне $0.1 < \tau < 1$ конфигурация зоны захвата также имеет форму, близкую к окружности (Cerić, Haitjema, 2005), но с центром, сдвинутым по оси x против направления потока. Безразмерный радиус новой окружности

$$\bar{R} = \frac{\xi_d + \xi_u}{2}, \quad (5.17a)$$

а эксцентриситет

$$\bar{\delta} = \frac{\xi_d - \xi_u}{2}. \quad (5.17b)$$

Поскольку ξ_d и ξ_u (5.14a—5.14b) неявным образом связаны с безразмерным временем τ (5.9a), то нахождение радиуса \bar{R} и эксцентриситета требует итерационных процедур. Приближенные формулы имеют вид (Cerić, Haitjema, 2005):

$$\bar{R} = 1.161 + \ln(0.39 + \tau), \quad (5.18a)$$

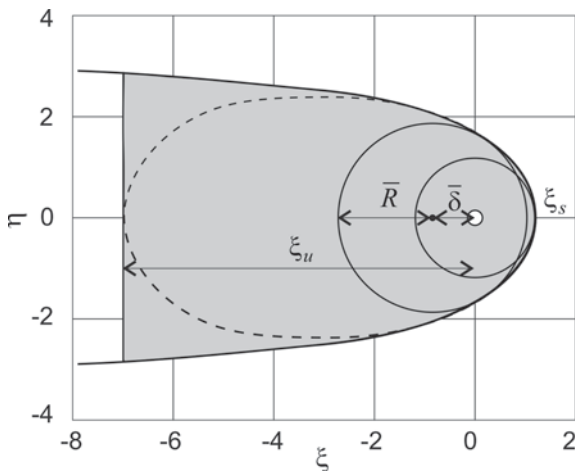


Рис. 5.4. Концепция аппроксимации зоны захвата потока подземных вод водозаборной скважиной.

$$\bar{\delta} = 0.00278 + 0.652\tau. \quad (5.186)$$

Коэффициенты в формулах (5.18) подобраны таким образом, что в зону захвата всегда попадают точки потока, определяемые точным решением задачи (5.9).

Далее, при $v_0 t / n x_s > 1$ конфигурация границы зоны захвата тяготеет к эллипсовидной форме. Однако с практической точки зрения в этом случае можно считать, что зона захвата вблизи скважины определяется положением нейтральной линии тока (5.10), ограниченной вверх по потоку линейной границей, перемещающейся параллельно оси $\eta(y)$ (рис. 5.4). Текущее положение границы ξ_u в каждый момент времени может быть определен с высокой степенью надежности по следующей формуле (Сегис, Найтjема, 2005)

$$|\xi_u| = \tau + \ln(\tau + e), \quad (5.19)$$

вытекающей из ранее приведенных зависимостей; здесь $\xi_u = x_u / x_s$, $\tau = v_0 t / n x_s$, $e = 2.718$.

Таким образом, представленные здесь аналитические зависимости позволяют приближенно описать динамику зон захвата, как это показано на рис. 5.4. Время t может рассматриваться в качестве временного критерия, назначаемого для второго или третьего пояса ЗСО (Лапшин, Орадovская, 1983).

Из представленных решений видно, что зона захвата вверх по потоку ($t \rightarrow \infty$) имеет неограниченную протяженность. В реальных условиях существуют факторы, локализующие зону

гидродинамического влияния водоотбора. Одним из таких факторов является существование подземных водоразделов, разграничивающих бассейны подземного стока. Формирование водоразделов часто связывается с площадным инфильтрационным питанием подземных вод.

5.1.2. Влияние площадного инфильтрационного питания горизонтов на конфигурацию зон захвата

Как это ни парадоксально, но существует весьма ограниченное число работ аналитического плана, включающих в модельные построения, подобные описанным выше, площадное инфильтрационное питание дренируемых водоносных горизонтов (Lerner, 1992; De Smedt, 2014). В этой связи возникает необходимость оценить влияние инфильтрации на конфигурацию и размер ЗСО.

Рассмотрим водоносный горизонт, запасы воды в котором пополняются за счет инфильтрации в пределах водосборной площади, как показано на рис. 5.5. Слева и справа область распространения горизонта ограничена двумя речными долинами — совершенными дренами-реками. Данная гидрогеологическая структура представляет собой пласт-полосу, в пределах которой формируется плоскопараллельный поток подземных вод.

Составим уравнение фильтрационного баланса в дифференциальной форме

$$\frac{dq_x}{dx} = \varepsilon, \quad q_x = -T \frac{dH}{dx}, \quad (5.20)$$

или, объединяя (5.20),

$$- \frac{d}{dx} \left(T \frac{dH}{dx} \right) = \varepsilon, \quad (5.20a)$$

где q_x — удельный расход; $T = km$ — проводимость ($\text{м}^2/\text{сут}$); ε — величина инфильтрации ($\text{м}/\text{сут}$).

Отсюда следует, что распределение напора H по оси x (рис. 5.5) описывается обыкновенным дифференциальным уравнением второго порядка

$$T \frac{d^2 H}{dx^2} + \varepsilon = 0. \quad (5.21)$$

Решение этого уравнения в общем виде известно:

$$H = - \frac{\varepsilon}{2T} x^2 + C_1 x + C_2 = 0, \quad (5.22)$$

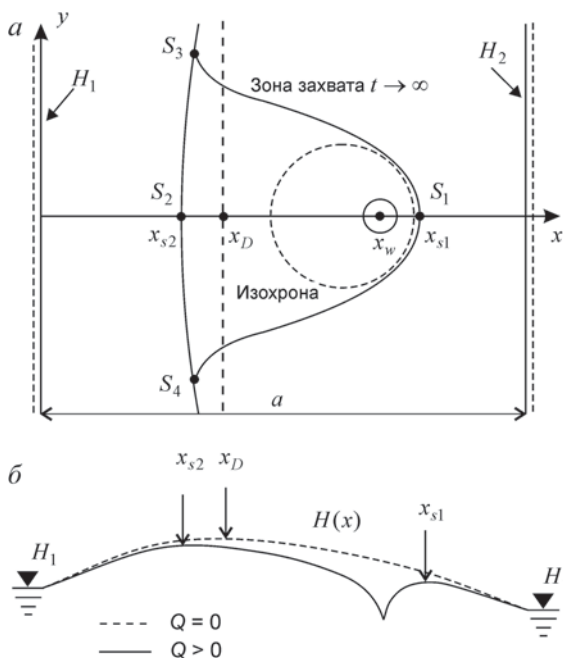


Рис. 5.5. Концептуальная схема к расчету характерных точек зоны захвата при наличии инфильтрации.

Штриховая линия — положение водораздела до начала водоотбора.

где константы интегрирования находятся из условий на границах области:

$$H(x=0) = H_1, \quad H(x=a) = H_2. \quad (5.23)$$

Таким образом, пьезометрическая поверхность описывается уравнением (Шестаков, 1995):

$$H(x) = H_1 \left(1 - \frac{x}{a}\right) + H_2 \frac{x}{a} + \frac{\varepsilon}{2T} (ax - x^2). \quad (5.24)$$

Максимум функции H отвечает водораздельной точке естественной потенциометрической поверхности, координата которой может быть найдена из условия равенства нулю первой производной.

$$\frac{dH}{dx} = \frac{H_2 - H_1}{a} + \frac{\varepsilon}{2T} (a - 2x) = 0. \quad (5.25)$$

Отсюда

$$x_D = \frac{a}{2} + \frac{T}{\varepsilon} \frac{H_2 - H_1}{a}. \quad (5.26)$$

Тогда решение (5.24) можно переписать в форме

$$H = H_1 + \frac{\varepsilon}{2T} \left[x_D^2 - (x - x_D)^2 \right]. \quad (5.27)$$

Понижение от водозаборной скважины определяется формулой Дюпюи

$$\Delta H = \frac{Q}{2\pi T} \ln \frac{R}{r}, \quad (5.28)$$

где выражение для текущего радиуса r в декартовых координатах имеет вид $r = \sqrt{x^2 + y^2}$.

Результирующее поле напоров между бассейнами двух рек при наличии инфильтрации определяется суперпозицией двух решений (5.27) и (5.28):

$$H = H_1 + \frac{\varepsilon}{2T} \left[x_D^2 - (x - x_D)^2 \right] - \frac{Q}{2\pi T} \ln \frac{R}{r}. \quad (5.29)$$

Главные компоненты скорости фильтрации Дарси определяются градиентным законом:

$$v_x = -k \frac{\partial H}{\partial x} = \frac{\varepsilon}{m} (x - x_D) - \frac{Qx}{2\pi m r^2}, \quad v_y = -k \frac{\partial H}{\partial y} = -\frac{Qy}{2\pi m r^2}. \quad (5.30)$$

Уравнение неразрывности планового фильтрационного потока имеет вид:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} = \frac{\partial v_y}{\partial y}. \quad (5.31)$$

При постоянной пористости n подобное уравнение имеем и для истинных скоростей массопереноса ($u = v/n$):

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} = \frac{\partial u_y}{\partial y}. \quad (5.32)$$

Этому уравнению соответствует система характеристических уравнений

$$\frac{dx}{u_x} = \frac{dy}{u_y} = \frac{dt}{1}. \quad (5.33)$$

определяющих структуру линий тока и временные характеристики движения частиц вдоль них. Рассмотрим первое уравнение в (5.33), переписав его в безразмерной форме:

$$\frac{d\bar{x}}{\bar{x} - \bar{x}_D - \bar{x}/\bar{r}^2} = \frac{d\bar{y}}{-\bar{y}/\bar{r}^2}, \quad (5.34)$$

$\bar{x} = x/x_0$, $\bar{y} = y/x_0$, $\bar{r} = r/x_0$, $\bar{x}_D = x_D/x_0$, $x_0 = \sqrt{Q/2\pi\varepsilon}$.

Уравнение (5.34) описывает зону захвата потока скважиной. Его решение в форме рядов Тейлора приводится в работе (De Smedt, 2014).

Особый интерес представляют координаты нейтральных точек (x_s), которые, исходя из логики формирования депрессии пьезометрической поверхности в подобных условиях, могут образовываться выше и ниже по потоку от водозабора на линии осевой симметрии $y = 0$. Очевидно, в этих особых точках должно выполняться условие равенства нулю горизонтальной компоненты скорости фильтрации: условие отсутствия движения воды, которое формализуется в виде $v_x = 0$. Первое уравнение (5.30) при $v_x = 0$, $y = 0$ принимает вид обыкновенного квадратичного уравнения

$$\bar{x}_s^2 - \bar{x}_D \bar{x}_s - 1 = 0. \quad (5.35)$$

Его решение —

$$\bar{x}_{s12} = \frac{1}{2} \left(\bar{x}_D \pm \sqrt{\bar{x}_D^2 + 4} \right) \quad (5.36)$$

действительно указывает на существование двух водораздельных точек на оси $y = 0$ (рис. 5.5).

Интересно отметить, что область питания водозабора, в отличие от случая $\varepsilon = 0$, ограничивается *замкнутой* нейтральной линией тока, препятствующей подтягиванию вод из области, расположенной за пределами контура S_1, S_3, S_2, S_4 . Видно также, что эксплуатация скважины деформирует линию водораздела, так что в зону захвата скважины, расположенной изначально в пределах водосборной площади одной реки, могут попасть воды, изначально разгружающиеся в соседнюю речную долину. Традиционные методики оконтуривания ЗСО, пренебрегающие инфильтрацией, не учитывают такой возможности (обычно водораздел считается непроницаемой границей). Данная особенность структуры потоков будет проиллюстрирована позже с использованием метода аналитического моделирования (разд. 5.4.3).

5.2. Водозабор в речной долине

Береговые водозаборы подземных вод второго типа (см. рисунок во введении к гл. II), как правило, располагаются вдоль берега реки или водохранилища. В техническом решении береговые водозаборы обычно представляют собой линейные ряды водозаборных скважин, а в некоторых случаях — лучевые водозаборы и горизонтальные дрены. Заметим, что береговые водозаборы грунтовых вод нередко называют инфильтрационными,

хотя такое название более правильно применять к водозаборам с искусственным питанием из инфильтрационных бассейнов (Шестаков и др., 2009).

Важнейшими факторами, определяющими защищенность водозаборов, подтягивающих воду из реки или водоема (часто — при заметном бактериологическом загрязнении последних), являются:

1) характер гидравлической взаимосвязи подземных и поверхностных вод, по которому выделяются поверхностные водотоки и водоемы, имеющие совершенную или затрудненную гидравлическую взаимосвязь с эксплуатируемым водоносным горизонтом;

2) направление движения естественного потока подземных вод — а) к реке, б) от реки, в) параллельно реке — подрусловые потоки;

3) строение и структура водовмещающих пород;

4) процессы самоочищения поверхностных вод при фильтрации через донные отложения.

Таким образом, при прогнозах качества подземных вод следует иметь в виду, что источником загрязнения может являться сама река. Поэтому наряду с характеристиками зон захвата, рассмотренными применительно к условиям потока вдали от питающих границ, расчеты для водозабора, расположенного вблизи реки, предполагают определение доли привлекаемых поверхностных вод в общем объеме откачиваемой воды. С практической точки зрения для несовершенных рек и водоемов это означает, в частности, необходимость внимательного изучения профильной фильтрационной анизотропии и неоднородности, которые могут потребовать применения трехмерных моделей фильтрации, особенно при наличии мощных подрусловых потоков. В трещиноватых и трещиновато-пористых пластах в условиях долин рек, как правило, формируется выраженная плановая анизотропия фильтрационных свойств, определяющая разницу в скоростях движения загрязнителей вдоль и поперек долины. С этими и многими другими аспектами проблемы можно ознакомиться в специальной литературе. В настоящем учебнике ограничимся рассмотрением простейшей модели (рис. 5.6).

5.2.1. Расчетная часть

Пусть одиночная совершенная скважина расположена на расстоянии L от реки, причем региональный плоско-параллельный поток направлен от водораздельной области в сторону реки (вектор скорости v_0 перпендикулярен урезу реки). Исходя из общих соображений, можно предположить, что существует два режима (сценария) водоотбора: первый, когда дебит водоотбора полностью компенсируется естественным потоком (рис. 5.6, *а*), второй, когда речные воды наряду с естественным потоком принимают участие в формировании дебита водоотбора (рис. 5.6, *б*).

Частный пример на рис. 5.7, в основе которого решение уравнений Лапласа в области потенциальных функций скорости фильтрации и линий тока (Strack, 2017), подтверждает данное предположение. Каждый из рисунков (*а*, *б* и *в*) отвечает расчету, выполненному при различных значениях безразмерного комплекса $\pi mLv_0/Q$. Как видно, в случае, когда отношение $\pi mLv_0/Q$ превышает 1, приток воды к скважине происходит только со стороны водораздельной области (рис. 5.7, *а*), что подтверждается существованием водораздельной точки, x_s (см. рис. 5.6, *а*), между скважиной и рекой: справа от этой точки ($x - x_s$) поток направлен к реке, слева — в сторону скважины. Если отношение $\pi mLv_0/Q$ менее 1, то происходит частичный захват речных вод (рис. 5.7, *в*); здесь отрезок $[S_1, S_2]$ — участок «обратной фильтрации» (в сторону скважины). Критическому равновесию ($\pi mLv_0/Q$ равно 1), разделяющему два сценария водоотбора, отвечает, очевидно, положение нейтральной линии тока, для которой характерна водораздельная точка расположена на урзе реки (рис. 5.7, *б*).

Критерий

$$Q \leq \pi mLv_0, \quad (5.37)$$

выполнение которого свидетельствует об отсутствии притока к скважине со стороны реки, может быть получен из условия равенства скорости фильтрации $v_r = Q/\pi mL$ (в направлении водозабора), наведенной откачкой, в точке ($x = L, y = 0$), и скорости естественного потока v_0 в противоположном направлении.

Полное аналитическое решение задачи имеет довольно сложный вид, поэтому приведем здесь лишь базовые соотношения для отдельных пространственных координат, характеризующих размеры зона захвата, а также распределение фильтрационных потоков, формирующих дебит скважины (одиночного водозабора).

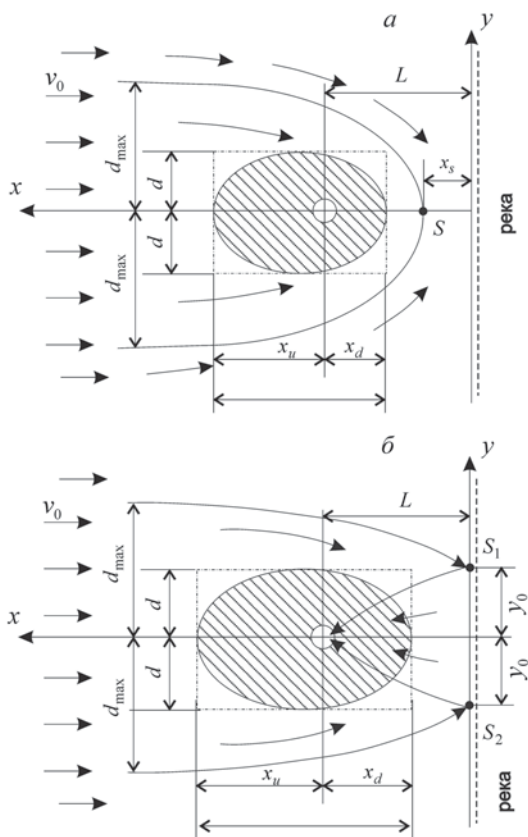


Рис. 5.6. Структура фильтрационного потока при расположении скважины вблизи реки.

a — водораздельная точка (S) находится в области между скважиной и рекой ($\pi m L v_0 / Q > 1$); *б* — формирование зоны фильтрационного потока от реки к скважине ($\pi m L v_0 / Q < 1$).

Первый сценарий. $Q / \pi m L v_0 \leq 1$ (см. рис. 5.6, *a*). В точке x_s на водораздельной линии ($y = 0$) суммарная скорость фильтрации ($v_T = v_r - v_0$) должна быть равна нулю, а функция напора имеет экстремум. Этому условию удовлетворяет равенство:

$$v_r = \frac{Q}{2\pi m(L - x_s)} + \frac{Q}{2\pi m(L + x_s)} = v_0, \quad (5.38)$$

откуда:

$$x_s = L \sqrt{1 - Q / \pi m L v_0}. \quad (5.39)$$

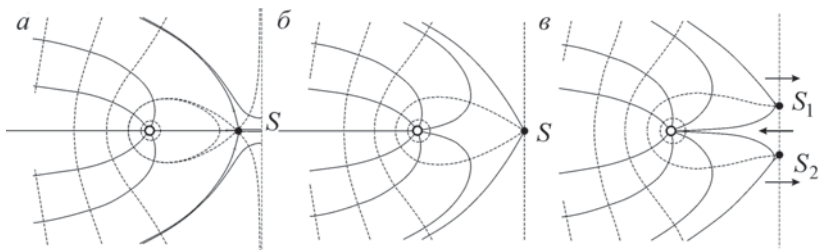


Рис. 5.7. Эквипотенциали (штриховые линии) и линии тока (сплошные линии), характеризующие сетку движения подземных вод при водоотборе из скважины, расположенной вблизи реки (естественный поток направлен в сторону реки).

a — $\pi m L v_0 / Q = 1.05$; *б* — $\pi m L v_0 / Q = 1$; *в* — $\pi m L v_0 / Q = 0.95$.

Второе слагаемое в формуле (5.38), в соответствии с принципом суперпозиции, — дополнительная компонента скорости фильтрации, обусловленная снижением напора в точке x_s под влиянием откачки из «скважины-имиджа», расположенной в фиктивной области справа от реки на расстоянии L .

Протяженность зоны захвата вверх по потоку x_u и вниз по потоку x_d определяется в неявном виде, в зависимости от расчетного времени t , из следующих соотношений (Лапшин, Орадовская, 1983):

$$\frac{v_0 t}{m n} = \left[\begin{array}{l} \left[x_u - \frac{L^2 - x_s^2}{2x_s} \ln \frac{L + x_u / (L - x_s)}{L + x_u / (L + x_s)} \right] \\ \left[\frac{L^2 - x_s^2}{2x_s} \ln \frac{L - x_d / (L + x_s)}{L - x_d / (L - x_s)} - x_d \right] \end{array} \right]. \quad (5.40)$$

Максимальная ширина ленты тока (область, ограниченная нейтральной линией тока), как и в случае отсутствия реки, определяется из условия баланса потоков (см. разд. 5.1.1)

$$b = 2y^\infty = \frac{Q}{m v_0}. \quad (5.41)$$

Второй сценарий. $Q / \pi m L v_0 > 1$ (рис. 5.6, б). Дебит водозабора в таких условиях складывается из естественного потока подземных вод Q_0 и фильтрующихся речных вод Q_p :

$$Q = Q_0 + Q_p; \quad (5.42)$$

$$Q_p = \frac{2Q}{\pi} \arctg \frac{y_0}{L} - 2m v_0 y_0, \quad (5.42a)$$

$$Q_0 = \frac{2Q}{\pi} \arctg \frac{y_0}{L} + 2m v_0 y_0, \quad (5.42б)$$

где y_0 — половина ширины фронта фильтрации речных вод на урезе реки, определяемая из выражения

$$y_0 = L \sqrt{Q/\pi m v_0 L - 1}. \quad (5.42в)$$

Протяженность зоны захвата в момент времени t вниз по потоку (между скважиной и рекой) определяется по следующей зависимости:

$$\frac{v_0 t}{n} = \left[\frac{L^2 + y_0^2}{y_0} \operatorname{arctg} \frac{x_d y_0}{L(L - x_d) + y_0^2} - x_d \right]. \quad (5.43)$$

Последнее соотношение может быть использовано для определения времени t_p , необходимого для достижения речной воды водозаборной скважины. Для этого необходимо в формуле (5.43) принять $x_d = L$:

$$\frac{v_0 t_p}{n} = \left[\frac{L^2 + y_0^2}{y_0} \operatorname{arctg} \frac{L}{y_0} - L \right]. \quad (5.44)$$

Вверх по потоку подземных вод протяженность зоны захвата определяется из выражения:

$$\frac{v_0 t}{n} = \left[x_u - \frac{L^2 + y_0^2}{y_0} \operatorname{arctg} \frac{x_u y_0}{x_u L + L^2 + y_0^2} - x_d \right]. \quad (5.45)$$

Другие полезные соотношения для нахождения параметров ширины зоны захвата приведены в методическом руководстве (Лапшин, Орадовская, 1983).

В заключение отметим, что в настоящее время накоплен большой опыт эксплуатации водозаборов вблизи поверхностных источников питания. Он свидетельствует о высоком уровне самоочищения от загрязнения (в частности — микробного) поверхностных вод при их фильтрации через пористые песчаные породы: обычно достаточными являются пути миграции в несколько десятков метров. Напротив, в трещиноватых и особенно закарстованных породах нередки случаи переноса загрязнения (в том числе микробного) на значительные расстояния, измеряемые многими сотнями метров и даже километрами.

5.2.2. О значимости процессов самоочищения при фильтрации воды через отложения, слагающие прибрежную зону реки

Экологическая безопасность эксплуатации береговых водозаборов обеспечивается самоочищением речной воды в процессе ее береговой фильтрации, которая может рассматриваться

как метод водоподготовки, окончательной или предварительной очистки. Далее будут рассмотрены гидрогеохимические процессы, миграция патогенных микроорганизмов, которые участвуют в формировании состава воды на участках береговых водозаборов, зона гипорейка (Шестаков и др., 2009).

Гидрогеохимические процессы. Существенные трансформации, приводящие к изменению химического и микробиологического состава речных вод, обусловлены такими процессами как фильтрование, сорбция, растворение и выщелачивание, биodeградация.

Процесс фильтрования заключается в том, что в поровой среде речные воды очищаются от взвешенных веществ, и при этом снижается содержание в воде многих компонентов, адсорбированных на взвешенных частицах. Особую роль процесс фильтрования имеет для очистки воды от микроорганизмов, часто имеющих размеры, сопоставимые с размерами пор.

Процесс сорбции оказывает существенное влияние на геомиграционные процессы. За счет сорбции при береговой фильтрации эффективно удаляются ионы металлов, содержание которых достаточно высоко в речных водах. Но при рассмотрении миграции ионов металлов стоит учитывать наличие в речных водах органических веществ — комплексообразователей (как естественного, так и техногенного происхождения), так как в их присутствии существенно снижается процесс сорбции, что может привести к увеличению концентрации ионов металлов в водозаборах.

Процессы растворения и выщелачивания отмечаются в повышенном содержании марганца и железа. Растворимость отдельных компонентов зависит от окислительно-восстановительных условий в водоносном горизонте. Смена окислительных на восстановительные (окисление органики за счет растворенного кислорода при поступлении воды в водоносный горизонт), и наоборот (поступление кислорода в подземные воды с инфильтрующимися атмосферными осадками), приводит к повышению содержания в подземных водах железа и марганца, растворимость которых возрастает в восстановительных условиях, в непосредственной близости от реки, а затем — к снижению их концентраций до исходных значений. Также процессы растворения приводят к увеличению содержания в воде кальция, магния, окиси кремния.

Процесс биodeградации органических веществ оказывает значительное влияние на качество воды в береговых водозаборах. Органические вещества, присутствующие в речных водах, эффективно удаляются при береговой фильтрации. Содержание растворенного органического углерода (DOC), стабильно высокое в речных водах, существенно уменьшается уже на первых метрах фильтрации в пределах прирусловой зоны. Стоит отметить, что рассматриваемый процесс зависит от времени года.

Миграция патогенных микроорганизмов (Шестаков и др., 2009). Эксплуатационные запасы береговых водозаборов формируются в основном за счет фильтрации воды из рек (водоемов) по водоносному пласту. Вместе с поверхностной водой в пласт поступают содержащиеся непосредственно в ней и в донных отложениях рек (водоемов) «чужие» для подзем-

ных вод компоненты — самые разные микроорганизмы, в том числе и патогенные. Это приводит к необходимости учитывать загрязнение воды в скважинах водозабора.

Патогенные микроорганизмы (ПМ) — это болезнетворные организмы, которые вырастают и размножаются внутри хозяина. Загрязненная вода является источником многих инфекционных болезней, первичными причинами которых являются ПМ. Численность микроорганизмов в воде определяется главным образом содержанием в ней органических веществ. В 1 мл воды количество ПМ может превышать несколько миллионов. Численность микроорганизмов в воде открытых водоемов подвержена колебаниям в зависимости от климатических условий, а главным образом от степени загрязнения рек, озер и морей сточными и канализационными водами и отходами промышленных, агропромышленных и других предприятий. В реки, озера, моря из прибрежных городов и других населенных пунктов выбрасывается такое количество сточных вод, несущих мириады микробов и содержащих огромное количество органических веществ, что вода не успевает самоочищаться. В связи с этим вода поверхностных водотоков и водоемов может являться источником загрязнения горизонтов подземных вод, эксплуатируемых береговыми водозаборами.

Хотя патогенные бактерии слабо приспособлены к существованию в поверхностной воде, где на них оказывают неблагоприятное действие солнечный свет и различные другие факторы, включая конкурентную водную микрофлору, многие из них могут достаточно длительное время сохраняться. В летнее время при наличии в воде органических веществ, щелочной рН и благоприятной температуры некоторые ПМ, в том числе холерный вибрион, могут даже размножаться. Во льду ПМ могут сохраняться в течение нескольких недель и даже месяцев. Подземные воды также могут содержать ПМ, особенно это относится к безнапорным потокам в четвертичных отложениях, но количество ПМ в них существенно меньше за счет сорбции на грунтах зоны аэрации и перекрывающих водонесные горизонты толщах.

Зона гипорейка. Под зоной гипорейка понимается водонасыщенная область отложений ниже дна реки, в пределах которой происходит активный обмен между поверхностными и грунтовыми водами (Шестаков и др., 2009). Особенность данной зоны заключается в том, что речная вода поступает в нее и возвращается обратно, обмениваясь с находящимися там же грунтовыми водами (рис. 5.8). Это взаимодействие происходит достаточно быстро. Важность гидрологического обмена между потоками в этой зоне состоит в том, что он сохраняет поверхностную воду в тесном контакте с химически активными минеральными покрытиями и микробными колониями в пространстве ниже поверхности земли, и это расширяет биогеохимические реакции, которые влияют на качество воды ниже по течению реки.

Протекающая через зону гипорейка речная вода несет питательные вещества, химикалии и органический материал, необходимые для гипорхеоса, — совокупность живых организмов, присутствующих в зоне гипорейка постоянно или временно. Обменные процессы в зоне гипорейка заключаются в:

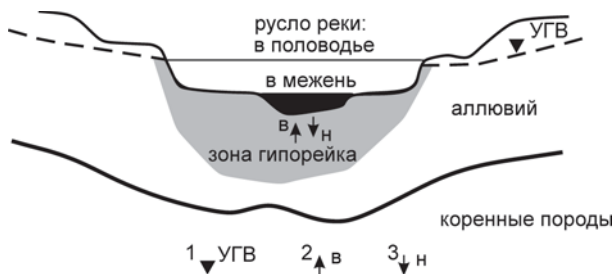


Рис. 5.8. Схематичное представление сечения долины реки и зоны гипорейка (Шестаков и др., 2009).

1 — уровень грунтовых вод (УГВ); 2 — поток подземных вод в реку; 3 — поток поверхностных вод вниз.

- физическом взаимодействии (температура);
- химических реакциях, в которых участвуют разные компоненты (кислород, углерод, азот, фосфор, металлы, органические материалы и др.);

- биологических взаимодействиях (микробы, мезофауна, макробеспозвоночные, макрофиты).

Температура. Грунтовые воды влияют на поверхностный поток, изменяя температуру воды в реке, что влияет на скорость многих обменных процессов. Температурные изменения, произведенные притоком грунтовых вод, могут влиять на величину и, возможно, даже на направление обменных процессов между поверхностными и грунтовыми водами в зоне гипорейка ниже по течению реки.

Химические реакции. В естественных условиях речные и подземные воды привносят в зону гипорейка разнообразные растворенные компоненты химического состава, такие как нитраты, хлориды, кислород, железо, марганец, органический и неорганический углерод, медь, цинк, магний, литий, фосфор. Своеобразным показателем качества воды в реке являются донные осадки, аккумулирующие контаминанты, поступающие с водосбора в течение длительного промежутка времени. Загрязняющие вещества из донных отложений с потоками поверхностной воды проходят в зону гипорейка и подвергаются там физическим, химическим и биологическим превращениям. В этом состоит прикладная сторона проблемы загрязнения потоков в зоне гипорейка.

Биологические взаимодействия. Микробные сообщества в отложениях зоны гипорейка служат катализатором биогеохимических интегральных процессов в потоках углерода и питательном цикле. Подтверждено, что биологические и физические процессы внутри зоны гипорейка могут значительно модифицировать химический состав промежуточной воды при ее продвижении между входом из реки и возвращением в реку и/или замедлить растворение. Проводимость отложений и скорости потоков воды в отложениях зоны гипорейка будут влиять на возобновление кислорода и выбор конечных электронных получателей.

Учет возможного загрязнения воды в скважинах водозабора может быть выполнен следующими способами:

- подготовкой (реабилитацией) воды для различных целей водопользования непосредственно в месте ее отбора для водоснабжения;
- санитарной охраной источников водоснабжения в процессе их эксплуатации, что для береговых водозаборов выражается в организации второго пояса зоны санитарной охраны (ЗСО).

5.3. О вероятностном подходе к оценке параметров зоны захвата скважины в естественном фильтрационном потоке

Традиционная трактовка нейтральной линии тока как контрастной границы разделения потоков не является строгой при рассмотрении реальных водоносных горизонтов, характеризующихся пространственной изменчивостью проницаемости. Вариации проницаемости и связанные с ней локальные флуктуации поля скоростей фильтрации (а также гидродисперсионные эффекты) обуславливают вероятность поступления вещества к эксплуатационной скважине из области, которая находится за границей зоны, оконтуренной «нейтральной» линией тока (рис. 5.9). Таким образом, можно предположить, что рассчитываемые границы зон захвата являются в определенном смысле условными.

Для количественной оценки уровня этой «условности» используется стохастический подход к расчетному обоснованию зон захвата (Franzetti, Guadagnini, 1996). В указанной работе авторы в качестве альтернативы подходу с детерминированной нейтральной (водораздельной) линией тока предлагают рассматривать семейство линий тока $y_i(x_i)$, каждая из которых характеризует ту или иную вероятность захвата вещества водозаборным устройством в случае появления источника в i -й точке с координатой (x_i, y_i) .

Было показано (Franzetti, Guadagnini, 1996), что для скважины, находящейся в бытовом потоке подземных вод (удельный расход $v_0 m$), уравнение семейств линий тока имеет следующий вид:

$$\xi = -\frac{\eta}{\operatorname{tg} [\zeta(P_1)\eta]} \left(\xi = \frac{2\pi v_0}{q} x, \eta = \frac{2\pi v_0}{q} y \right), \quad (5.46)$$

причем $q = Q/m$ — удельный дебит откачки; $\zeta(P_1)$ — «эмпирическая функция распределения», определяемая из соотношения

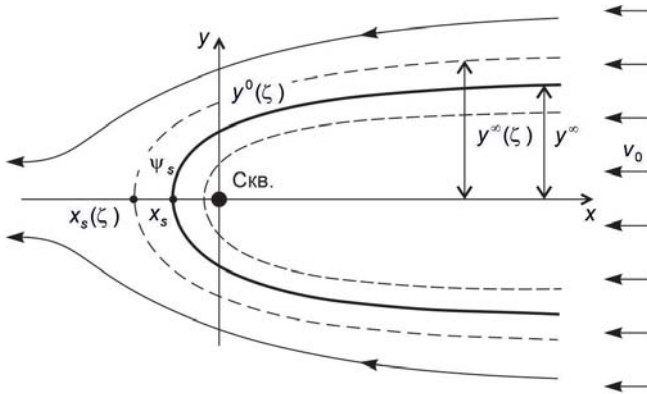


Рис. 5.9. Откачивающая скважина в естественном фильтрационном потоке.

Жирная линия — граница зоны захвата, определяемая решением детерминированной задачи (5.9); *штриховые линии* — положение водораздельных линий, отвечающих различным вероятностям захвата регионального потока скважиной.

$$P_1 = \Phi\left(\frac{\ln \zeta}{\sigma_\beta}\right), \quad (5.47)$$

$$\Phi(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) dz, \quad z = \frac{\ln \zeta}{\sigma_\beta}, \quad \sigma_\beta^2 = 0.8 \sigma_Y^2 [1 + 0.1\sigma_Y^2], \quad (5.47a)$$

где P_1 — вероятность, σ_Y^2 — дисперсия логарифма коэффициента фильтрации. Координаты характерных точек «вероятных» линий тока для данной геометрии потока определяются из соотношений

$$x_s(\zeta) = -\frac{q}{2\pi\zeta v_0}, \quad y^\infty(\zeta) = \pm \frac{q}{2\zeta v_0}, \quad (1.226)$$

которые, как видно, оказываются подобными формулам (5.7) и (5.8).

Из анализа структуры представленных формул и исходных предпосылок следует, что любая точка пласта (x, y) может быть охарактеризована значением, которое отвечает вероятности подтягивания к скважине вещества, поступившего в гетерогенный пласт в точке (x, y) . Чем более низкий уровень вероятности мы зададимся, тем шире будет зона захвата, околонтурная «линией равновероятного захвата». Частные данные приведенной таблицы иллюстрируют типовой диапазон изменения функции — при фиксированных P_1 и σ_Y^2 .

Таблица

**Значения функции $\ln \zeta$
при различных параметрах P_1 и σ_Y^2**

σ_Y^2	P_1		
	0.1	0.5	0.9
0.1	-0.11	0	0.11
1.0	-0.39	0	0.39

Согласно этим данным, например, при $P_1 = 10\%$ (т. е. допускается 10%-ная вероятность привлечения вещества к водозаборной скважине-источнику) и $\sigma_Y^2 = 1.0$ следует ожидать полуторакратное расширение области захвата по сравнению с традиционно используемыми ограничениями.

Очевидно, выбор численных значений вероятностной характеристики (при известных ориентировочных значениях σ_Y^2) должен определяться характером потенциального техногенного воздействия на пласт и особенностями гидрогеологических условий района. Так, более низкие значения P_1 должны соответствовать ситуациям эксплуатации водозабора в условиях, когда не исключено появление источника загрязнения с высокотоксичными соединениями. В трещиноватых породах, отличающихся обычно повышенной степенью фильтрационной неоднородности (σ_Y^2 нередко > 2), зоны равновероятного захвата загрязнения заметно шире по сравнению с пористыми, более однородными породами (при одних и тех же величинах P_1).

5.4. Расчет параметров ЗСО с использованием модельного комплекса ANSDIMAT

Рассмотренные модели предназначены для анализа довольно ограниченного круга задач, в значительной степени идеализирующих природную обстановку и условия эксплуатации реальных водозаборов. На практике возникает необходимость учета взаимодействия систем водозаборных скважин, меняющегося во время дебита откачки из них воды, а также произвольной ориентации вектора скорости естественного потока. В этой связи стандартом стало обращение к математическому моделированию фильтрации и массопереноса на сеточных моделях. Не менее востребованными являются методы аналитического моделирования, основанные на суперпозиции набора аналитических

функций. Так, хорошей альтернативой сеточным моделям для расчета ЗСО является расчетный модуль, встроенный в программный комплекс ANSDIMAT (Синдаловский, 2014; Sindalovskiy, 2017). Дадим его краткую характеристику и проиллюстрируем возможности несколькими примерами.

5.4.1. Краткая характеристика программы

Программа определяет размер, площадь и координаты двух поясов зон санитарной охраны (ЗСО-2 и ЗСО-3) для произвольного количества откачивающих скважин, включенных в модельную область. При расчете учитываются: границы области фильтрации, градиент и направление естественного потока подземных вод, фильтрационные параметры горизонта, пористость, схема расположения скважин, их производительность и режим водоотбора.

Суперпозиция элементарных решений для функции понижения от скважины и функции напора невозмущенного фильтрационного потока (см. разд. 5.1.1) позволяет рассчитать поле напоров. Начальное положение частицы задается произвольным образом. Каждое последующее положение частицы определяется исходя из направления вектора максимального градиента напоров $(I_i)_{\max}$. Их скорость вычисляется по формуле

$$\bar{u}_i = \frac{k}{n} (I_i)_{\max}, \quad (5.49)$$

где k — коэффициент фильтрации водоносного пласта, м/сут; n — пористость; u — действительная скорость фильтрации, м/сут.

При расчете границ ЗСО определяются координаты траекторий, замыкающихся на скважине, на заданный момент времени. В плано-неоднородном пласте скорость определяется свойствами зоны (k, n) , в которой движется частица.

По найденным линиям тока и скоростям вычисляется время движения частицы для поясов ЗСО-2 или ЗСО-3. Время прохождения частицы до водозабора выражается следующей суммой:

$$t = \sum_{i=1}^j \Delta t_i = \sum_{i=1}^j \frac{s_i}{u_i}, \quad (5.50)$$

где j — количество интервалов, сумма которых равна длине траектории перемещения частицы за время t ; s_i — длина i -го интервала, м; t — время прохождения частицы от произвольной точки до водозабора, сут; t_i — время прохождения частицы от произвольной точки до окончания i -го интервала, сут; $\Delta t_i = t_i - t_{i-1}$ — время прохождения частицей одного i -го интервала, сут; v_i — действительная скорость фильтрации для i -го интервала, м/сут.

ЗСО описывается границей, определяемой областью захвата (рис. 5.10). Рассчитывается площадь этой области, а также длина и шири-

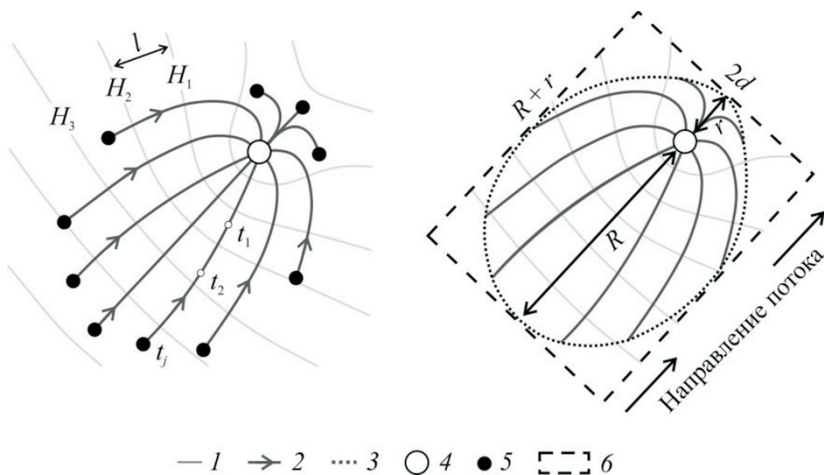


Рис. 5.10. Схема фильтрации подземных вод к водозабору.

1 — линии равных напоров; 2 — линии тока; 3 — граница ЗСО; 4 — водозабор; 5 — точки контура ЗСО; 6 — площадь ЗСО.

на прямоугольника, который включает область захвата. Длина равна сумме максимальных расстояний от центра водозабора до границы зоны вверх ($R = x_u$) и вниз ($r = x_d$) по потоку, а ширина ($2d$) равна максимальной ширине области захвата. Площадь прямоугольника превышает площадь области захвата.

Программа рисует линии тока (траектории движения частиц) вокруг каждой опытной скважины в пределах области захвата и точками показывает границы двух поясов. Длина траектории соответствует времени ее прохождения частицей за расчетное время (например, 25 лет для ЗСО-3). Траектории движения частиц обрываются на границах фильтрационного потока. В случае, если зона санитарной охраны выходит за границу аналитической модели, пояса будут определяться за пределами видимой на экране области.

В режиме расчета ЗСО пользователь имеет возможность наблюдать траектории и скорости движения в плане нейтрального трассера (частицы), запущенного из любой координаты модельной области. Движение частицы сопровождается информацией о длине траектории и времени ее прохождения.

5.4.2. Пример расчета зоны санитарной охраны для группового водозабора

Рассчитаем конфигурацию ЗСО-3 ($t = 25$ лет) для водозабора, представленного тремя эксплуатационными скважинами, расположенными вблизи реки (рис. 5.11). Ими производится отбор воды из напорного гори-

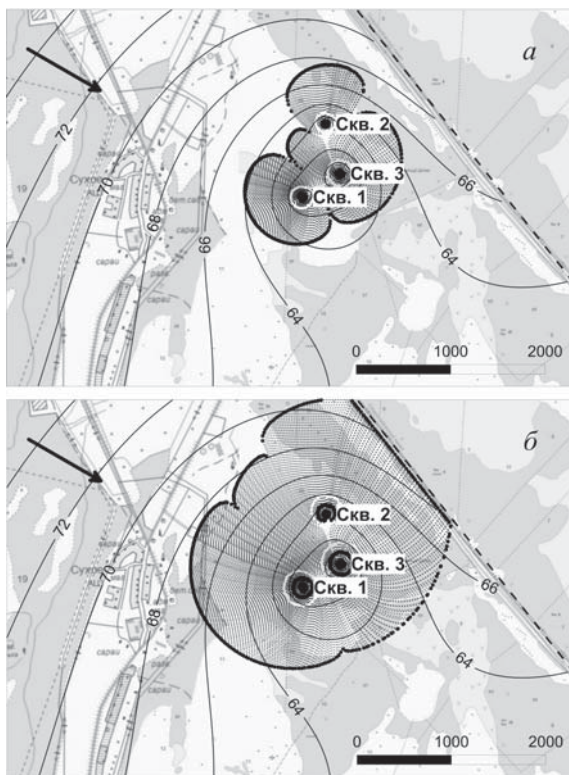


Рис. 5.11. Конфигурация зон захвата куста водозаборных скважин при значениях пористости пород 0.3 (а) и 0.1 (б).

зонта, характеризующегося проводимостью $T = 100 \text{ м}^3/\text{сут}$. Дебит скважин различается: $Q_1 = 1000 \text{ м}^3/\text{сут}$, $Q_2 = 700 \text{ м}^3/\text{сут}$ и $Q_3 = 1500 \text{ м}^3/\text{сут}$. Градиент естественного потока $I = 2 \cdot 10^{-3}$, вектор скорости фильтрации направлен на юго-восток.

На графиках (рис. 5.11) показаны зоны захвата ($t = 25$ лет), рассчитанные при двух значениях пористости горизонта: $n = 0.3$ (рис. 5.11, а) и $n = 0.1$ (рис. 5.11, б). Как видно, в первом случае эксплуатация всех скважин происходит без привлечения речных вод. Во втором случае фронт речных вод достигает двух из трех водозаборных скважин. Такие различия объясняются различными действительными скоростями движения частиц воды, контролируемые пористостью.

5.4.3. Влияние инфильтрационного питания

В программном комплексе ANSDIMAT заложена возможность решения задачи фильтрации в пласте-полосе (рис. 5.12) к скважинам при начальном условии (5.24), т. е. возможность учета инфильтрационного питания. Пример такого решения для одиночной скважины, расположенной в двух характерных зонах потока (вблизи водораздела и вблизи одной из рек), представлен на рис. 5.12, *а, в*. Дебит скважины $Q = 1000 \text{ м}^3/\text{сут}$, проводимость $T = 50 \text{ м}^2/\text{сут}$, $m = 50 \text{ м}$, пористость $n = 0.1$, расчетное время $t = 25 \text{ лет}$ (что отвечает стандартным требованиям к ЗСО-3).

На этом же рисунке (рис. 5.12, *б, г*) приведены расчеты для осредненной скорости фильтрации, рассчитанной по среднему градиенту: $I = (H_2 - H_1)/a$.

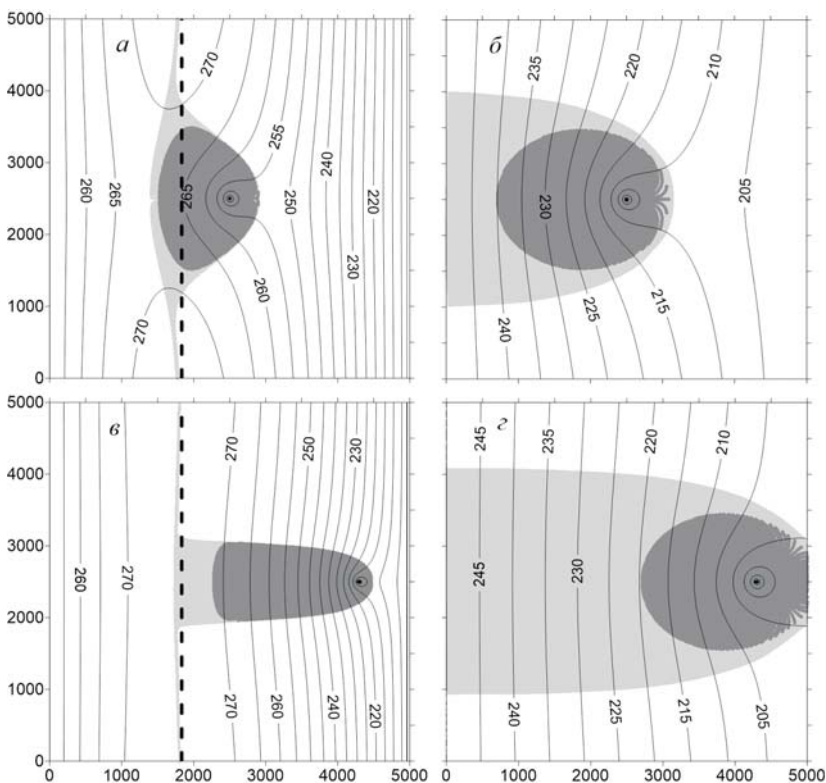


Рис. 5.12. Конфигурация пояса ЗСО-3 при включении площадной инфильтрации в расчетную модель (*а, в*) и при осреднении градиента напора по оси x $H(x)$ (*б, г*).

Сплошные линии — гидроизогипсы (линии равного напора); темно-серым цветом показана ЗСО-3 ($t = 25 \text{ лет}$), светло-серым цветом — предельная зона захвата, отвечающая нейтральной линии тока.

Различия в конфигурации и размерах ЗСО весьма ощутимы. Например, можно заметить, что в случае расположения водозабора в центральной части рассматриваемой области приближенный расчет с использованием среднего гидравлического градиента дает зону захвата вверх по потоку, примерно в два раза превышающий соответствующий раздел в случае, когда учитывается инфильтрация, причем можно видеть, что ЗСО-3 выходит за контур водораздела. Инфильтрационное питание, способствуя росту скоростей фильтрации в горизонте, также препятствует проникновению к водозабору речных вод (рис. 5.12, в). Эти воды, как видно (рис. 5.12, г), легко достигают водозабора, когда роль инфильтрации незначительна. Таким образом, явное представление в расчетной схеме параметра инфильтрационного питания является необходимым элементом прогнозных оценок, связанных с расчетом зон санитарной охраны водозаборов подземных вод.

Глава 6

ИЗМЕНЕНИЕ КАЧЕСТВА ПОДЗЕМНЫХ ВОД ПРИ ПОДТЯГИВАНИИ К ВОДОЗАБОРАМ ПРИРОДНЫХ НЕКОНДИЦИОННЫХ ВОД ИЛИ ПРИ НАРУШЕНИИ ПРИРОДНЫХ ГИДРОХИМИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ

При обосновании эксплуатации водозаборов третьего типа (см. рисунок во введении к разделу) прогнозируется смещение разной степени контрастности границ раздела пресных и соленых вод, происходящее в условиях «деформированных» фильтрационных потоков. В соответствующих прогнозах пренебрегают процессами физико-химического взаимодействия, ограничиваясь обычно сочетанием двумерных плановых (в случае изменения минерализации по простиранию водоносных пород) и профильных (в случае изменения минерализации воды по глубине) моделей конвективного переноса, учитывающих при необходимости переменную плотность пластовой воды. Классическим примером таких водозаборов служат водозаборы морских побережий.

Для полноты картины формирования качества подземных вод на водозаборах вне области влияния техногенных источников загрязнения может представлять интерес и четвертый тип загрязнения подземных вод (см. рисунок во введении к разделу), обусловленный процессами в зоне аэрации — поступлением в безнапорные (эксплуатируемые) горизонты продуктов

растворения минералов из осушенной зоны пород, формирующейся за счет понижения уровня подземных вод. В отличие от предыдущего типа загрязнения прогнозирование качества воды требует анализа гидрогеохимических процессов, инициированных водоотбором.

Актуальность расчетов традиционных поясов ЗСО уходит на второй план.

6.1. Субгоризонтальная миграция от подземного источника природных некондиционных вод

6.1.1. Вводные замечания и иллюстративный пример

Изменение минерализации подземных вод (сопровожаемое часто трансформацией их ионного состава) в водоносных горизонтах в направлении простирания вмещающих пород — довольно распространенный в природе гидрогеохимический тренд, который выявляется при региональных исследованиях. Формирование такого рода гидрогеохимической («пластовой») зональности в различных регионах имеет различную природу. В артезианских бассейнах увеличение минерализации может быть связано с замещением древних соленых вод инфильтрационными пресными водами. Наблюдаемое изменение минерализации в плане может также являться следствием профильной гидрохимической зональности в наклонно падающем пласте, представленном крылом синклинальной структуры (Румынин, 2011: 565).

Плановая зональность минерализации и состава подземных вод отмечается, например, в вендском водоносном комплексе, являющемся частью гидрогеологической системы северо-западного крыла Ленинградского артезианского бассейна (рис. 6.1 и 6.2). Изолиния минерализации 1 г/л проходит несколько севернее г. Сестрорецка.

На представленном схематическом геологическом разрезе по линии Приозерск—С.-Петербург—Валдай (рис. 6.2) видно, что с северо-запада на юго-восток на расстоянии примерно в 300 км происходит стократное увеличение минерализации. В краевой части бассейна (зоне выклинивания вендских пород) располагается зона слабоминерализованных вод гидрокарбонатного типа. Далее следует зона пресных и солоноватых вод. За ней идет зона хлоридных вод, представляющая собой область глубоких древних рассолов артезианского бассейна.

Вендский водоносный комплекс отделен (за исключением самой северной части территории) от дневной поверхности мощным региональным водоупором и является хорошо защищенным от техногенных загряз-

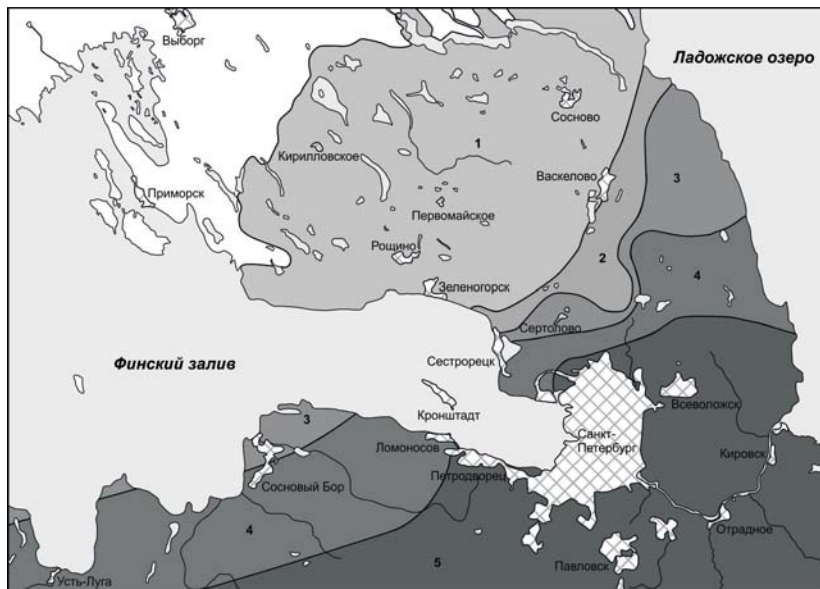


Рис. 6.1. Области распространения подземных вод вендского комплекса с различной минерализацией.

1 — < 0.5; 2 — < 1.0; 3 — < 1.5; 4 — < 3.0; 5 — > 3.0 г/л.

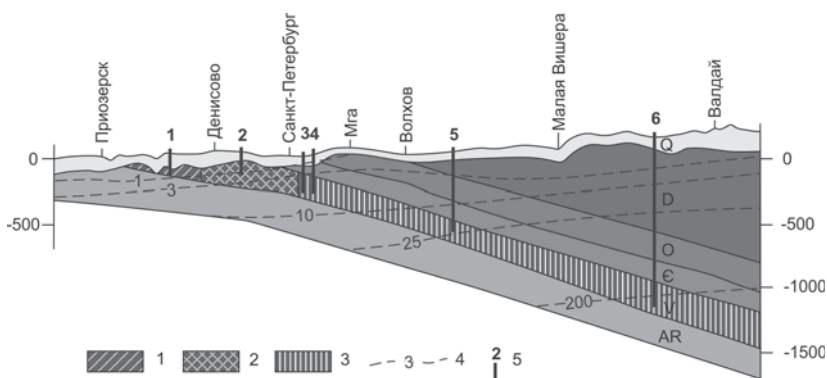


Рис. 6.2. Схематический гидрогеохимический разрез вендского водоносного комплекса по линии Приозерск—С.-Петербург—Валдай. По материалам А. А. Шварца и А. М. Никуленкова.

1—3 — гидрохимические типы вод (1 — $\text{HCO}_3\text{-Ca-Na}$, 2 — $\text{HCO}_3\text{-Cl-Na}$, 3 — Cl-Na);
 4 — изолиния минерализации, г/л; 5 — скважина и ее условный номер, отвечающий географической привязке (1 — п. Мичуринское, 2 — п. Агалатово; 3 — г. СПб., ул. Ленсовета; 4 — г. Пушкин; 5 — г. Луга; 6 — п. Крестцы).

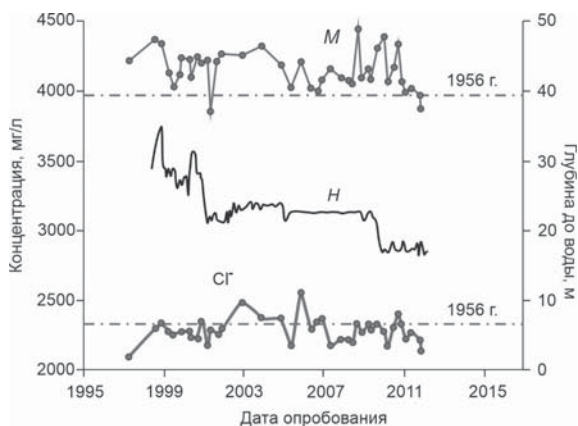


Рис. 6.3. Изменение минерализации (M), хлоридов (Cl) и глубины до уровня воды (H) в скважине, эксплуатирующей вендский водоносный комплекс в Кировском районе Санкт-Петербурга (скв. 1220095).

нений. В целом за длительный период наблюдений изменений в химическом составе подземных вод вендского водоносного комплекса не произошло (Боровицкая, Савенкова, 2007). Один из характерных примеров такой стабильности макрокомпонентного состава представлен на рис. 6.3, на котором видно, что за почти 60-ти летнюю историю эксплуатации водозабора в Кировском районе Санкт-Петербурга (скв. 1220095) отклонение концентраций от среднего значения составляют не более 10 %.

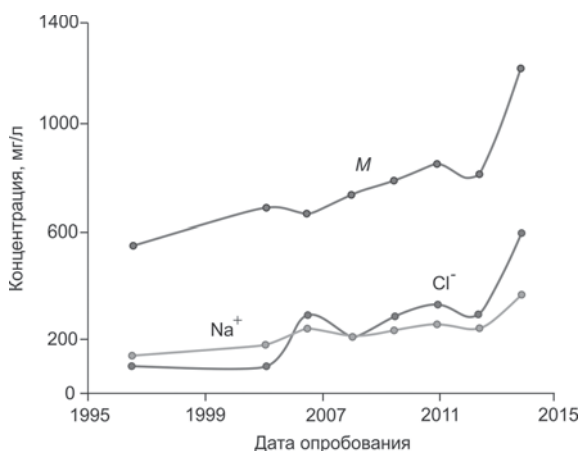


Рис. 6.4. Изменение минерализации (M), концентрации хлоридов (Cl) и ионов натрия (Na) в скважине, эксплуатирующей вендский водоносный комплекс в районе станции Белоостров.

Однако в некоторых скважинах, расположенных в зоне перехода от пресных вод к соленым (см. рис. 6.1), в процессе эксплуатации наблюдаются изменения макрокомпонентного состава воды. На рис. 6.4 представлено изменение минерализации и химического состава воды в скважине, эксплуатирующей вендский водоносный комплекс в районе станции Белоостров. Такие изменения могут быть связаны как с латеральным потоком соленой воды с юга, так и с подтягиванием соленых вод из нижней части вендских отложений, где также отмечается рост минерализации.

Для прогнозирования изменения качества подземных вод в подобных условиях используется модельный подход, основанный на поиске сеточных (численных) решений задачи миграции в водоносных пластах, характеризующихся неоднородными (по концентрации отдельных компонентов) условиями. Предварительные оценки могут быть получены в рамках несложных аналитических построений.

6.1.2. Приближенные аналитические решения

Рассмотрим эксплуатационную скважину, находящуюся в условиях потока подземных вод (рис. 6.5). Будем считать, что в область питания, распространение которой определяется конфигурацией нейтральной линии тока (разд. 5.1 и 5.2), попадает регионально выдержанная зона соленых вод (минерализация C_1), имеющих контрастную границу с эксплуатируемыми пресными водами (минерализация C_0).

Упрощенная постановка задачи (или первый этап анализа геомиграционного процесса) сводится к оценке времени подтягивания контура минерализованных вод к водозаборному узлу.

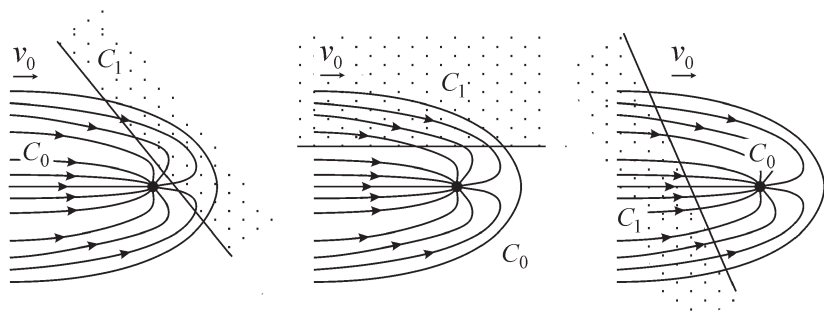


Рис. 6.5. Типовые случаи положения границы раздела вод в области питания водозабора (Гольдберг, 1976).

Это время для любой точки на границе раздела вод, характеризующейся координатами (x, y) , может быть получено из уравнения изохроны (5.9):

$$\tau = -\xi - \ln \left(\cos \eta - \frac{\xi}{\eta} \sin \eta \right), \quad (6.1)$$

$$\xi = \frac{2\pi m v_0}{Q} x, \quad \eta = \frac{2\pi m v_0}{Q} y, \quad \tau = \frac{2\pi m v_0^2}{nQ} t. \quad (6.1a)$$

Или в размерной форме (Гольдберг, 1976):

$$t = \pm \frac{n}{v_0} \left[x - x_0 \ln \left| \cos \frac{y}{x_0} + \frac{x}{y} \sin \frac{y}{x_0} \right| \right], \quad x_0 = \frac{Q}{2\pi m v_0}; \quad (6.2)$$

знак «+» или «-» берется соответственно при движении по потоку или против потока; в последнем случае абсцисса x имеет отрицательное значение.

Ориентация координатных осей относительно направления естественного потока (v_0) показана на рис. 5.3. Время поступления в скважину первых порций соленой воды зависит от положения границы соленых вод в области питания водозабора. Если граница раздела перпендикулярна оси x , то первыми будут захвачены водозабором точки контакта, пересекающие ось x (x_u и x_d) — см. рис. 5.3 и формулы (5.14). В более общем случае, когда граница проходит под углом к оси x , необходим расчет для нескольких точек контакта вод (x, y) с последующим выбором минимального $\eta(t)$.

Определение изменения минерализации воды в скважине во времени представляет более сложную задачу. В процессе водоотбора граница раздела вод деформируется, образуя язык соленых вод, движущийся в сторону водозабора (Гольдберг, 1976). После прорыва соленых вод в скважину их доля в суммарном дебите водозабора возрастает по мере расширения сектора захвата.

Относительно простое аналитическое решение можно получить для идеалистического случая расположения скважины (водозабора) в пласте, где скоростью естественного фильтрационного потока можно пренебречь, полагая $v_0 = 0$ (рис. 6.6, *a, б*) — так называемое условие бассейна. В этом случае миграция соли происходит по радиальным траекториям, а время нахождения частиц в потоке для различных точек, первоначально находящихся на границе вод, прежде чем они достигнут скважины, будет различным.

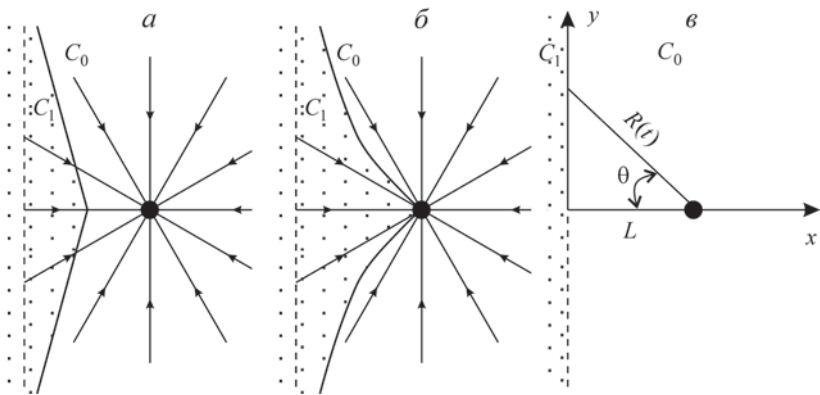


Рис. 6.6. К расчетной схеме для оценки смещения планового контакта между пресной (C_0) и соленой (C_1) водой.

a и b — динамика фронта соленой воды; c — геометрические характеристики, используемые при решении задачи.

Изменение минерализации во времени определяется отношением расхода соленых вод $Q_c(t)$, который постоянно возрастает после захвата первых их порций, к общему расходу скважины Q :

$$C = C_0 + (C_1 - C_0) \frac{Q_c(t)}{Q}. \quad (6.3)$$

В свою очередь отношение $Q_c(t)/Q$ в радиальном потоке может быть выражено через отношение угла сектора захвата соленых вод $2\theta(t)$ к полному углу захвата потока воды, поступающей в скважину, 2π (см. рис. 6.6, c), на котором в силу симметрии потока показана его верхняя полуплоскость):

$$Q_c(t)/Q = 2\theta/2\pi = \theta/\pi. \quad (6.4)$$

Угол $\theta(t)$ образован вектором-траекторией $R(t)$ и направлением координатной оси x (рис. 6.6, c). При заданном расстоянии до границы раздела L этот угол определяется зависимостью:

$$\cos \theta = \frac{L}{R(t)}, \quad \text{или} \quad \theta = \arccos \frac{L}{R(t)}. \quad (6.5)$$

Расстояние $R(t)$, отсчитываемое от своего минимального значения $R = L$, вычисляется по простой формуле для осесимметричного потока

$$R(t) = \sqrt{\frac{Qt}{\pi mn}}. \quad (6.6)$$

Подставляя (6.4) с учетом зависимостей (6.5) и (6.6) в формулу (6.3), получаем окончательное решение задачи для определения изменения минерализации воды в скважине:

$$C = C_0 + (C_1 - C_0) \frac{1}{\pi} \arccos \sqrt{\frac{T}{t}}, \quad t \geq T, \quad (6.7)$$

где T — время миграции частиц соли от границы по кратчайшей линии тока ($y = 0$):

$$T = \frac{\pi mnL^2}{Q}. \quad (6.7a)$$

В пределе, $t \rightarrow \infty$, из решения (6.7) следует, что максимальная минерализация воды в скважине будет равна среднеарифметическому значению

$$C_{\max} = (C_0 + C_1)/2. \quad (6.8)$$

В плано-неоднородном по фильтрационным свойствам пласте гидрогеохимическая граница нередко совпадает с границей раздела двух зон, различающихся гидравлической проводимостью, причем более минерализованные ($C = C_1 > C_0$) воды сосредоточены в зоне с низкой (T_1) проводимостью ($T_1 < T_0$). Соответствующее этому случаю решение получено П. К. Коносовским (Мируненко, Румынин, 1998, с. 552—555). Максимальная (при $t \rightarrow \infty$) минерализация при этом определяется соотношением проводимостей:

$$C_{\max} = C_0 + (C_1 - C_0)/(1 + \bar{T}), \quad (6.9)$$

где $\bar{T} = T_0/T_1$.

При наличии переходной зоны от пресных к соленым водам используется суперпозиция решений вида (6.7), так что минерализация воды в водозаборе находится по формуле

$$C = C_0 + \sum_1^n \frac{(C_n - C_{n-1})}{\pi} \arccos \sqrt{\frac{T_n}{t}}, \quad (6.10)$$

где n — число полос, аппроксимирующих переходную зону, T_n — время подтягивания к водозабору n -й полосы соленых вод, характеризующейся минерализацией C_n .

6.2. Субвертикальная миграция от подземного источника природных некондиционных вод

Необходимость в решении подобных задач возникает в связи с оценкой формирования качества подземных вод на водозаборах, эксплуатация которых происходит в условиях неодно-

родных гидрохимических разрезов, когда за счет профильной деформации гидродинамической сетки движения подземных вод вблизи несовершенных скважин (или скважины с короткими фильтрами) возникают потоки со значимыми вертикальными компонентами скорости фильтрации. В настоящем разделе рассматриваются две расчетные ситуации. Первая отвечает условиям, когда различия в минерализации вод, занимающих различные профильные зоны горизонта, не столь существенны и влиянием плотностного градиента можно пренебречь. Во второй расчетной ситуации учитывается влияние плотностного градиента на перемещение контакта пластовых растворов.

6.2.1. Решение для функции минерализации, не учитывающее влияние плотностного градиента

Первостепенный интерес представляют расчетные зависимости, отражающие: 1) время подтягивания (по кратчайшей линии тока) первых порций вещества к водозаборной скважине (T) от границы раздела вод $z = h_0$; 2) изменение минерализации C в откачивающей скважине. Влияние гидродисперсии обычно затушевывается разновременным подтягиванием к откачивающей скважине вещества в условиях сильной деформации сетки движения подземных вод, и поэтому, как и раньше, будем рассматривать миграцию в рамках расчетной схемы поршневого вытеснения. Поскольку в расчетной схеме не учитываются различия в плотности растворов, то в основе математических построений лежат линейные уравнения квазистационарной фильтрации, дополненные кинематическими уравнениями.

Пусть природные воды, различающиеся минерализацией C_0 и C_1 , изначально занимают нижнюю и верхнюю зоны пласта (рис. 6.7). Рассмотрим задачу в двух приближениях.

Первое приближение предполагает рассмотрение скважины в качестве точечного источника, располагаемого у кровли неограниченного по мощности пласта (рис. 6.7, *a*). По аналогии с плановой задачей будем считать, что минерализация воды в скважине определяется пропорцией смешения соленых и пресных вод (6.3). Однако, в отличие от плоской задачи, поступление соленой воды в скважину происходит не в пределах сектора, а в пределах конуса, основанием которого является поверхность шара, радиус которого определяется текущим временем процесса $R(t)$. Для сферической фильтрации из уравнения баланса $Qt = 4\pi R^3 n / (2 \cdot 3)$ имеем

$$R(t) = \sqrt[3]{\frac{3Qt}{2\pi n}}. \quad (6.11)$$

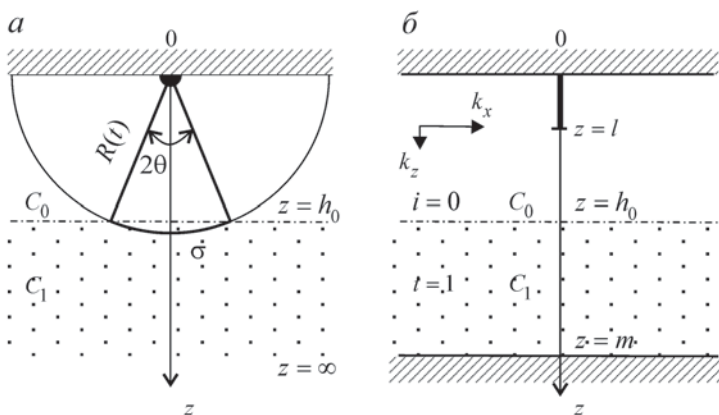


Рис. 6.7. Откачивающая скважина в условиях профильно неоднородного (начального) концентрационного распределения.

a — точечный источник в полуограниченном пласте; *б* — линейный источник в ограниченном по мощности пласте.

Очевидно, что отношение Q_c/Q будет пропорционально отношению поверхности (σ), вырезанной на сфере конусом с вершиной $z = 0$, вписанным в сферу, к половине площади общей поверхности сферы $S_{u1/2} = 4\pi R^2/2 = 2\pi R^2$, т. е.

$$\frac{Q_c}{Q} = \frac{\sigma}{S_{u1/2}} = \frac{\sigma}{2\pi R^2}. \quad (6.12)$$

Отношение σ/R^2 представляет собой телесный угол $\Omega = \sigma/R^2$, для которого справедливо определение:

$$\Omega = 2\pi(1 - \cos \theta), \quad (6.13)$$

2θ — угол раствора конуса (рис. 6.7, *a*). Поэтому

$$\sigma = 2\pi R^2(1 - \cos \theta). \quad (6.14)$$

Подставляя σ в формулу (6.12) получаем

$$\frac{Q_c}{Q} = 1 - \cos \theta. \quad (6.15)$$

Угол θ связан с радиусом $R(t)$ и глубиной до исходного контакта вод h_0 соотношением

$$\theta = \arccos \frac{h_0}{R(t)}. \quad (6.16)$$

Подставляя (6.16) в (6.15), находим решение задачи в виде

$$\frac{Q_c}{Q} = 1 - \cos \left[\arccos \left(\frac{h_0}{R(t)} \right) \right] = 1 - \frac{h_0}{R(t)}, \quad (6.17)$$

или, принимая во внимание (6.3) и (6.11), для определения текущей минерализации имеем формулу:

$$C = C_0 + (C_1 - C_0) \left(1 - \sqrt[3]{\frac{T}{t}} \right), \quad t \geq T, \quad (6.18)$$

где T — время миграции соли по кратчайшей линии тока:

$$T = \frac{2\pi h_0^3 n}{3Q}. \quad (6.19)$$

Зависимость (6.18) иногда называют формулой М. Д. Миллионщикова.

Второе приближение отвечает более общему случаю пласта конечной мощности m , водоотбор из которого осуществляется из несовершенной скважины с фильтром конечной длины l , примыкающим к кровле пласта (рис. 6.7, б). Решение получено в работе (Кисель, Абрамов, 1978) и имеет вид

$$C(t) = C_0 + (C_1 - C_0) \left(1 - \frac{f_0}{\beta} \right), \quad (6.20)$$

где функция $f_0 = f(0, \bar{t})$ находится из трансцендентной формулы

$$\bar{t} = \beta \kappa^2 \left[\frac{(1 - f_0^3) \beta^2}{f_0^3} - 3f_0(1 - f_0) \right]. \quad (6.21)$$

Решение (6.21) справедливо при выполнении условия

$$\bar{t} > \bar{t}_0 = \kappa^2(1 + 2\beta^3 - 3\beta^2), \quad (6.21a)$$

где \bar{t}_0 — безразмерное время подтягивания границы раздела вод к скважине; $\kappa = \sqrt{k_r/k_z}$ — коэффициент анизотропии (k_z — коэффициент фильтрации в вертикальном направлении); $\beta = l/h_0$ (l — длина фильтра); Q — объемный расход скважины; $\bar{t} = t/T$; $\bar{t}_0 = t_0/T$; T — «нормирующая» временная характеристика, отвечающая времени подтягивания границы раздела вод в изотропном пласте ($\kappa = 1$) к скважине с коротким фильтром ($\beta = 0$) — точечный источник (6.19).

Анализ графических зависимостей $\bar{C}(t)$ (рис. 6.8) показывает, что процесс в целом сильно «растянут» во времени: кратковременный период достаточно быстрого нарастания концентрации сменяется длительным периодом весьма медленных изменений функции $\bar{C}(t)$. Анизотропия фильтрационных свойств проявляется в смещении графиков по оси \bar{t} примерно на величину k_r/k_z .

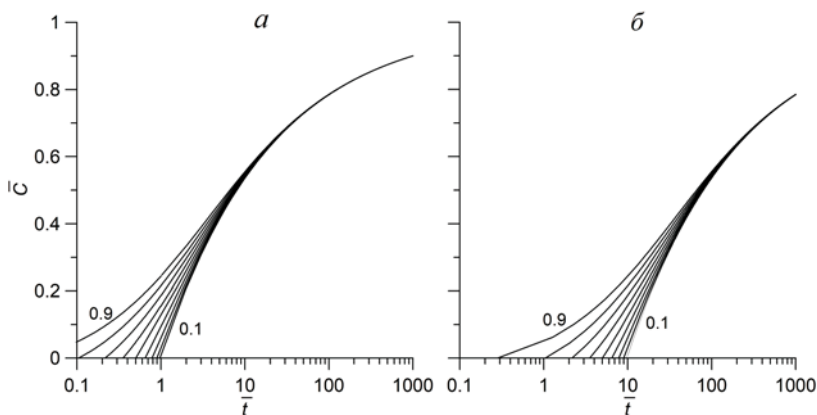


Рис. 6.8. Графики функций \bar{C} для солепереноса в изотропном ($\kappa = 1 - a$) и анизотропном ($\kappa = \sqrt{10 - b}$) пластах.

Числа у кривых — параметр β .

Анализ решений, полученных для вычисления характеристики \bar{t}_0 при расположении скважины в ограниченном по мощности пласте, показывает, что влиянием подошвы пласта на величину \bar{t}_0 , рассчитываемую по (6.21a), заведомо можно пренебречь, если толщина (h_0) верхнего слоя воды (с концентрацией маркирующего компонента C_0) не превышает половины мощности (m) пласта, т. е. когда $h_0/m \leq 1/2$.

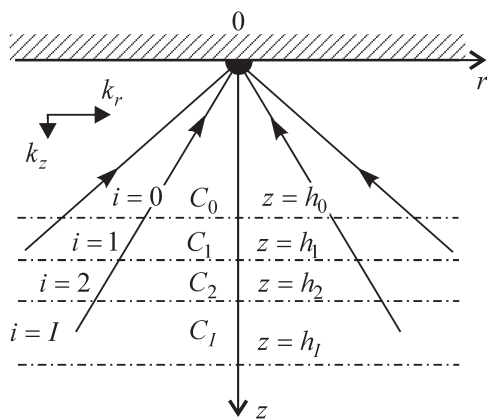


Рис. 6.9. Скважина (точечный источник) в полуограниченном пласте, в котором переходная зона между пресной и соленой водой аппроксимирована ступенчатой функцией.

При наличии переходной зоны от пресных вод к минерализованным используется суперпозиция решений вида (6.18) и (6.20). Так, для скважины с коротким фильтром ($\beta = 0$) в соответствии с (6.18) имеем

$$C(t) = C_0 + \sum_1^I (C_i - C_{i-1}) \left(1 - \sqrt[3]{\frac{t_{i-1}}{t}} \right), \quad t_{i-1} = \frac{2\pi\kappa^2 n h_{i-1}^3}{3Q}, \quad (6.22)$$

где I — номер нижнего расчетного слоя ($I + 1$ — общее число слоев с постоянной концентрацией C_i , аппроксимирующих изменение содержания компонентов по мощности пласта); i — текущий номер слоя ($i = 0$ отвечает верхнему слою с фоновой концентрацией C_0) — см. рис. 6.9; t_{i-1} — время начала поступления минерализованных вод от верхней границы i -го расчетного слоя, залегающей на глубине h_{i-1} ; оно определяется по второй формуле (6.19), в которой h_0 необходимо заменить на h_{i-1} .

6.2.2. Равновесный купол соленых вод под несовершенной эксплуатационной скважиной

6.2.2.1. Общие представления о процессе и основные подходы

Данная задача относится к ряду классических задач в теории фильтрации подземных вод. Она представляет интерес в связи с оценкой качества подземных вод, эксплуатируемых в условиях неоднородных гидрохимических разрезов. Такого рода условия встречаются, например, в прибрежных водоносных горизонтах, приподошвенная часть которых занята интрузией морских или океанических вод. Нарушение естественной гидрохимической зональности в платформенных областях является причиной ухудшения качества дренажных вод на ряде эксплуатируемых месторождений полезных ископаемых (Мироненко и др., 1988).

Эксплуатация несовершенной скважины, фильтр которой вскрывает верхнюю часть водоносной толщи (или в более широком смысле к несовершенному контуру дренирования водоносной толщи), приводит к формированию «купола» («языка») соленых вод (рис. 6.10). В реальных условиях язык соленых вод может либо прорваться в скважину, что приводит к нарастанию в откачиваемых водах содержания водорастворенных солей, либо занять относительно стабильное положение, не достигнув ее фильтра. Это зависит от дебита скважины, различий в удельном весе пресных и соленых вод, а также параметров, характеризующих скважину и пласт. Максимально возможный дебит (Q^*), при котором не происходит прорыва соленой воды в скважину, называется *предельным дебитом*; этой характеристике

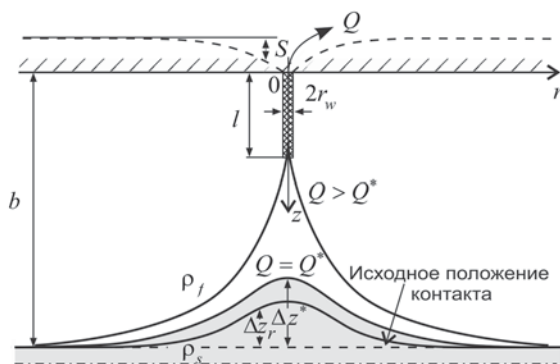


Рис. 6.10. Концептуальная схема формирования купола минерализованных вод под эксплуатационной скважиной.

процесса отвечает величина Δz^* — *высота купола соленых вод* в предельном равновесии (рис. 6.10). Несмотря на повышенный интерес многих исследователей к проблеме куполообразования и большое количество опубликованных работ, точной теории соляного конуса не существует ввиду чрезвычайной сложности задачи.

Аналитические решения даются в предпосылке о резкой границе раздела между разноплотностными жидкостями (когда гидродисперсией можно пренебречь). С математической точки зрения решение задачи о субвертикальном подтягивании профильной границы соленых вод к скважине может основываться на двух подходах (методах).

Первый подход базируется на предпосылке о стационарности (неподвижности) нижней, более тяжелой, жидкости, так что ее контакт с верхней, более легкой, жидкостью является для последней непроницаемой границей. Тогда можно предположить, что выполняется соотношение Гибена—Герцберга (см. также разд. 6.3.1.1), согласно которому величина подъема контакта разновесомых жидкостей $\Delta z_r = \Delta z(r)$ (рис. 6.10) пропорциональна понижению напора $S(r, z = b)$, вызванного откачкой пресной воды, т. е.

$$\Delta z_r = b - z(r) = \frac{1}{\Delta \bar{\rho}} S(r, z = b), \quad (6.23)$$

где b — начальная мощность зоны, занятой легкой (например, пресной водой) жидкостью [L]; r — радиальная координата [L]; $\Delta \bar{\rho}$ — плотностный градиент ($\Delta \bar{\rho} = (\rho_s - \rho_f)/\rho_f$; ρ_s и ρ_f — плотность пресной и соленой воды); S — понижение напора [L].

К формуле (6.23) мы приходим, интегрируя соотношение Гибена—Герцберга, записанное в дифференциальной форме

$$-dz = -\frac{1}{\Delta\rho} dh, \quad \int_b^z dz = \frac{1}{\Delta\rho} \int_{h_b}^h dh, \quad (6.24a)$$

$$(z - b) = \frac{1}{\Delta\rho} (h - h_b) = -\frac{1}{\Delta\rho} S(r). \quad (6.24б)$$

Гидростатическая модель (6.23) определяет пространственные координаты линий тока, вдоль которых частицы пресной воды перемещаются по поверхности соленой воды в предположении, что изменение напора в зоне пресных вод приводит к мгновенному достижению нового равновесного положения границей раздела (Bear, 1979; Motz, 1992).

Однако модель (6.23) адекватно описывает соотношение между Δz_r и $S(r, z = b)$ только до тех пор, пока не будет превышено некоторое критическое значение $\Delta z^* = \Delta z_r = (r = r_w)$, r_w — радиус скважины. В этом контексте Δz^* — высота, при подъеме на которую конус под скважиной становится нестабильным (теряется линейная связь между функцией Δz_r и величиной понижения S). Нестабильность контакта приводит к тому, что соленая вода весьма быстро («скачком») подтягивается к водозаборной скважине.

Характеристика Δz^* обычно определяется в терминах $\theta(b - l)$, где θ — *априорно* задаваемое отношение между критической величиной подъема и расстоянием между начальным положением контакта ($z = b$) и забоем скважины ($z = l$). Поэтому уравнение (6.23) может быть переписано в виде соотношения

$$\Delta z^* = \theta(b - l) = \frac{1}{\Delta\rho} S(r_w, z = b), \quad (6.25)$$

используемого и для нахождения критической величины Q^* . Значение θ , согласно различным исследованиям, может меняться от 0.25 до 0.89.

Второй подход позволяет избавиться от неопределенности расчетов, связанных с априорным заданием величины θ . Для этого при определении пространственных координат поверхности раздела жидкостей в предельном положении необходимо задаться одновременным выполнением двух условий (Bower et al., 1999):

— *первое*: давление на контакт разновесомых жидкостей со стороны пресной воды (P_f) при снижении напора в ней на величину $S = S(r, z)$ равно давлению на контакт со стороны соленой воды (P_s); использование соотношения Гибена—Герцберга (Bear, 1972) для этого условия приводит к равенству вида

$$\Delta z_r^* = \frac{1}{\Delta\rho} S(r, z = b - \Delta z_r^*); \quad (6.26)$$

— второе: вертикальные градиенты давления на поверхности раздела жидкостей в состоянии равновесия также должны быть равны, $\partial P_f / \partial z = \partial P_s / \partial z$, или

$$\frac{\partial S(r, z = b - \Delta z_r^*)}{\partial z} = -\Delta \bar{\rho}. \quad (6.27)$$

Физически последнее условие означает, что потенциальная скорость гравитационного опускания контакта под влиянием силы тяжести $v_p = k_z \Delta \bar{\rho}$ равна скорости вертикальной фильтрации воды в точке (r, z) , $v_z = -k_z \partial S / \partial z$, k_z — коэффициент фильтрации в вертикальном направлении.

Фактически к подобной системе уравнений при оценке положения равновесного купола подошвенных вод на нефтяных месторождениях пришли в свое время авторы более ранних работ. Так, И. А. Чарный отмечал, что такого рода оценка справедлива в предпосылке о «невозмущенном» потоке жидкости, когда «стеснение потока, вызываемое конусом, отсутствует» (Чарный, 1963, с. 208). Поэтому реальное значение предельного дебита будет несколько меньшим по сравнению с оценкой, основанной на ниже рассматриваемом подходе.

Менее разработанными являются модели, описывающие динамику куполообразования в области $Q > Q^*$, когда происходит захват соленых вод эксплуатационной скважиной. В этом случае основной интерес представляет описание закономерностей изменения концентрационной функции, в которой находит отражение смешение пресных и соленых вод (Румынин, 2011).

6.2.2.2. Пример расчета предельного дебита для равновесного купола соленых вод

Пусть функция безразмерного понижения $\bar{S} = \bar{S}(\bar{r}, \bar{z})$ и ее производная $\partial \bar{S} / \partial \bar{z}$ для условий стационарной фильтрации в пласте с непроницаемой кровлей и подошвой при наличии круговой границы первого рода (при $r = R$, или, в безразмерном виде, $\bar{r} = \bar{R}$) определяется решением (Huntush, 1964; Веригин и др., 1977)

$$\bar{S} = \frac{Q}{4\pi T b} \left(2 \ln \frac{\bar{R}}{\bar{r}} + f_s \right), \quad (6.28)$$

$$f_s \equiv f_s(\bar{r}, \bar{z}) = \frac{4}{\pi \beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sin(n\pi\beta) \cos(n\pi\bar{z}) K_0(n\pi\bar{r}). \quad (6.29)$$

Его производная

$$\frac{\partial \bar{S}}{\partial \bar{z}} = \frac{Q}{4\pi T b} f'_s, \quad (6.30)$$

$$f'_s \equiv f'_s(\bar{r}, \bar{z}) = -\frac{4}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(n\pi\beta) \sin(n\pi\bar{z}) K_0(n\pi\bar{r}), \quad (6.30a)$$

здесь $\bar{z} = \frac{z}{b}$, $\bar{r} = \frac{r}{\kappa b}$, $\bar{R} = \frac{R}{\kappa b}$, $\beta = \frac{l}{b}$, $T = k_r$, b , $\kappa = \sqrt{k_r/k_z}$ — коэффициент анизотропии (k_r и k_z — коэффициенты фильтрации по напластованию и вкрест напластования породы), $k_0(n\pi\bar{r})$ — модифицированная функция Бесселя второго рода; здесь и далее $\bar{z} = \bar{z}(\bar{r})$, так что безразмерная величина подъема купола соленых вод под скважиной (рис. 6.10) $\Delta\bar{z}^* = 1 - \bar{z}(r_w)$.

Предполагается, что наличие контакта равновесных жидкостей (в форме конуса) под скважиной не влияет на распределение давления (напора) в области, занятой легкой жидкостью (пресной водой).

Уравнения (6.28) и (6.30) для критических условий, когда $\bar{z} = \bar{z}_{\bar{r}_w}^* = 1 - \Delta\bar{z}^*$ и $\bar{r} = \bar{r}_w$, дают систему уравнений, записанную относительно безразмерного дебита \bar{Q}^* в виде

$$\bar{Q}^* = \frac{Q^*}{Tb\Delta\bar{\rho}} = \frac{2\pi(1 - \bar{z})}{\ln \frac{\bar{R}}{\bar{r}_w} + \frac{f_s(\bar{r}_w, \bar{z})}{2}}, \quad (6.31)$$

$$\bar{Q}^* = \frac{Q^*}{Tb\Delta\bar{\rho}} = -\frac{2\pi}{\frac{f'_s(\bar{r}_w, \bar{z})}{2}}. \quad (6.32)$$

Безразмерный дебит \bar{Q}^* на рис. 6.11, отвечающий решению системы (6.31)—(6.32), довольно чувствителен к радиусу \bar{R} в диапазоне $\bar{R} < 100$.

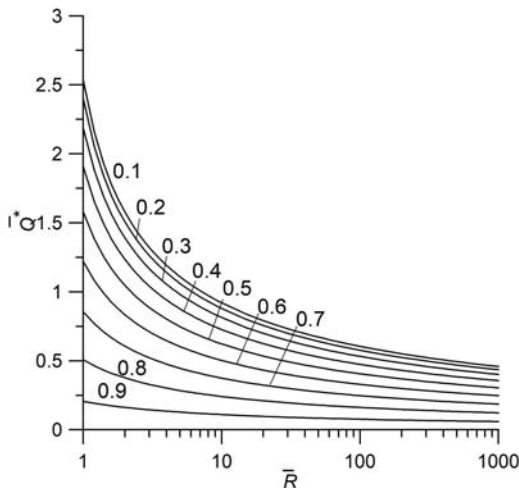


Рис. 6.11. Расчетные значения \bar{Q}^* при различных \bar{R} (ось абсцисс) и β (числа у кривых); $\bar{r}_w = 0.001$.

При $\bar{R} > 100$ дебит \bar{Q}^* в большей степени зависит от геометрической характеристики β . В частности, выполненные расчеты дали значение $\theta = \Delta\bar{z}^*/(1 - \beta)$ (см. 6.25) в диапазоне 0.75 ($\beta = 0.1$)—0.9 ($\beta = 0.7$) при $\bar{R} = 100$.

6.3. Водозаборы подземных вод на морских побережьях

С проблемой сохранения качества подземных вод в прибрежных районах сталкиваются практически все страны, имеющие морские акватории, в особенности островные государства. Эта проблема усугубляется тем обстоятельством, что прибрежные районы являются, как правило, наиболее обжитыми и промышленно освоенными, а подземные воды служат часто одним из основных источников обеспечения населения питьевой водой. Эксплуатация водных ресурсов нарушает природное равновесие в подземной гидросфере, приводя к смещению границы раздела пресных и морских вод в сторону суши. В результате качество воды, отбираемое водозаборами, расположенными на морских и океанических побережьях, резко ухудшается.

6.3.1. Стационарная граница раздела пресной и морской воды

6.3.1.1. Формула Гибена—Герцберга

Разгрузка пресных вод в морскую акваторию формирует линзообразную структуру поверх «языка» соленых вод (рис. 6.12). В состоянии равновесия, предполагающего отсутствие движения соленой воды и гидростатическое распределение напора в пресной воде, отношение мощности линзы ниже уровня моря, h_s , к мощности линзы над уровнем моря, h_f , определяется формулой:

$$h_s = h_f \frac{\rho_f}{\rho_s - \rho_f} \equiv \frac{h_f}{\Delta\bar{\rho}}, \quad (6.33)$$

носящей название формулы Гибена—Герцберга; здесь $\Delta\bar{\rho} = (\rho_s - \rho_f)/\rho_f$ — градиент плотности.

Формула (6.33) может быть получена и из очевидного гидростатического равенства:

$$\rho_s g h_s = \rho_f g (h_s + h_f). \quad (6.34)$$

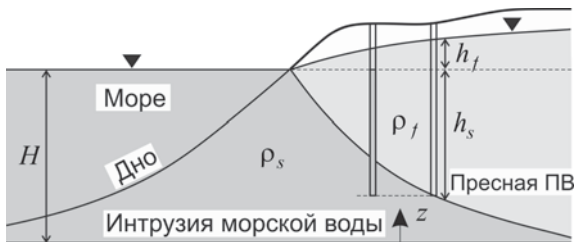


Рис. 6.12. Положение контакта пресных и соленых вод.

Уравнения Гибена—Герцберга иногда удобно представить в дифференциальной форме. Считая $h_s = H - z$ (H — отметка уровня воды в море от некоторой плоскости сравнения $z = 0$) и дифференцируя (6.33), получаем:

$$dz = -\frac{1}{\Delta\rho} dh_f \quad (6.35)$$

— приращение координаты границы раздела (z) при изменении напора пресной воды.

Погрешности в оценках положения глубины контакта равновесных вод связаны с деформацией сетки движения вод в профиле, обусловленной наличием вертикальной компоненты скорости фильтрации. Существуют и другие ограничения на применение формулы Гибена—Герцберга, подробно обсуждавшиеся в ряде специальных исследований. Тем не менее во многих расчетных ситуациях при использовании формулы (6.33) достигается вполне достаточная для практических оценок точность.

6.3.1.2. Уравнение контакта при напорной разгрузке подземных вод в море

Различия в плотностях подземной и морской воды при прочих равных условиях являются главным фактором, определяющим положение границ их раздела в прибрежных горизонтах. Средняя плотность морской воды (ρ_s) колеблется в диапазоне между 1022 и 1028 кг/м³.

Данный класс задач довольно хорошо исследован. Достаточно строгие стационарные решения, учитывающие, в частности, наличие протяженной зоны субаквальной разгрузки пресных

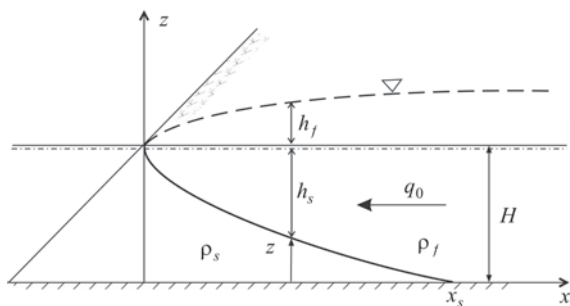


Рис. 6.13. К обоснованию расчетной схемы внедрения морской интрузии в напорный пласт.

вод, получены методом комплексных переменных (Henry, 1959; Bear, 1972). Вполне надежные результаты, пригодные для инженерных оценок, дают приближенные решения, при поиске которых используется предпосылка Гибена—Герцберга.

Пусть разгрузка подземного потока в море происходит с постоянной удельной интенсивностью q_0 (рис. 6.13). Так как контакт пресной воды и языка соленых вод является непроницаемым, мы вправе записать выражение для расхода потока, основываясь на законе Дарси:

$$q_0 = -kh_s \frac{d\varphi}{dx}, \quad (6.36)$$

где h_s — мощность потока пресных вод в зоне контакта, φ — напор подземных вод, k — коэффициент фильтрации. Поскольку $\varphi = h_f + H$, $h_f = (H - z)$, то (6.36) преобразуется к виду

$$q_0 = k(H - z) \frac{dh_f}{dx}, \quad (6.37)$$

где H — мощность горизонта, $z = z(x)$ — текущая координата контакта; так как направление потока q_0 противоположно направлению оси x , обе части равенства (6.37) имеют один знак.

В соответствии с формулой (6.35) дебит q_0 имеет альтернативное представление

$$q_0 = -k(H - z) \Delta \bar{\rho} \frac{dz}{dx}; \quad (6.38)$$

здесь и далее $\Delta \bar{\rho} = (\rho_s - \rho_f)/\rho_f$ — плотностной градиент, ρ_s и ρ_f — плотность морской и пресной воды.

Разделяя переменные и интегрируя это уравнение при условии $x = 0, z = H$, окончательно получаем

$$(H - z)^2 = \frac{2q_0}{k\Delta\rho} x, \quad (6.39)$$

т. е. линия контакта — парабола. При $z = 0$ координата $x = x_s$ (длина языка соленой воды), откуда

$$x_s = \frac{k\Delta\rho H^2}{2q_0}. \quad (6.40)$$

6.3.2. Деформация границы раздела пресной и морской воды вблизи откачивающей скважины

Откачка воды из скважины приводит к нарушению статического равновесия, описываемого решением (6.39). Контакт пресной и соленой (морской) воды смещается в сторону берега, и если он в какой-то момент достигает водозаборной скважины, то в ней начинается рост минерализации (рис. 6.14, а). Воз-

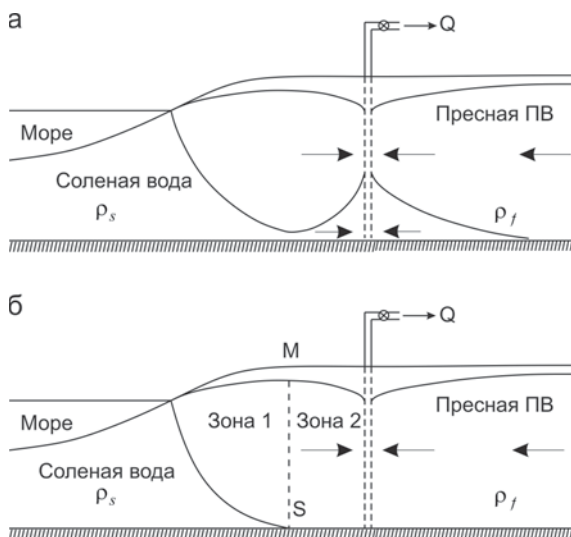


Рис. 6.14. Концептуальная схема, иллюстрирующая подтягивание языка соленых (морских) вод к водозаборной скважине (а); стационарное положение границы раздела пресных и соленых вод (б).

можно, однако, достижение нового равновесия, при котором «язык» морской воды не достигает водозаборной скважины (рис. 6.14, б).

Для поиска решения задачи может использоваться подход, отличный от рассмотренного в разд. 6.3.1.2.

6.3.2.1. Потенциал скорости фильтрации

При решении некоторых задач плановой фильтрации вместо традиционно используемой функции напора $\varphi = \varphi(x, y)$ удобно пользоваться функцией потенциала скорости фильтрации $\Phi = \Phi(x, y)$ (Гирицкий, 1947, 1951; Басниев, 1986), называемой иногда функцией Гирицкого (Шестаков, 1973). Функция Φ нашла широкое применение в задачах определения равновесного контакта морской интрузии с пресными подземными водами в зоне их разгрузки в море (Strack, 1976; 2017).

Потенциал Φ может быть определен исходя из общего представления двух главных компонент удельного расхода планового потока подземных вод следующим образом:

— напорная фильтрация в пласте мощностью H :

$$q_x = H v_x = -Hk \frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{\partial (Hk\varphi)}{\partial x} = -\frac{\partial (Hk\varphi + C)}{\partial x} = -\frac{\partial \Phi}{\partial x}, \quad (6.41)$$

$$q_y = H v_y = -Hk \frac{\partial \varphi}{\partial y} = -\frac{\partial (Hk\varphi)}{\partial y} = -\frac{\partial (Hk\varphi + C)}{\partial y} = -\frac{\partial \Phi}{\partial y}, \quad (6.42)$$

$$\Phi = \Phi(x, y) = Hk\varphi(x, y) + C_c; \quad (6.43)$$

— безнапорная фильтрация в пористой среде, когда мощность потока h определяется величиной напора φ ($h = \varphi$):

$$q_x = h v_x = \varphi \left(-k \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) = -\frac{\partial \left(\frac{k\varphi^2}{2} + C \right)}{\partial x} = -\frac{\partial \Phi}{\partial x}, \quad (6.44)$$

$$q_y = h v_y = \varphi \left(-k \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) = -\frac{\partial \left(\frac{k\varphi^2}{2} + C \right)}{\partial y} = -\frac{\partial \Phi}{\partial y}, \quad (6.45)$$

$$\Phi = \Phi(x, y) = \frac{k\varphi^2(x, y)}{2} + C_u. \quad (6.46)$$

Пусть переход от напорной к напорной фильтрации происходит на контакте пьезометрической поверхности с кровлей водоносного горизонта мощностью H , т. е.

$$\Phi = Hk\varphi + C_c, \quad \varphi \geq H; \quad (6.47a)$$

$$\Phi = \frac{k\varphi^2}{2}, \quad \varphi < H. \quad (6.47б)$$

В этой точке, на границе двух зон, потенциалы потоков (6.47а) и (6.47б) должны быть равны,

$$kHH + C_c = \frac{kH^2}{2}, \quad (6.48)$$

откуда $C_c = -kH^2/2$.

Таким образом,

$$\Phi = Hk\varphi - \frac{kH^2}{2}, \quad \varphi \geq H; \quad (6.49)$$

$$\Phi = \frac{k\varphi^2}{2}, \quad \varphi < H. \quad (6.50)$$

На границе зон потенциалы равны

$$\Phi_r = \frac{kH^2}{2}. \quad (6.51)$$

В свете рассматриваемой ниже задачи о внедрении в водоносный горизонт интрузии морских вод представляет интерес и более общий случай линейной зависимости h от φ :

$$h = \alpha\varphi + \beta, \quad (6.52)$$

где α и β — произвольные константы.

По аналогии с (6.41)—(6.42) и (6.44)—(6.45) имеем

$$q_x = -kh \frac{\partial\varphi}{\partial x} = -k(\alpha\varphi + \beta) \frac{\partial\varphi}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{2} \alpha k \left(\varphi + \frac{\beta}{\alpha} \right)^2 + C \right], \quad (6.53)$$

$$q_y = -kh \frac{\partial\varphi}{\partial y} = -k(\alpha\varphi + \beta) \frac{\partial\varphi}{\partial y} = -\frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{2} \alpha k \left(\varphi + \frac{\beta}{\alpha} \right)^2 + C \right], \quad (6.54)$$

$$\Phi(x, y) = \frac{1}{2} \alpha k \left(\varphi + \frac{\beta}{\alpha} \right)^2 + C. \quad (6.55)$$

Если $\alpha = 0$, то

$$q_x = -kh \frac{\partial\varphi}{\partial x} = -k\beta \frac{\partial\varphi}{\partial x} = -\frac{\partial(k\beta\varphi + C)}{\partial x}, \quad (6.56)$$

$$q_y = -kh \frac{\partial \Phi}{\partial y} = -k\beta \frac{\partial \Phi}{\partial y} = -\frac{\partial (k\beta\Phi + C)}{\partial y}, \quad (6.57)$$

$$\Phi(x, y) = k\beta\Phi + C. \quad (6.58)$$

Из уравнения неразрывности фильтрационного потока

$$\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} = 0 \quad (6.59)$$

следует, что $\Phi(x, y)$ удовлетворяет уравнению Лапласа

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = 0. \quad (6.60)$$

6.3.2.2. Уравнение стационарной границы раздела в условиях откачки из скважины (Strack, 1976, 2017)

Решение задачи сводится к нахождению уравнения, описывающего равновесное положение контакта языка соленых вод и подошвы водоносного горизонта (x_s, y_s) .

Напор подземных вод в случае расположения плоскости $z = 0$ на подошве горизонта определяется, как это показано на рис. 6.15, суммой

$$\varphi = H + h_f. \quad (6.61)$$

Определяя h_f из уравнения Гибена—Герцберга, получаем

$$\varphi = H + \frac{\rho_s - \rho_f}{\rho_f} h_s, \quad (6.62)$$

т. е. мощность слоя пресных вод над языком соленых вод будет:

$$h_s = \frac{\rho_f}{\rho_s - \rho_f} (\varphi - H). \quad (6.63)$$

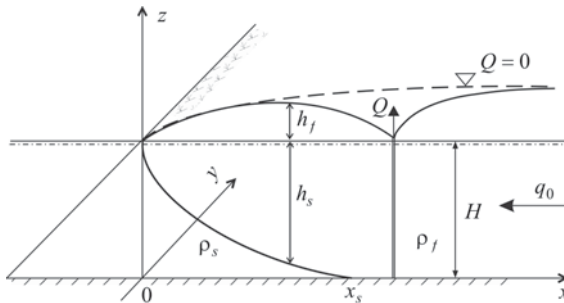


Рис. 6.15. Концептуальная схема к определению положения равновесного контакта пресной и соленой (морской) воды.

Выражение (6.63) формально совпадает с функционалом линейной зависимости (6.52), где $h \equiv h_s$, при

$$\alpha = \frac{\rho_f}{\rho_s - \rho_f}, \quad \beta = -\frac{\rho_f}{\rho_s - \rho_f} H, \quad \frac{\beta}{\alpha} = -H, \quad (6.64)$$

и это говорит о том, что фильтрация пресной воды может быть описана потенциалом скорости фильтрации (Гириного)

$$\Phi = \frac{k}{2} \frac{\rho_f}{\rho_s - \rho_f} (\varphi - H)^2 + C_{ci}, \quad (6.65)$$

где C_{ci} — произвольная константа. Второй член в круглой скобке (6.65) соответствует пьезометрическому напору $\varphi = \varphi_0$ при $x = 0$ (рис. 6.15): $\varphi_0 = H$. Поэтому формула (6.65) может быть переписана в виде:

$$\Phi = \frac{k}{2} \frac{\rho_f}{\rho_s - \rho_f} (\varphi - \varphi_0)^2 + C_{ci}. \quad (6.65a)$$

Теперь мы можем построить решение задачи вторжения морских вод (рис. 6.15), основываясь на описании фильтрации с помощью функции Φ . Пусть ось x направлена против потока — от линии моря к области питания горизонта. Напор на расстоянии $x = L$ от береговой линии φ_1 .

1. Одномерный фильтрационный поток (q_0). Общее решение уравнения Лапласа (6.60) для функции (6.65a) имеет вид:

$$\Phi = Ax + B, \quad (6.66)$$

где константы A и B находятся из условий на границах области.

Так, полагая $x = 0$, находим

$$\Phi = \Phi_0 = C_{ci}. \quad (6.67)$$

Для условия на границе $x = L$

$$\Phi = \Phi_1 = \frac{k}{2} \frac{\rho_f}{\rho_s - \rho_f} (\varphi - \varphi_0)^2 + C_{ci}. \quad (6.68)$$

Решение (6.66) принимает вид

$$\Phi = \frac{\Phi_1 - \Phi_0}{L} x + \Phi_0. \quad (6.69)$$

Поскольку

$$\frac{\Phi_1 - \Phi_0}{L} = q_0, \quad (6.70)$$

то решение (6.66), записанное относительно функции напора, можно представить в следующем виде:

$$(\varphi - \varphi_0)^2 = \frac{2}{k} \frac{\rho_s - \rho_f}{\rho_f} q_0 x. \quad (6.71)$$

Связь между $\varphi - \varphi_0$ и h_s определяется отношением (6.62):

$$(\varphi - \varphi_0) = \frac{h_s(\rho_s - \rho_f)}{\rho_f} = \frac{(H - z)(\rho_s - \rho_f)}{\rho_f}, \quad (6.72)$$

откуда

$$(H - z)^2 = \frac{2}{k} \frac{\rho_s - \rho_f}{\rho_f} q_0 x, \quad (6.73)$$

что совпадает с ранее полученным решением (6.39).

2. Потенциал двумерного фильтрационного потока. Для определения потенциала скорости фильтрации $\Phi = \Phi(x, y)$ рассмотрим поток пресной воды в двух зонах (см. рис. 6.14, б):

— зона 1 (6.65)

$$\Phi = \frac{k}{2} \frac{\rho_f}{\rho_s - \rho_f} (\varphi - H)^2 + C_{ci}; \quad (6.74)$$

— зона 2 (6.49)

$$\Phi = kH\varphi - \frac{kH^2}{2}. \quad (6.75)$$

Вертикальная граница между зонами определяется положением языка соленых вод, где $h_s = H$. Соответствующее условие, вытекающее из (6.62), имеет вид

$$\varphi_t = \frac{\rho_s}{\rho_f} H, \quad (6.76)$$

где индекс t обозначает передовой контакт пресной и морской воды. Потенциалы, определяемые на контакте зон 1 (6.74) и 2 (6.75) при $\varphi = \varphi_t$, должны быть равны:

$$\frac{k}{2} \frac{\rho_f}{\rho_s - \rho_f} \left(\frac{\rho_s}{\rho_f} H - H \right)^2 + C_{ci} = kH^2 \frac{\rho_s}{\rho_f} - \frac{kH^2}{2}. \quad (6.77)$$

Отсюда определяем константу

$$C_{ci} = \frac{kH^2}{2} \frac{\rho_s}{\rho_f}. \quad (6.78)$$

Таким образом, потенциал $\Phi = \Phi(x, y)$ в зоне 1, где находится контакт пресной и соленой воды, описывается уравнением

$$\Phi = \frac{k}{2} \frac{\rho_f}{\rho_s - \rho_f} (\varphi - H)^2 + \frac{kH^2}{2} \frac{\rho_s}{\rho_f}. \quad (6.79)$$

3. Положение контакта вод при откачке из скважины. Пусть расход фильтрационного потока, разгружающегося в море, определяется величиной q_0 . Потенциал этого потока, в соответствии с (6.69)—(6.70), определяется уравнением

$$\Phi = -q_0x + \Phi_0; \quad (6.80)$$

здесь $q_0 < 0$, поскольку фильтрация происходит в направлении, противоположном положительному направлению оси x . Константа Φ_0 определяется из (6.67) при C_{ci} (6.78):

$$\Phi_0 = \frac{kH^2}{2} \frac{\rho_s}{\rho_f}. \quad (6.81)$$

Фильтрационный потенциал, обусловленный откачкой воды из скважины, расположенной вблизи границы (на расстоянии L) с постоянным напором, определяется логарифмической функцией

$$\Phi = \frac{Q}{4\pi} \ln \frac{(x - L)^2 + y^2}{(x + L)^2 + y^2}. \quad (6.82)$$

Вид этой функции учитывает влияние отображения «скважины-имиджа», расположенной в точке ($y = 0, x = -L$). Суперпозиция (6.81) и (6.82) дает решение

$$\Phi = -q_0x + \frac{Q}{4\pi} \ln \frac{(x - L)^2 + y^2}{(x + L)^2 + y^2} + \Phi_0. \quad (6.83)$$

Для определения контура языка соленых вод (x, y) зададимся условием на границе зоны 1 (6.79) $\varphi = \varphi_s$, определяемым (6.76). Подставляя $\Phi = \Phi(\varphi = \varphi_s)$ в решение (6.83), получаем:

$$kH^2 \frac{\rho_s}{\rho_f} - \frac{kH^2}{2} = -q_0x + \frac{Q}{4\pi} \ln \frac{(x - L)^2 + y^2}{(x + L)^2 + y^2} + \frac{kH^2}{2} \frac{\rho_s}{\rho_f}. \quad (6.84)$$

Последнее равенство удобно переписать в безразмерном виде (Strack, 2017):

$$\lambda_c = 2\bar{x} + \frac{\mu}{2\pi} \ln \frac{(\bar{x} - 1)^2 + \bar{y}^2}{(\bar{x} + 1)^2 + \bar{y}^2}, \quad (6.85)$$

$$\lambda_c = -\frac{kH^2}{Lq_0} \frac{(\rho_s - \rho_f)}{\rho_f}, \quad \mu = -\frac{Q}{Lq_0}, \quad q_0 < 0, \quad \bar{x} = \frac{x}{L}, \quad \bar{y} = \frac{y}{L}. \quad (6.85a)$$

При фиксированных λ_c и μ зависимость $y = f(x)$, трассирующая положение в плоскости $x - y$ языка соленых вод, однозначно определена. Если Q постепенно увеличивается при сохранении значений других параметров постоянными, язык начинает двигаться в сторону берега, по направлению к откачивающей скважине. Быстрее всего происходит движение по оси x ($y = 0$). Переход водораздельной точки $x = x_s$ будет свидетельствовать о захвате соленых вод скважиной. Для определения координаты x_s можно задаться условием равенства нулю компоненты расхода Q_x :

$$q_x = -\frac{\partial\Phi}{\partial x} = q_0 - \frac{Q}{2\pi} \left[\frac{1}{x_s - L} - \frac{1}{x_s + L} \right] = q_0 - \frac{Q}{2\pi} \left[\frac{2L}{x_s^2 - L^2} \right] = 0. \quad (6.86)$$

Решая это уравнение, приходим к соотношению:

$$\bar{x}_s = \frac{x_s}{L} = \sqrt{1 - \frac{\mu}{\pi}} \quad (\bar{y}_s = 0), \quad (6.87)$$

которое в точности отвечает ранее полученной зависимости (5.39, разд. 5.2).

Теперь, подставляя $\bar{x} = \bar{x}_s$, $\bar{y} = 0$ в уравнение (6.85), получаем критерияльное соотношение

$$\lambda_c = 2\sqrt{1 - \mu/\pi} + \frac{\mu}{\pi} \ln \frac{1 - \sqrt{1 - \mu/\pi}}{1 + \sqrt{1 - \mu/\pi}}, \quad (6.88)$$

выполнение которого обеспечивает максимальный дебит скважины, исключаящий ее засоление морскими водами.

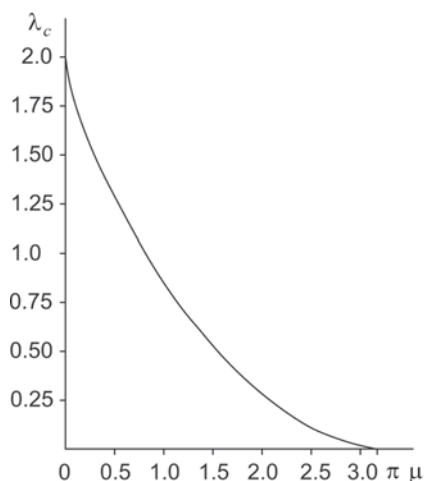


Рис. 6.16. График зависимости $\lambda_c = f(\mu)$ (Strack, 1976).

Кривая $\lambda_c = f(\mu)$ на графике (рис. 6.16) делит плоскость на две области. Точки, попадающие в область выше кривой, соответствуют солевому режиму эксплуатации скважины, когда в область питания попадают морские воды. Область с точками ниже кривой на этом графике отвечает случаю, когда морская интрузия не достигает водораздельной точки x_s .

6.3.3. Пример: модельные исследования влияния интрузии морских вод на качество подземных вод в дельте р. Андаларкс (провинция Альмерия, Испания)

Оптимизация систем водоотбора из горизонтов, испытывающих влияние морских (океанических) вод, требует детальных гидрогеологических прогнозов, одним из основных инструментов которых является математическое моделирование. Настоящий раздел представляет собой пример модельного анализа процесса вторжения морских вод в прибрежные горизонты, естественная разгрузка которых происходит в Средиземное море на одном из курортных побережий провинции Альмерия (Испания).

6.3.3.1. Постановка проблемы и гидрогеологические условия

Гидрогеологические условия дельты р. Андаларкс, где имеет место разгрузка подземного потока в Средиземное море (рис. 6.17), характеризуются наличием в пределах данного участка морской интрузии, влияющей на качество подземных вод прибрежных водоносных горизонтов. Активная эксплуатация этих горизонтов водозаборными скважинами началась в 1960-е гг. Практически одновременно стало ухудшаться качество откачиваемой воды, что связано с перемещением природного контакта морской и подземной воды в северном направлении и субвертикальным подтягиванием языка соленых вод к водозаборным скважинам. Прогрессирующее засоление горизонтов послужило причиной заметного сокращения объемов отбираемой воды.

Основной водоносный комплекс связан с четвертичными (аллювиальный и дельтовый гравий и песок с редкими прослоями глин и ила) и плиоцен-четвертичными (конгломераты, пески, супеси и глины) отложениями (рис. 6.18). Аллювий «вложен» в плиоцен-четвертичные отложения, между ними существует тесная гидравлическая связь. В районе дельты выделяют два водоносных горизонта: верхний — безнапорный (средняя мощность 25 м) и нижний — слабонапорный с более низкими значениями проницаемости (мощность — до нескольких десятков метров). Суммарная проводимость комплекса изменяется от 350 до 1200 м²/сут, удельные дебиты скважин меняются от 1 до 20 л/(с·м).

Ниже залегает водоносный горизонт, связанный с плиоценовыми отложениями. Водоносными являются прослой песка и конгломератов в

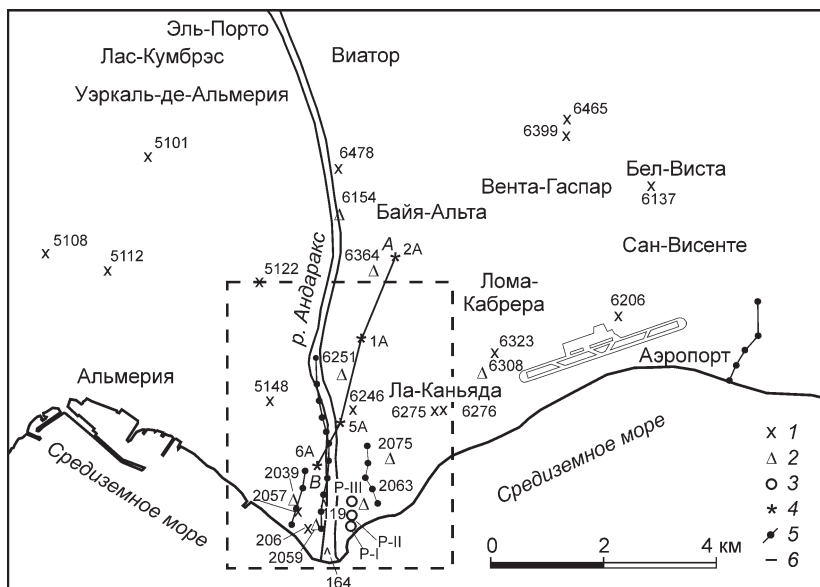


Рис. 6.17. Схема района исследований.

1—2 — откачивающие скважины: 1 — с единичными замерами показателей качества воды; 2 — с наличием информации об изменении состава воды во времени; 3 — наблюдательные скважины, в которых изучено распределение электрической проводимости воды по глубине; 4 — разведочные скважины с гидрохимическими данными по отдельным интервалам; 5 — профили ВЭЗ; 6 — линия разреза А—В; *штрихами* отмечена область моделирования (прямоугольник).

мергелистой пачке, мощность которой может достигать 150 м. Средняя проводимость горизонта — несколько сотен квадратных метров в сутки, хотя выделяются участки, где проводимость может достигать 1500 м²/сут.

Водоносный горизонт верхнемиоценовых отложений в литологическом плане имеет схожее строение, но частота встречаемости проницаемых песчаных прослоев ниже, так что он характеризуется заметно меньшей проводимостью. Этот горизонт слабо изучен в гидрогеологическом плане. Нижнемиоценовую толщу можно рассматривать в качестве регионального водоупора.

В дельте р. Андаракс имеет место прямое питание верхнего водоносного горизонта за счет речных вод в период прохождения паводков, в это время отмечается довольно быстрое восстановление уровней подземных вод. Дополнительное питание водоносный горизонт получает за счет площадной инфильтрации атмосферных осадков и потерь воды, используемой для орошения. Инфильтрационное питание не превышает 15 мм/год. Возможно боковое питание со стороны Сьерры-де-Гадор. С этим горизонтом связаны основные (до 65 %) эксплуатационные запасы подземных вод. Дебиты скважин достигают 15—20 л/с. Суммарный водоотбор ко-

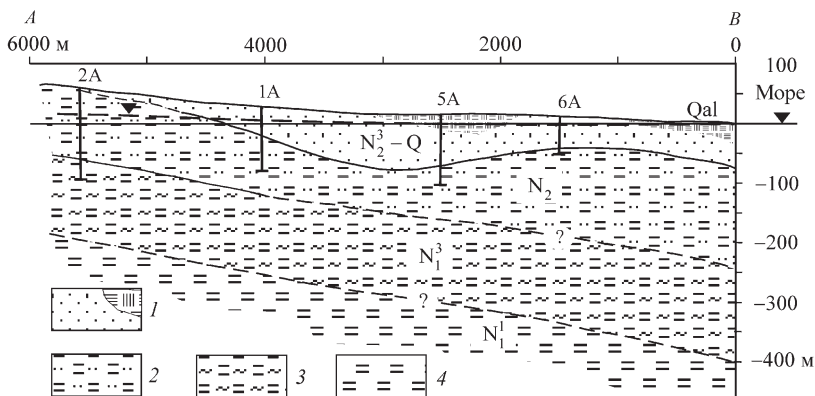


Рис. 6.18. Схематичный геолого-гидрогеологический разрез по линии А—В (рис. 6.17).

Отложения: 1 — четвертичные и плиоцен-четвертичные дельтовые и аллювиальные; 2 — плиоценовые (мергели и конгломераты с прослоями песка); 3 и 4 — верхние и нижние миоценовые (мергели с относительно редкими прослоями песчано-глинистого материала).

леблется от 8200 до 13 700 м³/сут. Разгрузка потока подземных вод в море оценивается величинами от 2700 до 5400 м³/сут.

Анализ эволюции пьезометрической поверхности подземных вод в многолетнем разрезе времени показывает, что интенсивная эксплуатация прибрежного водоносного комплекса в 1960—1980 гг. привела к формированию в прибрежной зоне депрессионной поверхности: абсолютные отметки уровня подземных вод в центре депрессии опускались ниже нулевой отметки уровня моря на 2—3 м. Это способствовало смещению интрузии в сторону берега и засолению подземных вод. В конце 1980-х гг. объем отбора воды сократился и уровни подземных вод в прибрежной зоне поднялись до отметок, близких к ±0 м.

В основу количественной оценки воздействия интрузии морских вод на качество подземных вод в прибрежной зоне дельты р. Андарак положена информация, которую можно разделить на несколько категорий (см. рис. 6.17): 1) данные опробования отдельных интервалов скважин; 2) результаты периодического отбора и анализа проб из водозаборных скважин; 3) данные распределения содержания солей по глубине, полученные в результате электрического каротажа скважин; 4) данные о контакте пресных и соленых вод, полученные методом ВЭЗ.

Наиболее информативными оказались результаты изучения электропроводности проб, а также содержания в них ионов хлора (Cl⁻) и сульфата (SO₄²⁻). Для приближенного расчета минерализации воды (С, мг/л) по электрометрическим замерам ее удельной электропроводности (L, мкСм/см) использовали зависимость

$$C = (L - 522)/1.11.$$

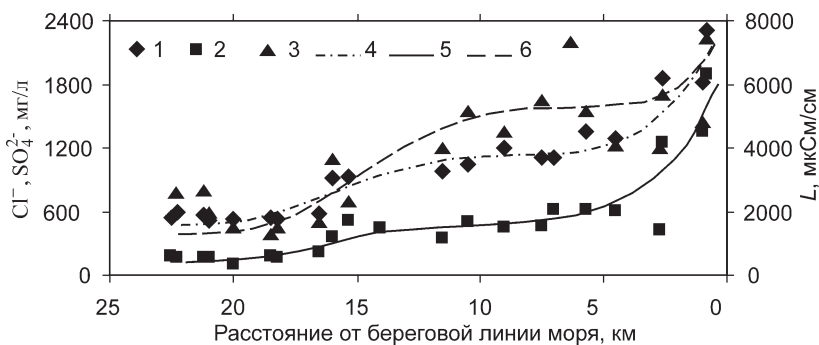


Рис. 6.19. Изменение показателей качества воды в направлении от Санта-Фэ к дельте р. Андарак.

1 — электропроводность, 2 — хлориды, 3 — сульфаты, 4—6 — тренды для 1—3.

Анализ влияния морской интрузии на подземные воды осложняется тем обстоятельством, что природные подземные воды в данном районе имеют повышенные «фоновые» содержания главных «маркирующих» анионов Cl^- и SO_4^{2-} (рис. 6.19); это связано с процессами растворения гипсоносных пород в верхнем и среднем течении р. Андарак (Martos, 2001), а также с процессами континентального засоления почв. В дальнейшем анализе мы будем ориентироваться на следующие значения, характеризующие состав потока подземных вод в верхней зоне разреза на южной границе дельты р. Андарак (естественный фон): минерализация $C = 2.5\text{—}3.0$ г/л (этому значению отвечает $L = 3000\text{—}4000$ мкСм/см), $C_{\text{Cl}^-} = 450\text{—}500$ мг/л и $C_{\text{SO}_4^{2-}} = 1400\text{—}1500$ мг/л (примерно 50 % от содержания сульфатов в морской воде). Интересно отметить, что содержания сульфатов заметно (в 2.5—3 раза) превышают концентрации хлоридов. Для морской воды свойственно обратное соотношение: $C_{\text{Cl}^-}/C_{\text{SO}_4^{2-}} \approx 7.1$ (концентрации — в мг/л).

Ориентируясь на эти значения и зная ионный состав морской воды, можно ориентировочно рассчитать пропорции ее смешения с подземными водами и оценить размеры области влияния интрузии на подземные воды верхнего горизонта. Таким образом, определяем, что 1) присутствие морских солей в верхней части разреза отмечается на расстоянии до 3.5 км от береговой линии; 2) содержание морской воды в водозаборных скважинах, отстоящих на расстоянии от 1 до 1.5 км от береговой линии, может достигать 12 %; 3) вверх по потоку степень разбавления морских вод пресными подземными водами увеличивается до 7 %.

На рис. 6.20 хорошо видно, что подрусловой поток пресных вод р. Андарак разбавляет интрузию в центральной части рассматриваемой области. В прибрежной зоне, а также к западу и востоку от речного русла минерализация воды (C , в пересчете через L) меняется от 2.5—2.7 до 8.5 г/л; содержания хлоридов возрастают от 500 до 2000 мг/л.

Контакт соленых морских ($C = 42\text{—}46$ г/л) и слабominерализованных ($C = 6.7$ г/л) вод находится на глубине 30—40 м от поверхности. Судя по

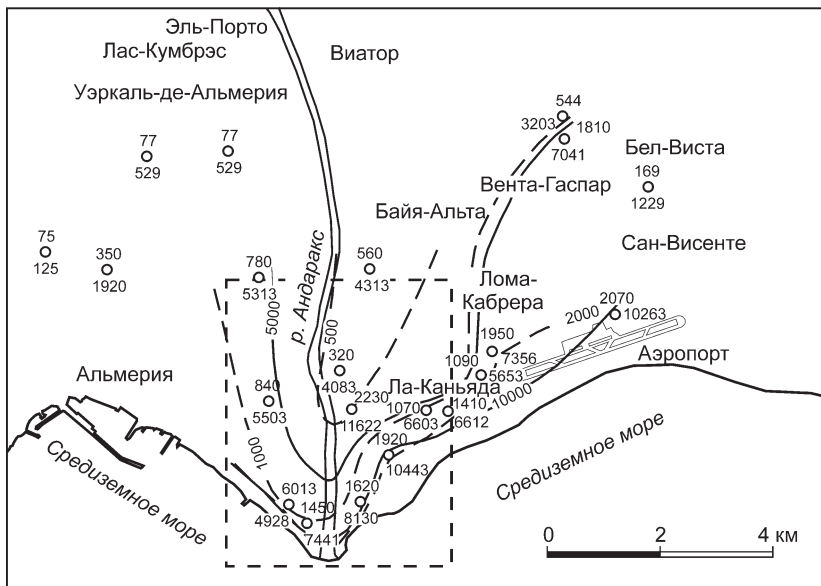


Рис. 6.20. Изолинии содержания хлоридов (*штриховые* линии, мг/л) и электрической проводимости (*сплошная* линия, мкСм/см).

Кружками показаны скважины (*сверху* — содержание хлоридов, *снизу* — электропроводность).

всему, основное внедрение соленых морских вод происходит в нижней части разреза, представленного плиоценовыми породами. Засоление верхней части разреза происходит под действием дисперсионных процессов и дополнительно провоцируется скважинным водоотбором. Последний обуславливает подтягивание (подъем) соленых вод вблизи эксплуатационных скважин. Для определения пространственного положения контакта морских и подземных вод также использовался метод ВЭЗ (см. профили на рис. 6.17).

6.3.3.2. Математическая модель

Породы, слагающие дельту р. Андаракс, представляют собой мульдобразную структуру: мощность слоев (горизонтов) максимальная в центральной части дельты; вблизи береговой линии она уменьшается в восточном и западном направлении, а также в направлении, противоположном береговой линии. Такая особенность строения области учитывалась в модели варьированием абсолютных отметок кровли и подошвы слоев.

Для детального и корректного описания ундуляций отметок кровли и подошвы геологических слоев на ортогональной сетке исследуемая область была представлена 40 модельными слоями (рис. 6.21). Такая мелкая

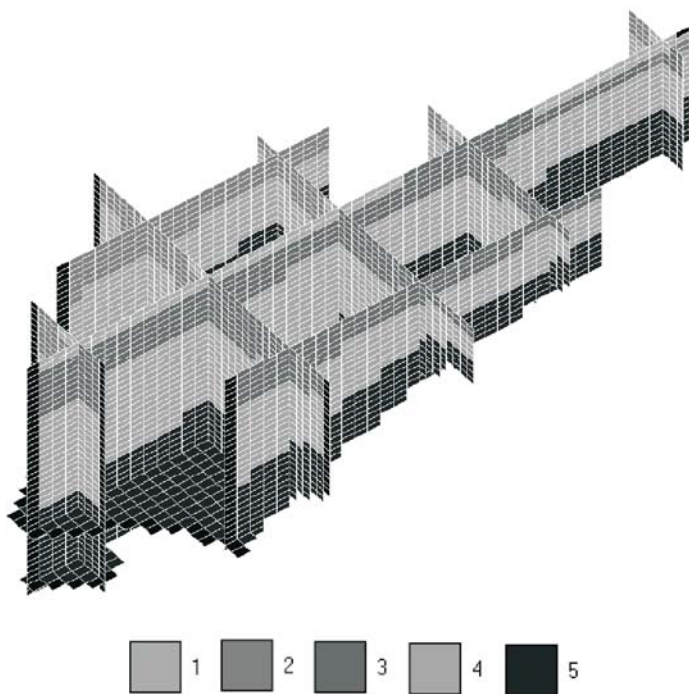


Рис. 6.21. Структурная схема модели (трехмерное представление) в виде ортогональных сечений с «исключенными» блоками.

Геологические слои: 1 — аллювиальные отложения долины р. Андаракс; 2 и 3 — четвертичные и плиоцен-четвертичные отложения (восточная и западная части дельты р. Андаракс); 4 — плиоценовые отложения; 5 — миоценовые отложения.

разбивка модели по вертикали позволила, кроме того, корректно моделировать процессы миграции разноплотностных растворов. В плане область была фрагментирована квадратными блоками 100×100 м.

На входной границе потока пресных подземных вод было задано граничное условие I рода, отвечающее абсолютным отметкам напоров +12 м. По береговой линии в вертикальном направлении задавалось начальное распределение давления с учетом плотности морской воды. В гидродинамическом отношении боковые границы были заданы по линиям тока и считались непроницаемыми.

Верхний горизонт в фильтрационном отношении рассматривался как неоднородный с тремя зонами, различающимися по коэффициенту фильтрации (k , м/сут): в долине р. Андаракс — $k = 10$, к западу от долины — $k = 2$, к востоку — $k = 4$. Второй и третий водоносные слои считались (учитывая отсутствие достоверной информации) однородными: второй слой — $k = 2$, третий слой — $k = 0.1$. Пористость четвертичных и плиоцен-четвертичных рыхлых пород — 25 %, пористость плиоценовых и ми-

оценок отложений — 7 и 5 % (с учетом насыщения рассолами пористой матрицы) соответственно.

В пределах модельной области были выделены две зоны, различающиеся интенсивностью инфильтрационного питания подземных вод (м/сут): 1) центральная, связанная с долиной реки, — $1.5 \cdot 10^{-4}$; 2) западная и восточная — 8.0×10^{-5} (с учетом потерь воды на орошение).

Модельные скважины располагались в пределах трех верхних модельных слоев. Их расход задавался в соответствии с графиком водоотбора. В ряде случаев скважины, пробуренные рядом, попадали в один блок, так что их расходы суммировались. При этом было выделено два стресс-периода. Первый (1965—1989 гг.) отвечал этапу наиболее активного водоотбора, когда суммарная производительность скважин достигала $15\,000 \text{ м}^3/\text{сут}$, второй (1990—2002 г.) соответствовал режиму щадящего водоотбора (в среднем около $10\,200 \text{ м}^3/\text{сут}$). Данные цифры относятся ко всей дельтовой области.

Для совместного (сопряженного) решения фильтрационной и миграционной задач в нестационарной постановке использовали программный комплекс TOUGH2 (Pruess et al., 1999).

6.3.3.3. Результаты моделирования

Для определения исходного положения контакта пресных и соленых вод (до начала эксплуатации прибрежного водоносного комплекса) было получено решение стационарной задачи ($t = 10\,000$ лет). Результаты решения стационарной задачи принимались как начальные для последующих модельных оценок.

На *первом этапе* исследования рассматривался эпигнозный период (1963—2002 гг.). Карта распределения давления свидетельствует о формировании локальных воронок депрессии с максимальным перепадом давления (по состоянию на 2002 г.) относительно моря 5200 Па , что отвечает примерно 0.5 м напора ниже уровня моря. Эти данные хорошо согласуются с наблюдениями за фактическим распределением напоров. Понижения при максимальном водозаборе (до 1990 г.) — 1.35 м .

О характере засоления верхней водоносной толщи можно судить по картам, представленным на рис. 6.22. Эти карты отражают увеличение минерализации воды (в относительных единицах) по отношению к исходному (фоновому) состоянию — до начала эксплуатации подземных вод в дельте р. Андаракс. Хорошо видно, что подтягивание морской воды вызвало увеличение минерализации воды в скважинах, расположенных главным образом в пределах 1.5 — 2.0 км полосы (считая от береговой линии). При этом наблюдается довольно неоднородная в плане картина: в меньшей степени процессу засоления подвержена область, примыкающая к долине р. Андаракс (что обусловлено концентрированием фильтрационного потока пресных вод в пределах наиболее проницаемых аллювиальных отложений). И наоборот, вблизи точек расположения откачивающих скважин наблюдаются локальные «ореолы» засоления, что связано с субвертикальным подтягиванием морской воды к этим скважинам. Более

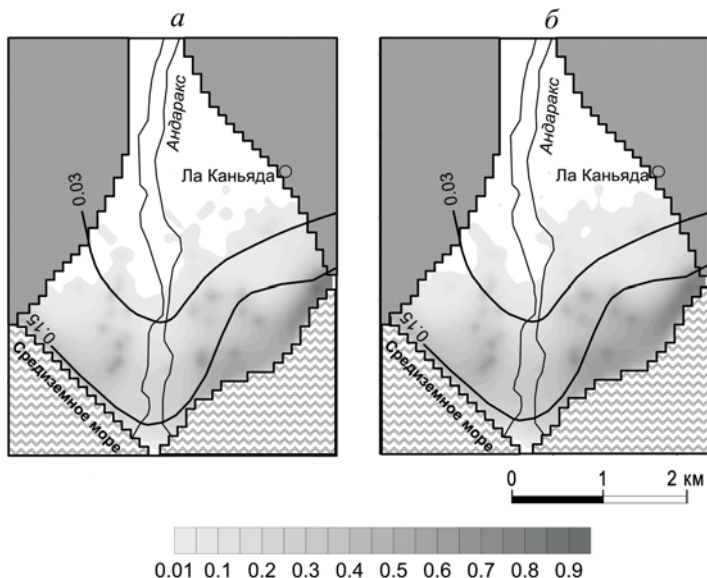


Рис. 6.22. Превышение относительной минерализации воды над фоновыми значениями минерализации в третьем модельном слое.

а — на 27 лет, *б* — на 40 лет после начала эксплуатации. *Изолинии* — относительные значения минерализации по фактическим данным (см. рис. 6.20). Оттенки серого — относительная минерализация подземных вод.

засолена восточная область модели, что объясняется наличием здесь более проницаемых пород и подтверждается фактическим материалом. Изолинии концентраций даны в безразмерных величинах (относительно суммарного содержания солей в морской воде $C_0 = 38$ г/л), т. е. для перехода к абсолютным величинам эти значения необходимо помножить на C_0 .

На *втором этапе* исследования рассматривались три прогнозных варианта: 1) эксплуатация горизонта продолжается с той же интенсивностью; 2) производительность скважин уменьшается в 2 раза (по сравнению с состоянием на 2002 г.); 3) все скважины выводятся из эксплуатации и оцениваются период и интенсивность естественной реабилитации горизонта.

На рис. 6.23 показано стационарное распределение полей засоления водоносного горизонта (второй модельный слой, глубина залегания 20 м). Такое распределение достигается примерно через 500 лет. Как видно, при сохранении существующей интенсивности водоотбора (рис. 6.23, *а*) верхняя зона разреза оказывается засоленной до 35 г/л на расстоянии до 3 км от береговой линии. Исключение составляет зона опреснения морской воды вдоль р. Андаракс. При полной остановке эксплуатации подземных вод водоносный комплекс в верхней своей части существенно рассоляется (рис. 6.23, *б*). Однако возвращение системы «в исходное состояние»

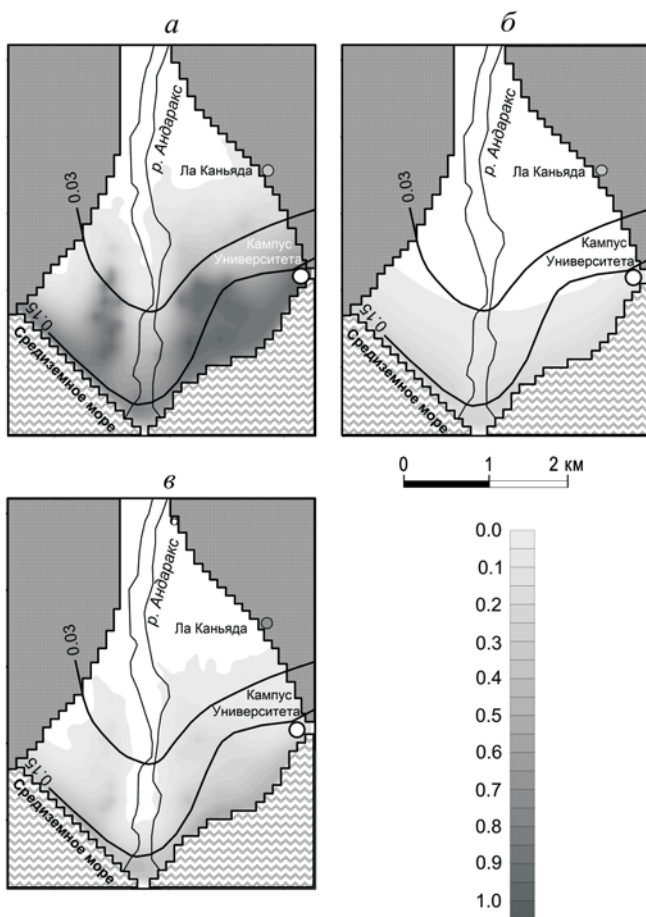


Рис. 6.23. Прогнозное стационарное распределение минерализации (относительно фона) для трех прогнозных вариантов.

а — 1, *б* — 2, *в* — 3.

происходит довольно продолжительное время, измеряемое многими десятками лет, что согласуется с результатами подобных модельных исследований, проводившимися другими авторами в других регионах (Gingerich, Voss, 2005). Наконец, водоотбор с 50 %-ной интенсивностью наиболее оптимален, так как заметное превышение концентрации солей над фоном наблюдается только в узкой прибрежной зоне (рис. 6.23, *в*).

Наконец, обратим внимание, что результаты моделирования в целом удовлетворительно согласуются с данными ВЭЗ. Особенно хорошо это видно на профиле, проходящем по долине р. Андаракс (рис. 6.24).

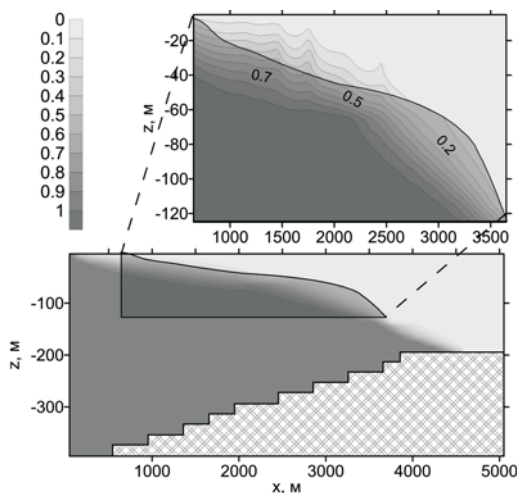


Рис. 6.24. Сравнение положения языка соленых вод, установленного по данным ВЭЗ (профиль 1), с результатами моделирования на программе TOUGH2.

Заштрихована зона соленых вод по данным ВЭЗ.

Таким образом, проведенное исследование показывает перспективность применения методов математического моделирования для прогнозов качества подземных вод в прибрежных морских районах. Одновременно доказана эффективность проведения геофизических исследований при изучении морских интрузий.

6.4. Влияние окисления сульфидов в зоне аэрации на качество откачиваемых вод

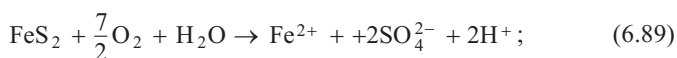
6.4.1. Определяющие факторы и масштабы процесса

На водозаборах, эксплуатирующих неглубоко залегающие водоносные горизонты, нередко наблюдается прогрессирующее ухудшение качества воды, обусловленное активизацией гидрогеохимических процессов в искусственно создаваемой (при снижении уровня воды) зоне аэрации: возрастает жесткость, увеличиваются концентрации сульфатов, железа, а также ряда микрокомпонентов. Главным из этих процессов является химическое выветривание сульфидных минералов — их окисление кислородом атмосферного воздуха, получающего активный доступ к поверхности этих минералов благодаря осушению пор (трещин) при водопонижении.

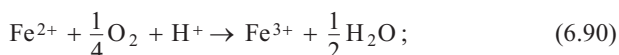
Типичными представителями сульфидных минералов, рассеянных в породе, являются пирит (FeS_2), пирротин (Fe_{1-x}S), халькопирит (CuFeS_2), сфалерит (ZnS) и арсенопирит (FeAsS). Обычно в преобладающих количествах присутствует пирит. Поэтому в качестве доминирующей в модельных построениях рассматривается реакция окисления пирита.

Окисление пирита, присутствующего в избытке в земной коре, проходит несколько стадий, сопровождающихся формированием метастабильных вторичных продуктов реакции, таких как ферригидрит ($5\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$), швертманит ($\text{Fe}_8\text{O}_8(\text{OH})_6\text{SO}_4\text{—Fe}_{16}\text{O}_{16}(\text{OH})_{10}(\text{SO}_4)_3$), а также более стабильных соединений — ярозита ($\text{KFe}_3(\text{SO}_4)_2(\text{OH})_6$), гетита ($\alpha\text{-FeO}(\text{OH})$) и гематита (Fe_2O_3). Главными являются три стадии окисления пирита (Xu et al., 2000):

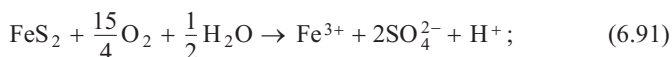
1) собственно окисление пирита кислородом, растворенным в плочной воде,



2) окисление ионов закисного железа до окисного железа

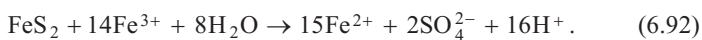


при высоких pH ($\text{pH} > 4$) это достаточно быстрая реакция, и поэтому уравнения (6.89) и (6.90) могут быть объединены



при низких pH в абиотических условиях реакция (6.91) протекает весьма медленно, однако даже в этих условиях она может существенно ускоряться микроорганизмами;

3) окисление пирита ионами трехвалентного железа, образовавшимися на второй стадии



Потребление кислорода в процессе окисления пирита и продуцирование сульфидов являются процессами, протекающими в кинетической области. Поэтому приведенные выше равновесные реакции дают лишь общие представления о направленности процесса.

Скорость продуцирования серной кислоты контролируется доступностью поверхности сульфидов для молекул кислорода (O_2). Главным механизмом переноса O_2 в частично водонасыщенной среде является молекулярная диффузия. Массовый поток O_2 определяется концентрационным

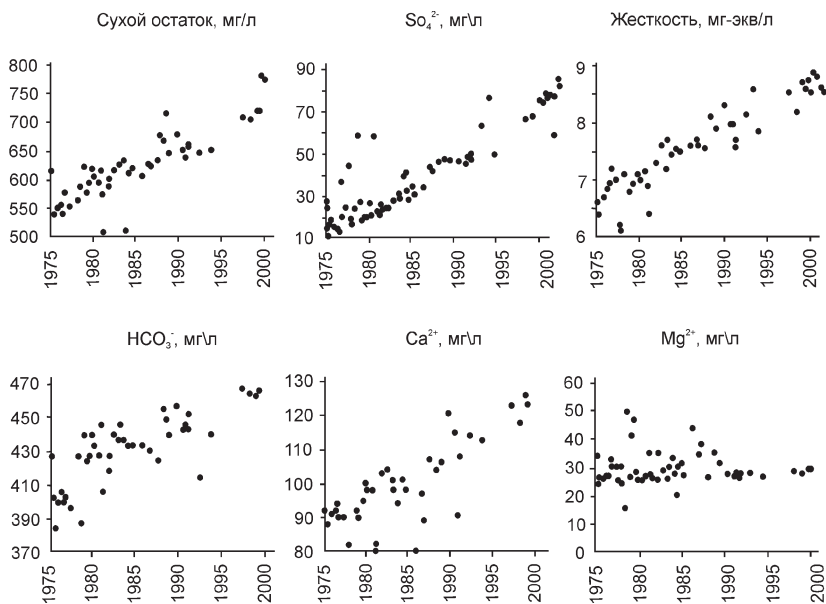


Рис. 6.25. Данные наблюдений, иллюстрирующие изменения качества воды в скважинах на Полдневском месторождении подземных вод (Вишняк, 2005; Лехов, Вишняк, 2005).

градиентом, который обеспечивается снижением концентрации O_2 с глубиной за счет его потребления в реакциях окисления сульфидов. Скорость окисления ограничена как кинетической реакцией, так и диффузией O_2 (Румынин, 2011).

Весьма иллюстративными являются данные наблюдений (30-летний период) за изменением химического состава воды (рис. 6.25) на одном из водозаборов, расположенном на Среднем Урале (Свердловская обл.). Подземные воды приурочены к ограниченной по простиранию карбонатной структуре. Производительность водоотбора 18—19 тыс. м³/сут, снижение уровней подземных вод в центре депрессионной воронки достигает 30—35 м. Общая площадь пород, попадающих в зону дренирования, составляет около 60 км².

За время эксплуатации Полдневского водозабора состав воды из гидрокарбонатного стал сульфатно-гидрокарбонатным, минерализация возросла от 0.5 до 0.9 г/л и более, преимущественно за счет сульфат-иона, содержание которого увеличилось от 15 до 60—80 мг/л, а жесткость возросла от 6—6.5 до 8—10 мг-экв/л (рис. 6.25). Исследования показали (Вишняк, 2005), что данное ухудшение качества подземных вод на Полдневском месторождении происходит в результате формирования зоны окисления пирита, содержащегося (до 5 вес.%) в покровных отложениях над депрессионной поверхностью подземных вод.

6.4.2. Математическая модель

В предельно упрощенной модели предполагается, что снижение уровня подземных вод при водоотборе с дебитом Q обеспечивает доступ атмосферного кислорода к рассеянными в породе сульфидным минералам, способствуя их окислению. Основным подвижным продуктом этой реакции в форме сульфат-иона поступает в подвижную водную фазу и переносится в вертикальном направлении инфильтрационной водой.

Обозначим концентрацию сульфатов в инфильтрационных водах — C_2 , фоновые значения — C^0 . Удельный расход (скорость) инфильтрации — ε . Базовое уравнение массового баланса для условий сходящегося радиального потока имеет вид (Румынин, 2011)

$$m_1 n_1 \frac{\partial C_1}{\partial t} + v_1(r) m_1 \frac{\partial C_1}{\partial r} + \varepsilon (C_1 - C_2) = 0, \quad (6.93)$$

где $C_1 = C_1(r, t)$ — текущая концентрация вещества в произвольной точке пласта, из которого производится водоотбор; m_1 и n_1 — соответственно мощность и пористость пласта; $v_1(r)$ — радиальная скорость фильтрации.

Перепишем уравнение (6.93) в форме

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u(r) \frac{\partial C}{\partial r} + \varepsilon^* C = 0, \quad (6.94)$$

где $C = C_1 - C_2$, $u(r) = v_1(r)/n = Q/2\pi m_1 n_1 r$, $\varepsilon^* = \varepsilon/m_1 n_1$.

Уравнению (6.94) соответствует система обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dt}{1} = \frac{dr}{u(r)} = -\frac{1}{\varepsilon^*} \frac{dC}{C}. \quad (6.95)$$

Интегрируя первое равенство (6.95),

$$\int_0^t dt = \int_r^{r_w} \frac{dr}{u(r)}, \quad (6.96)$$

получаем выражение для нахождения времени движения частицы воды от произвольной точки на цилиндрической поверхности $r = r(t)$ до расчетной точки $r = r_w$:

$$t = \int_{r_w}^{r(t)} \frac{dr}{|u(r)|} = \frac{\pi m_1 n_1 (r^2 - r_w^2)}{Q}. \quad (6.97)$$

Интегральное тождество для определения текущей концентрации C в расчетной точке $r = r_w$ выглядит, очевидно, следующим образом (см. второе уравнение системы (6.95)):

$$\int_{C^0}^C \frac{dC_1}{C_1 - C_2} = - \int_{r(t)}^{r_w} \frac{\varepsilon^*}{u(r)} dr = -\varepsilon^* t. \quad (6.98)$$

Интегрируя левую часть тождества (6.98), находим окончательное решение задачи в виде

$$\bar{C} = \frac{C_1 - C^0}{C_2 - C^0} = 1 - \exp(-\varepsilon^* t), \quad (6.99)$$

или в размерной форме

$$C_1 = C^0 + (C_2 - C^0)[1 - \exp(-\varepsilon^* t)]. \quad (6.100)$$

Как можно видеть из решения (6.100), при больших t концентрация сульфатов в скважине стремится к их концентрации в инфильтрационных водах.

Одной из проблем, связанных с проектированием и эксплуатацией водозаборных сооружений, является проблема прогнозирования возможных изменений качества подземной воды в области их воздействия под влиянием перетекания (или отжатия) природных некондиционных вод из смежных (по отношению к эксплуатационному горизонту) зон разреза. Основным интерес представляют оценки качества откачиваемой воды, т. е. решения задач относительно концентрационных функций в скважинах. Физико-математическую формулировку соответствующих задач и их решение можно найти в работах Ф. М. Бочера с соавторами (1979) и В. Г. Румынина (2011).

Глава 7

ПРИМЕР ИЗУЧЕНИЯ ПРИРОДНЫХ И ТЕХНОГЕННЫХ ФАКТОРОВ ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ВОДОЗАБОРЫ ПОДЗЕМНЫХ ВОД В МЕЖГОРНОМ АРТЕЗИАНСКОМ БАССЕЙНЕ (ХИБИНЫ, КИРОВСКИЙ ГОРНОПРОМЫШЛЕННЫЙ РАЙОН, МУРМАНСКАЯ ОБЛАСТЬ)

Данный пример является, по сути, связующим звеном между двумя ключевыми разделами данной работы, посвященными, с одной стороны, санитарной защищенности подземных вод на водозаборах (гл. 5 и 6), а с другой стороны — прогнозированию воздействия горнодобывающего производства на загрязнение

подземных вод, в частности, на участках размещения такого рода инженерных объектов (гл. 8—10). При этом наряду с техногенным фактором наблюдается воздействие на качество отбираемой воды интрузии глубинных щелочных вод кристаллического фундамента, отличающихся повышенным содержанием ионов алюминия.

Подземные воды являются в настоящее время одним из основных источников питьевого водоснабжения г. Кировска (Мурманская область). Они отбираются несколькими водозаборами в пределах приозерной низменности оз. Большой Вудъявр и примыкающих речных долин, которые попадают в область влияния горнодобывающего производства, связанного с разработкой апатит-нефелиновых месторождений (добываемая руда — минеральное сырье для производства фосфатных удобрений), а также нескольких населенных пунктов (рис. 7.1). Такое соседство предполагает повышенное внимание к оценке защищенности подземных вод Вудъяврского месторождения от загрязнения промышленными и бытовыми стоками (Румынин и др., 1991). Имея это в виду, остановимся на ретроспективном анализе формирования качества подземных вод в условиях повышенной антропогенной нагрузки на них.

Озеро Б. Вудъявр является самым крупным внутренним водоемом Хибин. С северо-востока в озеро впадает р. Юкспорйок, с севера — р. Саамская, с северо-запада — р. Вудъяврйок. Единственной естественной дренажной, принимающей весь сток бассейна, является р. Белая, вытекающая из юго-западной части озера и впадающая в губу Белая оз. Имандра.

Промышленное освоение территории началось в конце 1920-х—начале 1930-х гг. Первенцем горнодобывающей отрасли стал Кировский рудник (рудник им. С. М. Кирова, 1929 г.), расположенный в верховьях р. Саамской. В 1954 г. началась разработка Юкспорского месторождения, расположенного на другом борту долины р. Саамской. Впоследствии (1989 г.) оба рудника, разрабатывающие Кукисвумчоррское и Юкспорское апатито-нефелиновые месторождения, были объединены. Часть запасов по лежащему боку рудного тела обрабатывалось Саамским карьером. В послевоенное время, в 1950-е гг., начинает также разрабатываться Расвумчоррский рудник (основан в 1954 г.) в предгорьях плато Расвумчорр Хибинского массива. Основной способ добычи руды — подземный. В область влияния нового рудника попадает другая долина в пределах водосборной площади оз. Б. Вудъявр — р. Юкспорйок.

В долинах рек располагаются жилые населенные пункты (в частности, поселки Кукисвумчорр и Юкспорйок). Известны периоды, когда природные водотоки использовались в качестве коллекторов сточных вод. Наряду с бытовыми стоками, образующимися при утечках (в том числе аварийных) в системах городской канализации, источниками загрязнения

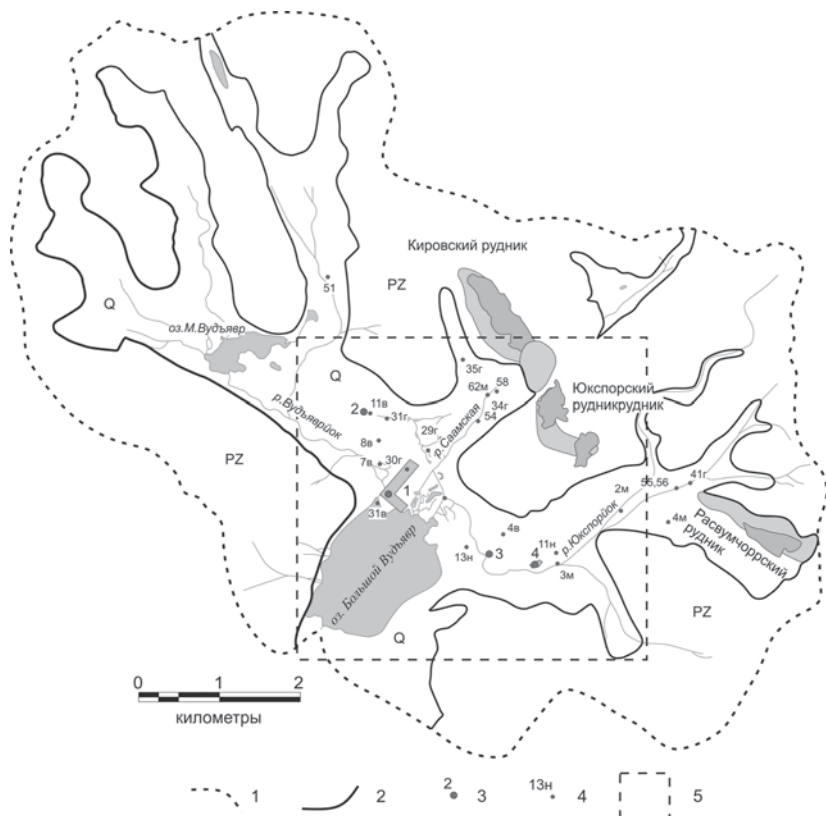


Рис. 7.1. Водосборная площадь бассейна о. Б. Вудъявр и расположение основных объектов (по материалам ОАО «Мурманская геологоразведочная экспедиция»).

1 — граница водосборной площади; 2 — граница распространения четвертичных отложений; 3 — водозабор и его номер (1 — «Центральный», 2 — «Болотный», 3 — «Скважина 5В», 4 — «Ключевой»); 4 — наблюдательная скважина и ее номер; 5 — область изучения загрязнения подземных вод (1988 г. — см. рис. 7.6).

являются дренажные воды рудников, сбрасываемые в речную сеть и/или инфильтрующиеся через почвы горных выработок.

Несмотря на непростую экологическую ситуацию, система централизованного водоснабжения населения и промышленных объектов предприятия «Апатит» успешно развивается. В настоящее время эксплуатируется несколько водозаборов подземных вод: «Центральный», расположенный на северо-восточном побережье оз. Б. Вудъявр, «Ключевой», «Скважина 5В» и «Источник Болотный», расположенными соответственно в 1.2 км северо-западнее, 3 км юго-восточнее водозабора «Центральный» (рис. 7.1, 7.2, 7.6).

7.1. Гидрогеологические условия

Рассматриваемый район в гидрогеологическом отношении представляет собой межгорный артезианский бассейн, приуроченный к южной части Хибинского щелочного массива, с четко выраженной водосборной площадью. Источником пополнения запасов подземных вод служат атмосферные осадки; часть атмосферной влаги формирует сток рек Вудъявр-йоок, Саамской и Юкспорйоок, которые впадают в озеро Б. Вудъявр. Среднее многолетнее количество осадков, по данным ГЛУ «Центральный», «Восточный» и «Кировск», составляют 1283, 994 и 896 мм/год соответственно. Эти вариации связаны с различным высотным (абсолютные отметки относительно уровня моря) расположением пунктов гидрометеорологических наблюдений.

В районе выделяют два основных водоносных комплекса — четвертичных образований и коренных пород карбонового возраста (рис. 7.2).

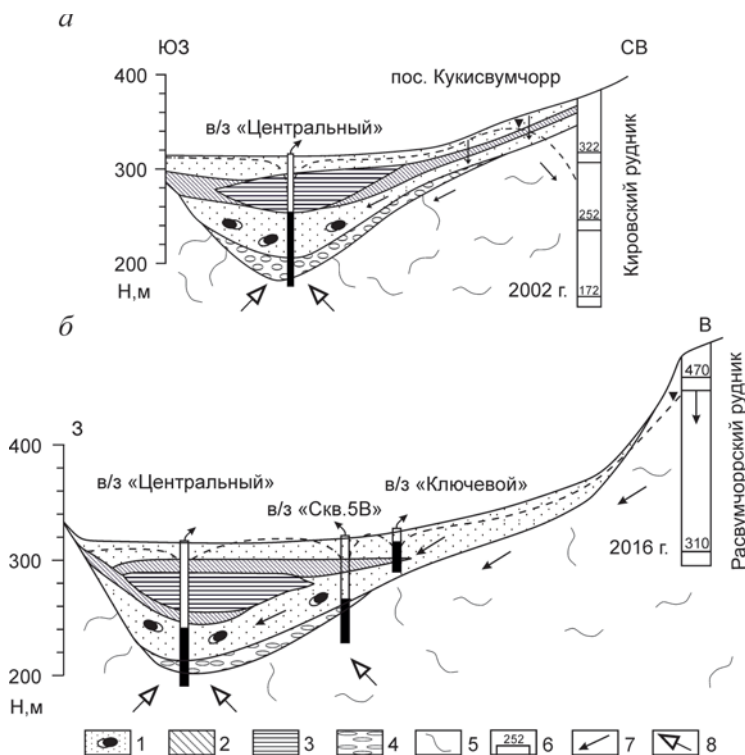


Рис. 7.2. Схематические гидрогеологические разрезы.

а — ЮЗ—СВ, б — З—В. 1 — песчано-гравийные ледниковые отложения; 2 — суглинки и супеси; 3 — ленточные глины; 4 — конгломераты; 5 — кристаллические трещиноватые породы; 6 — горизонт отработки рудного тела; 7 — направление движения загрязненных вод; 8 — интрузия глубинных (щелочных) вод фундамента.

Водоносный комплекс четвертичных образований включает в себя: грунтовый водоносный горизонт и, отделенный от него толщей ленточных глин, напорный горизонт валунно-галичниковых отложений. В верховьях речных долин, где глины отсутствуют, эти горизонты связаны между собой довольно тесно и образуют единый безнапорный комплекс.

Напорный горизонт отличается значительной водообильностью при средней водопроницаемости около 700—800 м²/сут и коэффициенте фильтрации 10—30 м/сут. Проницаемость верхней части комплекса коренных пород обусловлена развитием зоны выветривания и тектонических зон дробления. Коэффициент фильтрации верхних 50—100 м этого комплекса составляет в среднем 0.1—0.5 м/сут.

Движение подземного потока имеет направление со стороны горного обрамления к оз. Б. Вудъявр. Частичная разгрузка этого потока происходит по периметру низменности в виде восходящих источников. Далее подземный поток транзитом проходит под оз. Б. Вудъявр и разгружается в виде серии восходящих источников в долине р. Белая, вытекающей из этого озера. На приозерной низменности расположены упомянутые выше водозаборы, эксплуатирующие напорный водоносный горизонт. В верховьях рек Саамской и Юкспорйок кристаллический водоносный горизонт дренируется рудниками — Кировским и Расвумчорским.

Химический состав подземных вод в естественных условиях был повсеместно гидрокарбонатным натриевым с минерализацией 40—60 мг/л.

7.2. Динамика водоотбора подземных вод

Режим эксплуатации месторождения подземных вод. Общий тренд эксплуатации подземных вод скважинами водозабора «Центральный» показывает положительную динамику водоотбора в период с 1982 по 1994 г. с максимальным значением около 32 тыс. м³/сут (рис. 7.3). Начиная с 1996 г. водоотбор постепенно понижался с 29.3 тыс. м³/сут до 14 тыс. м³/сут (2014 г.). Водозабор «Ключевой» характеризуется более стабильным водоотбором: за период наблюдений с 1981 по 2012 г. его средняя величина составила 5 тыс. м³/сут при максимальном значении 7 тыс. м³/сут (1986 г.) и минимальном — 4 тыс. м³/сут (1996 г.). Водоотбор из водозаборов «Болотный» и «Скважина 5В» как в многолетнем, так и в годовом цикле наблюдений характеризуется значительной изменчивостью. Водозабор «Болотный» в период с 1987 по 1996 г. для водоснабжения не использовался. Начиная с 1997 г. его дебит 5—6 тыс. м³/сут (2011—2014 гг.). С 1991 г. водозабор «Скважина 5В» не эксплуатируется.

Величина снижения уровня напорного водоносного горизонта четвертичных отложений за период эксплуатации водозабора «Центральный» с марта 1977 по 2005 г. на территории водозабора составляет в среднем 14—29 м в зависимости от места расположения эксплуатационных скважин. Анализируя положение депрессионной воронки в приозерной низменности оз. Б. Вудъявр, можно отметить, что в связи с уменьшением водопотребления уровенная поверхность подземных вод испытывала неко-



Рис. 7.3. График изменения водоотбора (1980—2014 гг.).

торую тенденцию к повышению. Уровненный режим зависит также от водности года — величины инфильтрационного питания.

Температурный режим (по данным наблюдений за период с 1999 по 2004 г.). Полученные материалы (рис. 7.4) свидетельствуют о высокой чувствительности теплового режима эксплуатируемого горизонта к сезонным колебаниям температуры на поверхности. Минимальные температуры (2.3—3.7 °С) наблюдаются в самое холодное время года (декабрь—март), максимальные (3.8—5.1 °С) — летом (июль—август). Та-

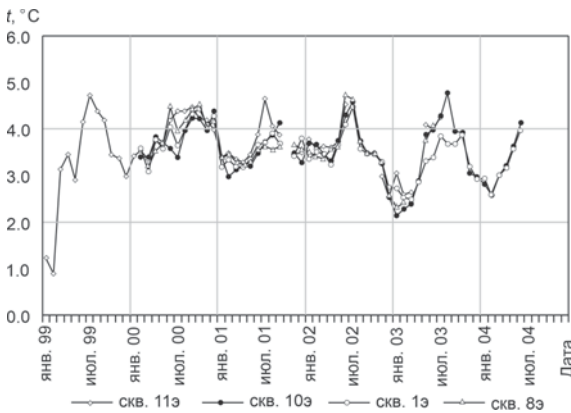


Рис. 7.4. Графики колебания среднемесячной температуры напорного водоносного горизонта четвертичных отложений (нарушенный режим) за 1999—2004 гг.

кое поведение кривых можно объяснить, если предположить, что низкая температура подземных вод в целом, как «фоновая» температура, определяется инфильтрацией холодных талых вод в период снеготаяния. Повышение температуры определяют летние дожди и положительные температуры воздуха в летний период.

7.3. Природное качество подземных вод на водозаборах и его вариации

На формирование химического состава подземных вод напорного водоносного горизонта четвертичных отложений на территории водозабора «Центральный» оказывают влияние следующие факторы: минералогический состав водовмещающих пород; перетекание вод из грунтового водоносного горизонта и вовлечение в водоотбор вод из глубоких зон трещиноватых кристаллических пород; источники антропогенного загрязнения в зоне влияния водозабора.

По химическому составу подземные воды напорного водоносного горизонта четвертичных отложений, эксплуатируемые водозабором «Центральный», преимущественно гидрокарбонатные натриевые, реже сульфатно-гидрокарбонатные натриевые от ультрапресных (минерализация 26—97 мг/л по сухому остатку) до пресных (105—120 г/л), мягкие (общая жесткость 0.00—0.1 ммоль/л), от щелочных до весьма щелочных (рН = 8.58—9.78); содержание фтора варьирует от < 0.04 до 0.53 мг/л (скважина 4э). Содержание общего железа, фосфатов, аммиака и нитритов, а также нефтепродуктов и фенолов по всем скважинам ниже значений ПДК. Содержание микрокомпонентов (Mn, Cu, Ni, Cd, Co, Zn, Pb, B, Cr⁶⁺, Ti, Hg и Ba) также значительно ниже значений ПДК.

Подземные воды эксплуатируемого напорного водоносного горизонта характеризуются аномальными показателями кислотно-щелочной реакции — высокими значениями рН, которые, как правило, превышают ПДК. Содержание алюминия в подземных водах эксплуатируемого напорного горизонта изменяется (данные мониторинга 1999—2004 гг.) в пределах 0.27—1.91 мг/л, при среднем значении от 0.37 мг/л (скважина 10э) до 1.30 мг/л (скважина 3э), что превышает ПДК (0.2 мг/л).

Отмечается тенденция роста значений рН и увеличение концентрации алюминия в эксплуатационных скважинах при снижении интенсивности водоотбора (суммарный дебит скважин снизился с примерно с 11 млн м³ в 1996 г. до 7 млн м³ в 2005 г.) — рис. 7.5. Такая тенденция может быть связана с влиянием интенсивности водоотбора на величину привлекаемых ресурсов (Мазухина, 2016): рост дебита скважин ведет к увеличению объемов перетекания из грунтового горизонта и из поверхностных водных объектов, характеризующихся низкой щелочностью и содержанием алюминия. Следовательно, степень разбавления щелочных вод фундамента увеличивается, что способствует улучшению качества откачиваемых вод. И наоборот, снижение дебита увеличивает долю глубинных щелочных вод с высоким содержанием алюминия.

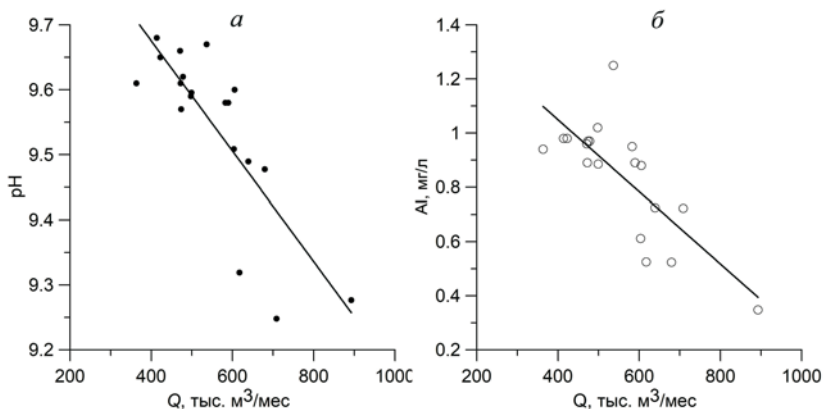


Рис. 7.5. Связь средних значений рН (а) и концентрации Al (б) со средне-месячным водоотбором на водозаборе «Центральный» (1996—2014 гг. — нисходящая ветвь суммарного расхода на рис. 7.3).

Прямые на графике — линии временного тренда (по материалам Н. А. Максимовой, ОАО «Мурманская ГРЭС», 2015).

Составим систему уравнений водного и химического (применительно к ионам гидроксила, OH^-) баланса для условий водозабора, имея в виду два источника водных ресурсов (запасов) — воды четвертичных отложений (напорный и грунтовый водоносные горизонты) и кристаллического фундамента. Суммарный дебит Q_T складывается из притока вод из четвертичного комплекса (пористые породы) Q_P и вод кристаллического фундамента (трещиноватые породы) Q_K :

$$Q_T = Q_P + Q_K. \quad (7.1)$$

Смешение вод на водозаборе, характеризующихся содержанием гидроксил-иона $[\text{OH}^-]_P$ и $[\text{OH}^-]_K$, соответственно описывается уравнением массового баланса

$$Q_T[\text{OH}^-]_x = Q_P[\text{OH}^-]_P + Q_K[\text{OH}^-]_K, \quad (7.2)$$

где $[\text{OH}^-]$ — концентрация гидроксильных ионов в откачиваемой воде. Решая совместно уравнения (7.1) и (7.2), находим:

$$[\text{OH}^-]_x = \alpha [\text{OH}^-]_K + (1 - \alpha) [\text{OH}^-]_P, \quad (7.3)$$

где $\alpha = Q_K/Q_T$

Напомним, $[\text{OH}^-] = 10^{\text{pH}-14}$ (моль/л). Примем за «фоновое» значение рН для вод четвертичных отложений значение 8, а для вод кристаллического фундамента в области расположения водозабора рН = 10.5. Тогда $[\text{OH}^-]_P = 10^{-6}$ моль/л, $[\text{OH}^-]_K = 3.16 \cdot 10^{-4}$ моль/л. Отсюда, основываясь на

решении (7.2), легко показать, что результирующая величина рН будет при таких соотношениях рН весьма чувствительна к доли щелочных вод фундамента, принимающих участие в формировании притока воды к водозабору. Например, при $\alpha = 0.1$ (10 %) $pH = 9.57$, а при $\alpha = 0.01$ (1 %), $pH = 8.66$. В принципе между этими значениями и меняется кислотно-щелочная реакция вод, отбираемых на водозаборе «Центральный». Очевидно, коэффициент α зависит от суммарного дебита, чем и может быть объяснена тенденция изменения рН воды и контролируемое этим параметром содержание в воде ионов алюминия, о чем говорилось выше.

Подземные воды, отбираемые в начале 1990-х гг. скв. 5В в долине р. Юкспорйок (водозабор «Скважина 5В»), также характеризовались $pH > 9$ и повышенными концентрациями алюминия. Для водозабора «Ключевой», находящегося выше по потоку, природное качество воды отвечало нормативным требованиям ($pH < 9$, концентрация ионов алюминия ниже 0.2 мг/л). Подземные воды источника «Болотный» (долина р. Вудьяврйок) по химическому составу сульфатно-гидрокарбонатные натриевые, ультрапресные (минерализация изменяется в пределах 30.8—31.4 мг/л), мягкие (общая жесткость 0.05—0.15 ммоль/л), от нейтральных до слабощелочных (pH 7.8—8.7). Содержание алюминия изменяется в пределах 0.06—0.11 мг/л, что не превышает ПДК — 0.2 мг/л. Содержания остальных нормируемых компонентов и показателей не превышают значений ПДК, в большинстве случаев значительно ниже ПДК. Состав вод источника может рассматриваться в качестве фоновый для района.

7.4. Анализ воздействия антропогенных факторов на качество подземных вод

В 1988 г. в пределах рассматриваемой территории были выполнены комплексные гидрохимические и изотопные исследования (Румынин и др., 1991). Пробы воды отбирались из поверхностных водотоков, скважин, родников, а также из дренажных узлов рудников и городской канализационной сети (рис. 7.6). Были отмечены вполне определенные техногенные изменения в гидрохимическом режиме природных вод приозерной низменности. Исключение составляет западная часть бассейна — долина р. Вудьяврйок, где воды имеют состав, близкий к естественному (источник «Болотный»).

Наиболее рельефно изменение состава вод, связанное с их антропогенным загрязнением, прослеживается по росту концентрации в них соединений азота (прежде всего ионов NO_3^-), а также сульфатов и хлоридов (SO_4^{2-} и Cl^-). Метаморфизация катионного состава вод выражена слабее и характеризуется небольшим накоплением в них ионов кальция и магния.

Так, в грунтовом горизонте в верховьях долины рек Саамской и Юкспорйок были отмечены резко повышенные содержания нитратов (до 20—30 мг/л при фоне по NO_3^- около 0.5 мг/л), хлоридов (до 10—20 мг/л при фоновом значении 1 мг/л) и сульфатов до 30—40 мг/л (фон для SO_4^{2-} 1—2 мг/л). Наряду с северным и восточным ореолами за-



Рис. 7.6. Схема загрязнения подземных вод в бассейне оз. Большой Вудьяр (по данным опробования 1988 г.).

1 — граница распространения четвертичных отложений; 2 — эксплуатационная скважина; 3 — наблюдательная скважина на четвертичный горизонт (в числителе дроби — концентрация нитратов, мг/л, в знаменателе — отношение концентраций хлоридов к сульфатам, мг/л); 4 — то же на горизонт кристаллических пород фундамента; 5 — изолиния содержания NO_3^- (мг/л); 6 — зона обрушения.

грязнения отчетливо выделяется область менее загрязненных вод, включающая ряд скважин хозяйственного водозабора; ее появление обусловлено смешиванием потоков загрязненных вод (северного и восточного) с чистыми водами долины р. Вудьяр'ок (рис. 7.6).

По данным опробования 1988 г., подземные воды приозерной низменности (рис. 7.6) характеризуются весьма устойчивым соотношением концентраций (мг/л) главных анионов. Концентрации сульфатов примерно в полтора (иногда в два) раза превышают концентрации нитратов $\text{SO}_4^{2-} : \text{NO}_3^- = 1.5-2$ (рис. 7.7, а), а хлоридов — в 3—4 раза, т. е. $\text{SO}_4^{2-} : \text{Cl}^- = 3-4$ (рис. 7.7, б). Абсолютные значения концентрации ионов SO_4^{2-} и NO_3^- в подземных водах почти всегда ниже 40—50 мг/л.

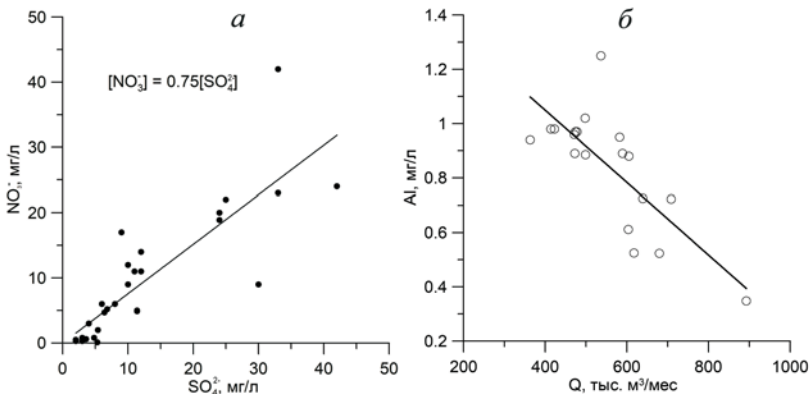


Рис. 7.7. Соотношения концентраций SO_4^{2-} и NO_3^- в подземных водах (а) и связь этих концентраций с хлоридами в подземных и рудничных водах (б) (залитые кружки — SO_4^{2-} , незалитые — NO_3^-). Данные опробования 1988 г.

Резко повышенные концентрации нитратов и сульфатов были установлены в рудничных водах обрабатываемых месторождений (Кировский/Юкспорский и Расвумчоррский рудники) при том же примерно содержании в этих водах хлоридов (рис. 7.8, табл. 7.1). Те же показатели качества рудничных вод сохранились и в последующие десятилетия (рис. 7.8). Более того, начавшаяся гораздо позже (начало 2000-х гг.) обработка рудника Восточный (Коашвинское и Нюрпахское месторождения) способствовала формированию дренажных вод примерно такого же состава (табл. 7.1, см. также разд. 7.2.3).

Присутствие нитратов в рудничных водах обусловлено в основном растворением остатков взрывчатых веществ и продуктов их детонации из

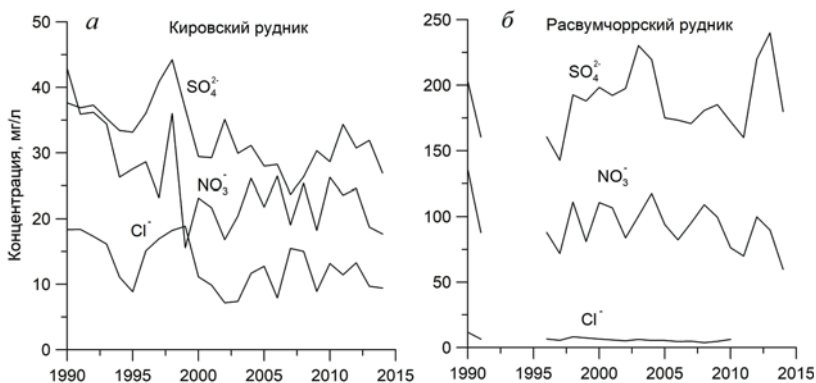


Рис. 7.8. Среднегодовые концентрации загрязняющих компонентов в рудничных водах.

Таблица 7.1

**Содержание специфических загрязняющих компонентов
в рудничных (шахтных) водах в местах их сброса в речную сеть (мг/л)**

Компо- ненты	Рудники/место сброса/период				
	Кировский		Юкспорский	Расвумчоррский	Центральный
	р. Саамская		р. Саамская	руч. Кристальный	руч. Буровой
	1980-е гг.	1990—2014 гг.	1980-е гг.	1996—2010 гг.	2008—2014 гг.
NO_3^-	30—50	20—35	200—270	80—110	80—150
SO_4^{2-}	30—80	25—40	120	170—210	290—320
Cl ⁻	9—20	9—18	8—15	4—7	4—7

взорванной горной массы. Сульфаты — продукты окисления сульфидных минералов в породах, вскрываемых горными выработками, а также в горных отвалах (см. разд. 7.2). Приведенные в табл. 7.1 концентрации отвечают значениям, зарегистрированным в местах сброса рудничных вод в речную сеть.

Речные воды по мере продвижения от истоков к устью в значительной степени разбавляются относительно чистыми водами впадающих в них ручьев, что в несколько раз снижает концентрации компонентов-загрязнителей и значения pH. В среднем течении р. Саамская среднегодовые концентрации нитратов менялись от 10—15 мг/л в начале 2000-х гг. до 30—35 мг/л в 2010—2014 гг. Концентрация сульфатов в эти периоды менялась в диапазонах 20—25 и 40—50 мг/л. В среднем течении р. Юкспорйок среднегодовые концентрации нитратов и сульфатов составляли соответственно 35 и 65 мг/л (2001—2014 гг.).

Обращает на себя внимание двух-трехкратное превышение концентраций хлоридов в рудничных водах Кировского и Юкспорского рудников (позже — объединенный Кировский рудник) над содержанием этого иона в рудничных водах Расвумчоррского и Центрального рудников (табл. 7.1). Очевидно, что это возможно только в случае, если дренируемые Кировским рудником горизонты уже содержат в заметных количествах хлориды. Они имеют, скорее всего, биологическое происхождение, т.е. связаны с инфильтрационными потерями коммунально-бытовых стоков пос. Кукисвумчорр. Присутствие хлоридов в рудничных водах говорит о хорошей связи (в верхнем и среднем течении р. Саамской) грунтового горизонта с нижерасположенными горизонтами четвертичных отложений и кристаллических пород. Схематично особенности процесса загрязнения представлены на рис. 7.2.

Для долины р. Юкспорйок характерна более высокая степень защищенности нижних горизонтов от бытового загрязнения, которая обеспечивается повышенными напорами в них. В то же время азотные соединения на этом участке могут поступать в подземные воды непосредственно из горных выработок. Этому способствует расположение Расвумчоррско-

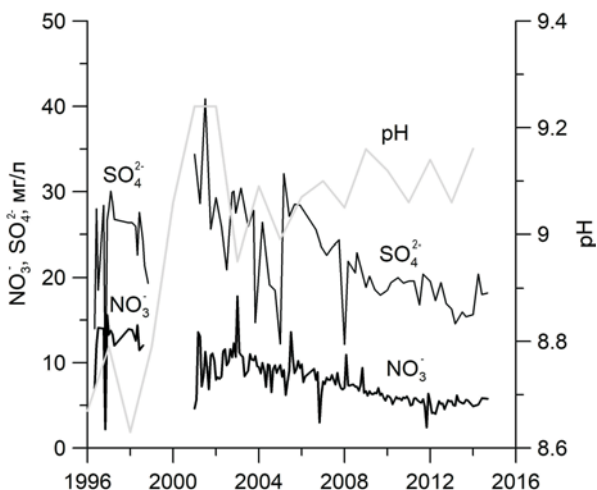


Рис. 7.9. Изменение концентрации ионов NO_3^{2-} и SO_4^{2-} в скважине 10Э водозабора «Центральный» (по материалам Н. А. Максимовой, ОАО «Мурманская ГРЭ»), 2015 г.).

го рудника в области питания водоносных горизонтов: насыщение инфильтрационных вод азотными соединениями происходит при просачивании через раздробленные взрывами породы, загрязненные продуктами разложения взрывчатых веществ. Вместе с тем верхние горизонты обработки рудников, находясь в зоне сезонных колебаний уровня подземных вод, периодически подтапливаются, что усиливает процессы выноса азота через почву выработок. В 2016 г. началась отработка горизонта 310 м. На этой отметке фиксируются и напоры подземных вод в центральной части приозерной низменности.

Уровень нитратного загрязнения на водозаборе «Центральный» существенно ниже допустимого (ПДК по азоту в пересчете на NO_3^- 45 мг/л). Концентрация нитратов фиксировалась (1988 г.) в водозаборных скважинах практически на том же уровне, что и в 1977 г., когда начиналась эксплуатация водозабора (первая очередь). Например, средняя концентрация NO_3^- в наиболее «загрязненной» скважине 10Э составляла около 11 мг/л.

По данным мониторинга 1996—2014 гг., в скважине 10Э содержание NO_3^- колебалось от 6 до 16 мг/л, т. е. среднее значение оставалось таким же, как и 20—27 лет тому назад, однако в последние 10—15 лет можно отметить явную тенденцию к снижению уровня загрязнения подземных вод (рис. 7.9). Данная тенденция, прослеживаемая также по наблюдениям за концентрацией иона SO_4^{2-} (рис. 7.9), может иметь два объяснения. Первое — снижение антропогенной нагрузки на речные долины в связи с уменьшением потерь канализационных стоков на площадях жилищной застройки и некоторым сокращением масштабов горных

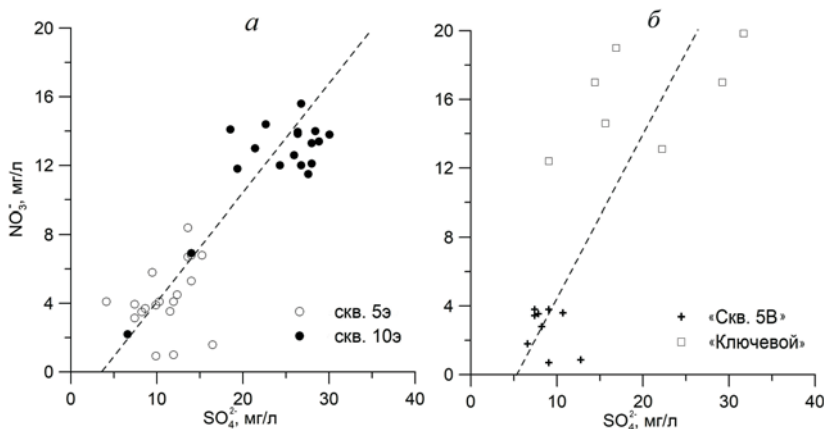


Рис. 7.10. Соотношения концентраций ионов NO_3^- и SO_4^{2-} в подземных водах.

a — водозабора «Центральный» (скв. 5э и 10э), *б* — водозаборов «Ключевой» (скв. 3к) и «Скважина 5В». 1996—1998 гг.

работ. Второе — уменьшение производительности водозабора, за счет чего доля привлекаемых загрязненных грунтовых вод сокращается. Влияние последнего фактора согласуется с динамикой роста концентрации Al и pH (см. разд. 7.4.3, рис. 7.5) — маркеры глубинных вод в системе водотбора; кривая pH как функция времени также показана на графике рис. 7.9.

Интересно отметить, что для водозабора «Центральный» отмечается весьма устойчивое соотношение ионов $\text{NO}_3^-/\text{SO}_4^{2-}$. Для примера на графике рис. 7.10, *a* приведены данные трехлетних наблюдений (1996—1998 гг.) по двум эксплуатационным скважинам (5э и 10э), подобные обобщенному графику на рис. 7.7, *a*, в которых уровень загрязнения наиболее высокий. Как видно, обе статистических выборки (скв. 5э и скв. 10э) аппроксимируются одной прямой, что говорит, скорее всего, о том, что различия в абсолютных значениях концентраций NO_3^- и SO_4^{2-} связаны с различной степенью разбавления загрязненных вод чистыми водами, происходящего на водозаборных устройствах, а генезис этих ионов одинаковый.

К аналогичным выводам об относительной стабильности химического состава вод привел анализ данных мониторинга на участке размещения скважин водозабора «Ключевой» (1996—2014 гг.) и «Скважина 5В» (1990-е гг.) в долине р. Юкспорйок. Здесь также отмечается довольно устойчивое соотношение ионов $\text{NO}_3^-/\text{SO}_4^{2-}$ (рис. 7.10, *б*).

Осталось заметить, что сульфаты и нитраты свойственны также бытовым сточным водам в пределах размещения муниципальных образований. Присутствие хлоридов однозначно указывает на биологическую компоненту в общем загрязнении. Таким образом, оба потенциальных источника загрязнения (рудничные/шахтные воды и городские бытовые/канализационные стоки) имеют схожий геохимический облик.

7.5. Изотопная идентификация генезиса азотных соединений и определение возраста воды

Нитраты рудничных вод, связанные с растворением остатков взрывчатых веществ и продуктов их детонации, относятся к классу «техногенных» нитратов неорганического происхождения. В сточных коммунально-фекальных водах поселков нитраты являются продуктами жизнедеятельности и окисления живой материи, т. е. имеют органическое происхождение. Известно, что биологические циклы живых организмов способствуют изменению изотопных соотношений отдельных химических элементов, участвующих в этих циклах. Таким образом, например, накапливаются в продуктах жизнедеятельности «тяжелые» изотопы азота (^{15}N). Поэтому данная метка — отношение изотопных чисел ($R = ^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$) представляется перспективной для идентификации генезиса источника нитратного загрязнения.

Результаты замеров удобно представлять в форме

$$\delta^{15}\text{N}(\%) = (R_{\text{об}}/R_{\text{ат}} - 1)1000, \quad (7.4)$$

где $R_{\text{об}}$, $R_{\text{ат}}$ — отношения изотопных чисел ($^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$) в образце (пробе воды) и в атмосфере.

Опробование 1988 г. показало, что значения $\delta^{15}\text{N}$ в рассматриваемом районе варьируют от -15% до $+1.7\%$. При этом однозначно выделяется зона природных «фоновых» вод, характеризующихся значениями $\delta^{15}\text{N} = +5.5\%$ (при NO_3^- 0.5 мг/л); техногенным (рудничным) водам свойственно минимальное значение $\delta^{15}\text{N} = -15\%$ (NO_3^- 100 — 300 мг/л) — замер по Юкспорскому руднику. Для «биогенных» вод принята расчетная величина $\delta^{15}\text{N} = +2.2\%$ (NO_3^- до 35 мг/л).

Различия в изотопии азота, свойственные внешним источникам растворенного вещества, позволили определить в скважинах водозабора «Центральный» в заметном количестве биогенные нитраты; их присутствие обусловлено преобладанием потока вод, загрязненных бытовыми стоками, с севера — со стороны поселка Кукисвумчорр. Восточный ореол загрязнения (долина р. Юкспорйок) содержит преимущественно «техногенные» нитраты.

Интенсивность и временные тенденции развития процесса загрязнения могут быть оценены с помощью методов изотопного датирования подземных вод. Среди них — тритий-гелий-3 метод (Толстихин, Каменский, 1969). В соответствии с теоретическими предпосылками достаточной является оценка соотношения $\alpha = {}^3\text{He}_{\text{трит}} / {}^3\text{H}$ (${}^3\text{He}_{\text{трит}}$ — концентрация гелия-3, образующегося в подземной гидросфере за счет распада трития — родительский изотоп). Тогда возраст воды ($t_{\text{в}}$) определяется по формуле

$$t_{\text{в}} = \frac{1}{\lambda} \ln(1 + {}^3\text{He}_{\text{трит}}/{}^3\text{H}), \quad (7.5)$$

где λ — константа распада ${}^3\text{H}$ (0.056 год $^{-1}$); ${}^3\text{He}_{\text{трит}}$ и ${}^3\text{H}$ концентрации изотопов в воде (Т. Е.). Формулу (7.5) можно переписать в виде:

$$t_b = 17.69 \ln(1 + 4.021 \cdot 10^{14} \alpha), \text{ год}, \quad (7.6)$$

где множитель перед коэффициентом α отвечает замерам $^3\text{He}_{\text{ТРИТ}}$ в нсм³/г H₂O, а ^3H — в Т. Е.

Существуют еще два источника гелия в подземных водах: горные породы, также выделяющие He, и инфильтрационные воды, содержащие атмосферный (первичный, космогенный) гелий. Поэтому главная трудность состоит в выделении $^3\text{He}_{\text{ТРИТ}}$ составляющей в общей массе изотопов ^3He . Для этого в расчетах используются не только концентрации трития, но и изотопные соотношения $^3\text{He}/^4\text{He}$ и $^{20}\text{Ne}/^4\text{He}$, что позволяет определить пропорцию смешения вод различного происхождения и определить концентрацию тритиевого гелия расчетным путем.

Первое опробование было проведено в 1988 г. для семи скважин водозабора «Центральный» (Kamensky et al., 1991). Полученные результаты показали, что в формировании водопритоков к скважинам принимают участие как «молодые» воды инфильтрационного генезиса, так и «древние» воды фундамента. При этом «молодая» вода (возраст около 16 лет) составляет более 90 % от общего объема, а «древняя» вода (возраст около 50 тыс. лет) — остальное. Напомним, что последняя содержит в весьма высоких концентрациях ионы алюминия и характеризуется повышенной щелочностью (высокими pH). В разных скважинах соотношение между «молодой» и «древней» водой оказалось различным.

Опробования 1992 г. и 2011—2012 гг. подтвердили выявленную в 1988 г. картину распределения возрастов воды (Гудков и др., 2014; Каменский и др., 2016). В итоге для всех трех этапов работы была получена согласованная оценка возраста «молодой» воды — около 21 года.

Отталкиваясь от полученных результатов, приходим к следующему заключению.

1) Основную роль в формировании баланса фильтрационного потока в приозерной низменности играют пористые (песчано-гравийно-галечные) отложения; в противном случае, учитывая вероятные (несколько десятков м/сут — при наблюдаемых гидравлических градиентах) действительные скорости движения воды в трещиноватых породах фундамента, возраст инфильтрационных вод был бы существенно моложе.

2) Полученные значения времени t_b заметно (три-четыре раза) уступают периоду функционирования основных источников загрязнения (интенсивная разработка месторождений и строительство поселка начались более 80 лет назад). Сказанное позволяет надеяться, что мы наблюдаем «гидрогеохимический стационар»: на водозаборе фиксируются предельно возможные значения концентраций загрязняющих компонентов (если допустить примерно постоянную интенсивность поступления этих компонентов из источников загрязнения в подземные воды).

3) Величина t_b более чем на порядок превышает характерные времена (200—400 сут) выживаемости болезнетворных бактерий в пластовых условиях (Боचेвер и др. 1979); последнее дает возможность говорить о достаточной санитарной защищенности водозабора от бытового загрязнения на участках поверхности, расположенных в областях питания водоносных горизонтов. Влияние бытовых стоков фиксируется по хлорид-иону.

В целом рассмотренный пример свидетельствует о возможности эксплуатации подземных вод в условиях высокой техногенной нагрузки на территорию, где происходит формирование их ресурсов. Основным фактором, способствующим улучшению («самоочищению») загрязненных вод в пластовых условиях, является процесс их разбавления чистыми природными водами.

Опыт продолжительной эксплуатации Вудьяврского месторождения подземных вод является уникальным и в свете иллюстрации особенностей формирования качества воды в условиях неоднородной гидрохимической зональности. Высокая чувствительность природных маркеров качества воды (в данном примере рН и концентрации ионов Al) к изменениям гидродинамических условий (в данном примере дебиту водоотбора) заслуживает специального модельного анализа.

Часть III

ЗАГРЯЗНЕНИЕ ПОДЗЕМНЫХ ВОД ПРИ ОСВОЕНИИ МЕСТОРОЖДЕНИЙ ТВЕРДЫХ ПОЛЕЗНЫХ ИСКОПАЕМЫХ И В РАЙОНАХ НЕФТЕДОБЫЧИ

В районах ведения горных работ, особенно открытым (наиболее дешевым) способом, прежде всего бросаются в глаза ландшафтные нарушения природной среды, которые по своим масштабам соизмеримы с последствиями природных катастроф. От 50 до 80 % всей горной массы, извлекаемой из карьеров и шахт, перемещается в отвалы и хвосто- и шламохранилища, занимающие большие территории зачастую весьма плодородных земель. Например, в России при добыче 1 млн т угля из шахт теряется 20—30 га земли, а из угольных разрезов — 115 га. Горные отвалы не только сокращают площади сельскохозяйственных угодий, но являются источниками различных загрязняющих веществ, которые развеиваются ветрами, повышая запыленность атмосферы, угнетающе действуют на растительность прилегающих территорий, загрязняют почвенный покров и поверхностные воды (Саркисов, 2009). Хранилища жидких отходов горно-обогачительного производства превращаются в источники загрязнения природных вод.

При подземной разработке месторождений с обрушением кровли формируются мощные зоны с нарушенной сплошностью массива горных пород, приводящие к просадочным явлениям и формированию специфических форм рельефа. Так, в районе горных выработок в Кузбассе образовались многочисленные цепи глубоких (до 30 м) провалов, тянущихся более чем на 50 км, общей площадью до 300 км² и объемом более 50 млн м³ (Саркисов, 2009). Влияние этих зон на режим подземных вод становится определяющим в постэксплуатационный период — на стадии ликвидации горного предприятия.

Наконец, а может быть, и в первую очередь, в большинстве случаев добыча полезных ископаемых невозможна без масштабных дренажных мероприятий, существенно влияющих на структуру водного баланса прилегающих регионов, а также качество природных вод.

Таким образом, геологическая деятельность человека может быть сопоставима по мощи с природными процессами, приводя к резкому ухудшению экологической обстановки на землях горного отвода и прилегающих к ним территориях, а само воздействие горнопромышленного производства на окружающую человека среду приобретает планетарный масштаб. Характер такого воздействия, в частности на качество поверхностных и подземных вод, определяется: видом и способом извлечения полезного ископаемого из недр, а также способом его обогащения (как правило, в местах горных разработок располагаются и горно-обоганительные комплексы — ГОКи); геологическим строением района и его гидрогеологическими условиями; типом коллекторов подземных вод и многими другими природными и техногенными факторами. В качестве примеров, иллюстрирующих специфику такого воздействия, в настоящем разделе рассматриваются процессы техногенеза, сопровождающие отработку железорудных, алмазосодержащих, апатит-нефелиновых и соляных месторождений.

В районах, где активно ведется добыча нефти, на первый план выходят проблемы засоления подземных вод рассолами, попутно (вместе с жидкими углеводородами) извлекаемыми из нефтяных коллекторов. Эти проблемы также рассматриваются в настоящем разделе.

Глава 8

АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПОДЗЕМНЫХ ВОД В ГОРНОДОБЫВАЮЩИХ РАЙОНАХ

С позиций воздействия на окружающую среду жизненный цикл горнодобывающего (горнопромышленного) предприятия включает не только этап его строительства и эксплуатации, но и «постэксплуатационный» период — ликвидацию горного производства. Продолжительность этого этапа на порядок больше и может достигать нескольких столетий (Рыбникова, Рыбников,

2018), а ущерб, наносимый природе от ликвидации карьеров и шахт, как это ни парадоксально, может быть сопоставим с ущербом в период их эксплуатации.

8.1. Эксплуатационный период

8.1.1. Влияние горного дренажа

Эксплуатация горнодобывающих предприятий обычно сопровождается дренажными мероприятиями (за исключением соляных месторождений, где должно быть исключено попадание воды в горные выработки и любые нарушения естественного гидродинамического режима вообще не желательны). Это нередко приводит к необратимым негативным явлениям регионального характера — истощению ресурсов и ухудшению качества подземных вод на больших площадях, прилежащих к карьерным и шахтным полям. Откачка больших объемов воды (сотни и тысячи кубических метров в час) вызывает формирование вокруг горных выработок депрессионных воронок радиусами в десятки километров. Таким образом, ухудшается водный баланс крупных территорий; водозаборы, попадающие в зону влияния дренажных работ, существенно снижают свою производительность либо выходят из строя; нарушаются условия питания открытых водоемов и водотоков; развиваются мощные зоны техногенной аэрации, что нарушает естественный влажностный режим почв и грунтов (Мироненко и др., 1980; 1988). Снижение уровня подземных вод приводит также к осушению почвенно-растительного слоя, ухудшению питания растительных сообществ, снижению бонитета лесных насаждений, осушению болот, занимающих важное место в биоценозах. Наконец, рост гидравлических градиентов в водоносных горизонтах приводит к многократному увеличению скоростей миграции химических компонентов, что увеличивает опасность загрязнения подземных вод.

Нарушения в гидродинамическом режиме выражаются: 1) в резком возрастании скоростей фильтрации; 2) в увеличении степени взаимосвязи поверхностных и подземных вод; 3) в появлении новых областей питания и разгрузки водоносных пластов; 4) в изменении интенсивности инфильтрационного питания подземных вод; 5) в усилении взаимосвязи между водоносными горизонтами посредством перетекания; 6) в обезвоживании верхних зон гидрогеологических структур, приводящем подчас к многократному увеличению мощности зоны аэрации.

Влияние горного дренажа получает максимальное развитие в закрытых артезианских структурах, где отмечается необратимое сокращение ресурсов подземных вод. При этом может происходить их перераспределение между отдельными водоносными комплексами — в зависимости от условий вскрытия последних горными или дренажными выработками, а также от проницаемости разделяющих пластов. Кардинальный характер такое перераспределение принимает на участках подземных разработок системами с обрушением кровли, где за счет техногенной трещиноватости над выработками образуется зона резко нарушенной сплошности «водоупоров».

Изменение гидродинамического баланса открытых водоносных структур локализуется, при прочих равных условиях, обычно на меньших площадях. Основную роль в такой локализации играют: 1) естественные водотоки и водоемы, претерпевающие инверсию, — из областей стока они превращаются в области питания; 2) инфильтрационное питание, интенсифицирующееся за счет нарушения рельефа, частичной ликвидации покровных отложений и понижения уровней грунтовых вод; 3) крупные технические водоемы, благодаря которым в ряде районов со временем формируется устойчивый воднобалансовый цикл; количество воды, откачиваемой дренажными системами, частично или даже полностью компенсируется фильтрацией из гидроотвалов, хвостохранилищ и т. п.

Отмеченные изменения в подземной гидродинамике во многом определяют возможность, масштабы и специфику загрязнения подземных вод: 1) интенсифицируется привнос загрязнений с поверхности, в первую очередь за счет фильтрационных потерь из бассейнов промстоков и поверхностных водотоков, содержащих загрязняющие компоненты; 2) из-за резкого роста скорости (как горизонтальной, так и субвертикальной) фильтрации подземных вод (в случае реализации масштабных дренажных мероприятий) они становятся активными транспортерами загрязнений; 3) негативные тенденции в динамике качества подземных вод усиливаются благодаря изменению характера и условий взаимосвязи водоносных горизонтов, содержащих воды различного качественного (в том числе некондиционного) состава; 4) отмечается активизация физико-химических процессов как в зоне аэрации (при региональном снижении уровней подземных вод), так и в глубоких зонах обводненного разреза (прежде всего за счет поступления вод иного состава).

В ряде горнодобывающих районов снижение напоров при дренажных работах, а также развитие техногенной трещинова-

тости над горными выработками способствует интенсификации процессов перетекания из смежных (обычно более глубоких) горизонтов вод с ухудшенными качественными характеристиками, отжатию минерализованных поровых растворов из слабопроницаемых слоев и блоков, перетоку некондиционных вод через незатампонированные скважины и пр.

Одновременно осушение водоносных горизонтов и сброс откачиваемых вод серьезно изменяют сложившееся в районе гидрохимическое равновесие, приводя, как правило, к заметному ухудшению качества подземных вод. Загрязнение подземных вод в районах разработки месторождений является достаточно характерным, часто — неизбежным следствием отвода, сброса и накопления в поверхностных бассейнах рудничных и технических вод, а также прямым результатом дренажа и водоотлива из горных выработок. Все это оборачивается серьезными экологическими сдвигами в природной обстановке или экономическими потерями, превращая горнодобывающие районы в наиболее «горячие» точки планеты с позиций охраны подземных вод от истощения и загрязнения (Мироненко и др., 1980; 1988). Глобальный характер проблемы подтверждается всей мировой практикой горных разработок.

8.1.2. Источники техногенного загрязнения подземных вод (общая характеристика)

Нарушение исходной гидрохимической обстановки обусловлено прежде всего накоплением в поверхностных техногенных бассейнах (хвосто- и шламохранилищах, прудах-отстойниках, гидроотвалах и т. п.) рудничных и технических вод, сопутствующих горному производству. В этом же направлении действует поступление загрязненных вод с поверхности, нарушенной горными и строительными работами (в частности, складированием отвалов), или из старых горных выработок, а также инфильтрация вод из загрязненных естественных водоемов и водотоков. Кроме того, загрязнение подземных вод может происходить и непосредственно через атмосферу в результате выброса в нее различных (в том числе и токсичных) продуктов деятельности горнопромышленных предприятий.

Откачиваемые дренажные воды часто используются в обогащательных циклах ГОКов, поэтому места их сброса и накопления превращаются в источники загрязнения подземных вод. В зависимости от типа полезного ископаемого и характера обо-

гатительной технологии ГОКов загрязнение может быть представлено довольно широким спектром компонентов.

Так, использование магнитной сепарации и коагулянтов для повышения эффективности осветления воды на некоторых железорудных горно-обогатительных предприятиях Курской магнитной аномалии (КМА), Кольского полуострова (Ковдорское железорудное месторождение), Восточной Сибири (Коршуновское железорудное месторождение) приводит к концентрированию в промстоках соединений группы азота (в основном нитратов — до нескольких десятков мг/л), сульфатов, ухудшению органолептических свойств воды и бактериологических показателей. Другой пример — отходы продуктов обогащения фосфоритовых руд Кингисеппского месторождения, также складываемые в хвостохранилищах (левый берег р. Луги). Жидкая часть пульпы представлена слабоминерализованной водой, содержащей гидрокарбонаты натрия (до 2—3 г/л), талловые мыла (до 0.75 мг/л), фториды (до 9 мг/л) и фосфаты (3—9 мг/л).

Наиболее серьезное влияние на качество подземных вод оказывают стоки горнохимических производств, связанные с добычей калийного сырья и его переработкой.

Сброс отработанных рассолов и шламов в больших количествах производится в соленакопители и шламохранилища. Солеотвалы (места накопления сухих отходов) — также неотъемлемая часть горнохимических производств. При переработке и обогащении сырья в калийной промышленности ежегодно образуются миллионы тонн твердых галитовых отходов и сотни тысяч тонн глинисто-солевых шламов. Так, на 1 т KCl, производимого из сильвинитовых руд, в виде отвала образуется 3—4 т галитовых отходов и 0.6 м³ глинисто-солевых шламов. Непрерывный рост объема складываемых отходов и глинисто-солевых шламов приводит к отчуждению больших территорий сельскохозяйственных площадей (Федяева, 2007). Утечки рассолов с минерализацией до 350 г/л из шламохранилищ и соленакопителей приводит к формированию обширных полей засоления подземных вод (гл. 10).

8.1.3. Шахтные воды

Подземные воды, попадающие на почву горных выработок и входящие в контакт с горнодобывающей техникой, подвергаются загрязнению. Формируется особый класс рудничных (карьерных, шахтных) вод, по своему составу (содержанию химических компонентов, окислительно-восстановительному потенциалу, кислотно-щелочной реакции) отличающихся от вод, содержащихся в породах, окружающих горную выработку. Откачка этих вод весьма негативно сказывается на окружающей среде.

Шахтные воды по определяющим их состав показателям разделяются на три характерных вида: нейтральные пресные ($\text{pH} = 6.5\text{—}8.5$, минерализация до 1 г/л); солоноватые и соленые с повышенной минерализацией ($\text{pH} = 6.5\text{—}8.8$, минерализация свыше 1 г/л); кислые (pH менее 6.5). Кислые шахтные воды имеют, как правило, повышенную минерализацию. Согласно имеющейся статистике (Долина, 2000), из общего объема шахтных вод около 50 % имеют минерализацию свыше 1 г/л, 10 % вод являются кислыми; в том числе с минерализацией более 3 г/л — 2.6 % и с минерализацией свыше 5 г/л — 6.0 %. Содержание взвешенных веществ в шахтных и карьерных водах колеблется в пределах от нескольких десятков до 1000 мг/дм; концентрация нефтепродуктов — от следов до 1 мг/дм и выше. В соответствии с законодательством такие воды не могут быть сброшены в водоемы без очистки и использованы для технического водоснабжения без соответствующей обработки. К сожалению, эти требования часто оказываются технически невыполнимыми, поскольку очистка сточных вод требует значительных капитальных затрат.

Например, в Кизеловском угольном бассейне (Западно-Уральская зона складчатости), экологическая ситуация, сложившаяся из-за значительных объемов шахтных вод (эксплуатационный и постэксплуатационный периоды), является одной из наиболее острых в России (Максимович и др., 2006; см. также разд. 8.2). В период эксплуатации шахты ежегодно сбрасывали в реки практически без очистки около 100 млн м³ загрязненных шахтных вод, содержащих большое количество сульфатов, железа, алюминия. Средний суммарный водоприток в шахты в период их работы составлял 12—14 тыс. м³/ч, что позволяло отнести шахты Кизеловского бассейна к категории весьма обводненных. Главную роль в формировании шахтных водопритоков играли карстовые воды визейского водоносного комплекса, которые поступали в горные выработки по техногенным трещинам, из зон крупных тектонических нарушений, по выработкам, вскрывшим водоносные горизонты.

Химический состав шахтных вод зависит в основном от гидродинамических условий, содержания в угленосной формации серы, карбонатов и рассеянных элементов. Если содержание серы в углях превышает 4 %, то в результате окисления сульфидов вода приобретает кислую реакцию ($\text{pH} = 2\text{—}3$) и сульфатный состав. Трещинно-карстовые воды карбонатных пород, обладающие высоким окислительным потенциалом, нейтральной средой ($\text{pH} = 7.3\text{—}7.5$), гидрокарбонатно-кальциевым составом и минерализацией 0.06—1.5 г/л, взаимодействуют в шахтах с богатыми серой угленосными породами и преобразуются в сульфатные железисто-алюминиевые натриево-кальциевые воды с минерализацией 2.5—19 г/л. В ходе эксплуатации она возрастает до 35 г/л.

Для кислых шахтных вод характерны высокие содержания цинка, никеля, меди, свинца, марганца, кобальта, стронция и других микроэлементов.

Постоянный и интенсивный сток шахтных вод привел к тому, что химический состав рек в период эксплуатации шахт приблизился к химическому составу шахтных вод. Малые реки до впадения в них шахтных вод имели $\text{HCO}_3\text{-Ca-Na}$ гидрохимическую фацию, минерализацию 90—150 мг/л и близкую к нейтральной реакцию среды. Ниже по течению стока шахтных вод они приобретают сульфатный железисто-алюминиевый состав при минерализации от 640 до 6000 мг/л. Содержание сульфатов составляет от 1000 до 3700, железа — от 70 до 900, алюминия — от 11 до 160 мг/л при pH 2.5—2.9 (Максимович и др., 2006).

Воды в горных выработках могут быть также подвержены засолению за счет смешения с солеными водами, подтягивающимися к контурам дренажа из глубоких частей разреза (гл. 11). Нередко рудные тела находятся в горизонтах, исходно содержащих соленые воды, извлечение которых на поверхность создает большие экологические проблемы.

8.1.4. Горные отвалы

Источниками загрязнения природных вод в ряде случаев становятся горные отвалы. Характерные примеры формирования качества поверхностных и дренажных вод в зоне влияния такого рода источников загрязнения окружающей среды приведены в следующей главе.

В целом гидрохимическая обстановка в районах горных разработок обычно меняется к худшему, однако зачастую существует и ряд природных факторов, сдерживающих прогрессивное загрязнение водоносных горизонтов, что обеспечивает нормальные условия водоснабжения без проведения дорогостоящих водоохраных мероприятий.

Необходимость увязки инженерных решений с требованиями охраны среды предполагает обоснование эффективности водоохраных (как активного, так и контрольно-профилактического характера) и контрольных мероприятий, служащих основой для управления качеством подземных вод в горнодобывающих районах.

8.2. Постэксплуатационный период

Во второй половине XX века, особенно в его последнюю декаду, мы стали свидетелями массовой ликвидации и закрытия горных предприятий, в большей степени в угольной отрасли. Если исключить из рассмотрения рекультивацию земель, то

наиболее значимой в общей проблеме ликвидации горнодобывающих предприятий является так называемая мокрая консервация рудников и шахт — их затопление. Это мероприятие широко практикуется на всех континентах и имеет в каждом конкретном случае свою гидрогеологическую специфику (Wolkersdorfer, 2008).

В США, Канаде, Германии, Франции и других странах насчитываются десятки тысяч крупномасштабных объектов завершённой добычи. В России наиболее масштабные мероприятия по выводу из эксплуатации горнодобывающих комплексов связаны с реструктуризацией угольной промышленности, которая началась в 1994 г. За первые пятнадцать лет реформирования отрасли ликвидировано более 200 угледобывающих предприятий (шахт и разрезов) в более чем 20 российских регионах и во многих десятках шахтерских городах и поселках. Ликвидации подлежали преимущественно шахты и разрезы небольшой производственной мощности, с длительным сроком службы, с неблагоприятными горно-геологическими условиями и неблагоприятные с экологической точки зрения.

Основными способами консервации (ликвидации) шахт являются «мокрый», проводимый путем полного затопления до отметок самоизлива, и комбинированный, когда уровень воды в ликвидируемой шахте поддерживается на определенной отметке, определяемой в основном условиями исключения перетоков на соседние действующие шахты (Быкадоров и др., 2015).

Многолетняя горнодобывающая деятельность приводит к тому, что в пределах горных отводов предприятий происходят зачастую необратимые изменения природного состояния геологической среды: гидрогеологических и геохимических условий, напряженно-деформированного состояния массивов. Как следствие, появляются новые источники глубинного загрязнения подземных вод, изменяется структура проницаемости массивов, увеличивается глубина зоны активного водообмена, снижается естественная защищенность подземных вод, активизируются экзогенные инженерно-геологические процессы.

Затопление горных выработок и последующее заполнение осушенного пространства подземными водами приводят к формированию новых техногенных очагов их разгрузки на поверхности в виде родников, водоемов, зон подтопления и заболачивания. Они могут содержать минерализованные кислые воды с высоким содержанием тяжелых металлов. Ежегодно подземные воды выносят в окружающую среду значительное количество загрязняющих, в том числе токсичных элементов и их соедине-

ний. Существует опасность радиационного загрязнения поверхностных и подземных вод. Так, на отработанных угольных месторождениях, где окислительная среда способствует интенсивному переходу в воду U-238 и Ra-226, из угольных пластов в подземные воды происходит эманация Rn-222 (Удалов, Кононенко, 2016). В этой работе отмечаются случаи фиксации Rn-222 в подземных водах водозаборов, находящихся в зоне влияния ликвидированных угольных шахт.

В целом экологические последствия производственной деятельности шахт оказываются трудно устранимыми на протяжении длительного периода времени (десятки и даже сотни лет).

Последствия «мокрой» консервации шахт хорошо известны благодаря как зарубежному (Wolkersdorfer, 2008), так и российскому опыту (Агапов, Семикобыла, 2006; Елохина, Арзамасцев, 2007; Рыбникова, Рыбников, 2013; Елохина, 2013; Грязнов, Елохина, 2017). Ниже рассматриваются характерные примеры, иллюстрирующие особенности постэксплуатационного периода в нескольких горнопромышленных регионах. Основное внимание уделено анализу воздействия затопленных выработок, где формируются шахтные и рудничные воды «второй генерации», на поверхностные воды и подземные воды. По сравнению с условиями активного дренажа месторождений в эксплуатационный период распределение этих вод в массиве и выход на поверхность носят менее контролируемый характер.

8.2.1. Медноколчеданные рудники Среднего Урала

В последние десятилетия в связи с истощением запасов ряда месторождений и изменением экономической конъюнктуры на Урале произошло закрытие многих рудников, в том числе наиболее опасных с экологической точки зрения — медноколчеданных. При этом в большинстве случаев горнодобывающие объекты (карьеры, шахты) просто затапливались. Наиболее изученными объектами являлись Левихинское и Дегтярское медноколчеданные месторождения (Средний Урал), где коллекторами подземных вод являются зоны трещиноватости палеозойских пород. Формирование химического состава шахтных вод происходило под влиянием активного окисления сульфидов и сернокислотного выщелачивания рудовмещающих пород. На колчеданных месторождениях окисление рудной минерализации активно протекает также в пределах породных отвалов. Активизация такого рода геохимических процессов приводит к загрязнению поверхностных и подземных вод, в том числе на водозаборах.

Левихинское медноколчеданное месторождение (бассейн реки Тагил), разрабатывалось с 1927 по 2003 г. На этапе его подземной отработки

в пределах шахтного поля образовались обширные зоны сдвижения и обрушения пород общей протяженностью около 4 км при ширине от 200 до 500 м с воронкообразными провалами глубиной до 30 м (Рыбникова, Рыбников, 2018). При отработке месторождения величина водоотлива варьировала от 120 до 240 м³/ч. После прекращения водоотлива в 2003 г. произошло затопление горных выработок и начался подъем уровня подземных вод. В результате развития процессов окисления сульфидов и сернокислотного выщелачивания пород на глубоких горизонтах в зоне затрудненного водообмена шахтные воды приобретали сульфатно-натриевый состав при pH = 2.35—2.5, высокой минерализации (до 36 г/л), обогащались сульфатами, Cu, Zn, Fe, Mn, редкоземельными элементами (Грязнов, Елохина, 2017). Начиная с апреля 2007 г. шахтная вода стала разгружаться на поверхность в самой низкой точке зоны обрушения в районе шахты Левиха-II (Рыбникова, Рыбников, 2013; 2018). Здесь в провале (зоне обрушения) сформировался техногенный водоем глубиной порядка 20 м с выходом кислых (pH = 3.5, минерализация до 50 г/дм³) подземных вод на поверхность с расходом 100—120 м³/ч.

Обводненность рудников *Дегтярского медноколчеданного месторождения* в период 1948—1989 гг. характеризовалась среднемесячными водопритоками в диапазоне 170—530 м³/ч. Химический состав шахтных вод формировался под влиянием активного окисления сульфидов и сернокислотного выщелачивания рудовмещающих пород. Дренажные воды рудника относились к сульфатным магниево-кальциево-железистым, кислым и ультракислым, солоноватым. Минерализация в шахтах «Капитальная-1» и «Капитальная-2» варьировала по средним значениям 2.8—7.8 г/л при изменении сухого остатка 3.3—8.5 г/л, pH = 2.5—3.6 и содержании взвешенных частиц 52—467 мг/л (Грязнов, Елохина, 2017). Горные работы на руднике были остановлены в 1995 г. на глубине 610 м. После полного затопления выработанного пространства в 1999 г. химический состав рудничных вод на самоизливе оказался сопоставим с составом дренажного стока. Однако через 14 лет установлено снижение концентраций химических компонентов на выходе рудничных вод на поверхность (Грязнов, Елохина, 2017).

Наблюдения за динамикой реабилитационного периода показывают, что заполнение водой горных выработок и депрессионной воронки продолжается 2—4 года (заполнение карьеров — более продолжительный характер). Зоны подтопления формируются десятки лет.

8.2.2. Кузбасс

Программой реструктуризации угольной отрасли было предусмотрено ликвидировать 43 шахты, а также угольный разрез. Проектами предусмотрена ликвидация примерно равного количества шахт с полным затоплением (затопление до излива подземных вод в водотоки на поверхности); с искусственным понижением уровня затопления погружными насосными агрегатами; с подтоплением до отметок перетока подземных вод в горные работы смежных действующих шахт (Сидоров и др., 2014).

На всех ликвидируемых шахтах наблюдались большие колебания скорости их затопления: средние значения менялись для различных шахт от 3 до 11 м/мес; максимальные скорости в начальный период достигали 45—60 м/мес (Быкадоров и др., 2015).

Если при работе шахт отмечались, как правило, лишь локальные очаги загрязнения подземных вод за счет фильтрации через русла рек откачиваемых на земную поверхность шахтных вод, то после ликвидации шахтного водоотлива и поднятия уровня затопления, загрязненные шахтные воды проникают в подземные водоносные горизонты на большой площади (Лудзиш, 2010). Затопление шахт привело также к подтоплению фундаментов зданий и сооружений, к переувлажнению массива горных пород, которое вызывает ухудшение их прочностных свойств, разуплотнению пород.

Состав подземных вод, которые впоследствии выходят на дневную поверхность, формируется в специфичном для каждой шахты районе, со своим промышленным узлом предприятий на территории границ горного отвода. Санитарные нормы качества при сбросе шахтных вод из ликвидируемых шахт в водоемы часто значительно превышают ПДК (Лудзиш, 2010). Средние многолетние концентрации взвешенных веществ, по данным, превышают санитарные нормы по всем шахтам в 1.4—7.8 раз. Содержание тяжелых металлов в сточных водах на всех шахтах, за несколькими исключениями, превышает ПДК в 1.4—2.7 раза. Железо регистрируется в водах всех шахт в интервале (по многолетним данным) от 0.11 до 4.4 мг/л. Сероводородное загрязнение также характерно для сточных вод ликвидируемых шахт.

8.2.3. Кизеловский каменноугольный бассейн

Кизеловский бассейн (Западно-Уральская зона складчатости) эксплуатировался более 200 лет, с 1797 по 2000 г. Гидрогеологические условия бассейна определяются пластово-трещинными водами терригенных пород угленосной толщи и карстовыми водами надугольной и подугольной толщ известняков. Угли высокозольные (28—31 %). Содержание серы в среднем составляло 5.5 %. На пиритную серу приходилось 59 %, органическую — 40 %, сульфатную — 1 %. Шахты отличались высокой обводненностью и большими объемами кислых шахтных вод, негативно влияющих на природу Уральского края. В период эксплуатации угледобывающих предприятий суммарный водоприток превышал 60 тыс. м³/сут. Минерализация колебалась от 1810 до 10247 мг/л при концентрации SO_4^{2-} 1498—7950 мг/л, pH = 2.3—2.7 и широком геохимическом спектре с преобладанием редкометалльно-редкоземельной промышленной специализации, а также высокими концентрациями Fe, Co, Mn, Ni. Дренажные воды Кизеловского бассейна не осваивались промышленностью. Они сбрасывались в малые реки бассейна р. Камы, загрязняя их экологически опасными компонентами (Грязнов, Елохина, 2017).

Закрытие шахт повлекло большие изменения режима подземных и шахтных вод, связанные с образованием техногенных горизонтов и вос-

становлением уровней подземных вод. Наиболее сложной для исследования является ситуация, когда шахтные воды разгружаются не на поверхность, а в горизонты подземных вод. Шахтные и загрязненные ими подземные воды содержат низкие значения pH, повышенную минерализацию, высокое содержание загрязняющих веществ, таких как железо, алюминий и ряд других микрокомпонентов. Ионы железа являются наиболее характерным показателем загрязнения, так как их концентрация в кислых водах коррелирует с содержанием сульфатов и минерализацией этих вод. Данный элемент оказывает наибольшее негативное влияние на гидросферу, так как его концентрация в рассматриваемых подземных и шахтных водах зачастую превышает ПДК для питьевых вод и водных объектов рыбохозяйственного значения в тысячи раз. Также в результате разгрузки шахтных вод в подземные водоносные горизонты происходит загрязнение этих горизонтов, при котором уничтожается травяная растительность, происходит гибель древесных лесных культур и деградация почв (Имайкин, Имайкин, 2013).

8.2.4. Восточный Донбасс (Гавришин и др., 2003; Гавришин, Корадини, 2009; Панова, 2013)

Угольные месторождения расположены в северо-западной части Ростовской области и прилегающих районах Украины (восток Луганской области). Добыча угля подземным способом началась с конца XVIII в. При реструктуризации угольной отрасли в 90-х гг. XX в. количество действующих шахт Восточного Донбасса сократилось с 64 до 13.

В процессе эксплуатации шахт на поверхность откачивались значительные объемы шахтных минерализованных вод, обогащенные продуктами окисления серы и сульфидных минералов пород. Выделяется несколько гидрохимических типов шахтных вод: 1) кислые сульфатные шахтные воды, значения pH опускается до 2,2, содержание SO_4^{2-} возрастает до 4,0—4,5, а минерализация — до 10—11 г/л; воды содержат в значительных концентрациях Fe, Mn, Al, Cu и другие металлы; 2) хлоридно-сульфатные шахтные воды, происхождение которых связано как с процессами окисления серы, так и с притоком хлоридных подземных вод при углублении горных выработок; 3) сульфатно-хлоридные шахтные воды, формирующиеся за счет преобладающего притока хлоридных подземных вод на глубоких горизонтах отработки угольных пластов. Встречаются также содовые шахтные воды с повышенным содержанием иона HCO_3^- и очень низкими — Ca и Mg, что объясняется притоком в шахты содовых подземных вод, которые связаны с испарительно-конденсационными процессами.

Типичной шахтой, в которой формировались умеренно кислые сульфатные воды с относительно небольшой минерализацией (первый тип), является ш. Комиссаровская. Разработка пласта велась системами с обрушением кровли и оставлением угольных целиков в выработанном пространстве. Глубина этажной отработки составляла от 30 до 470 м. Ликвидация шахты мокрым способом, путем затопления выработанного пространства, начата в 1996 г. Шахта затоплена практически полностью

через 3.5 года. В 2000—2001 гг. затопленные выработки начали дренироваться самоизливающимися скважинами (для предотвращения подтопления близ расположенных населенных пунктов).

Постепенное заполнение подземными водами природно-техногенного резервуара (выработанного и осушенного водоотливом пространства) и его дренирование привели к тому, что из скважин стали вытекать воды аномально высокой минерализации (10—17 г/л), с очень большими содержаниями сульфат-иона (6—11 г/л), железа, марганца, алюминия и других компонентов. Такая ситуация явилась следствием развития процессов интенсивного окисления сульфидов и растворения ранее накопившихся в зоне выветривания сульфатов. Эти воды стали мощным источником загрязнения природных вод — поверхностных (р. Лихая) и подземных (многих колодцев и скважин в домах населенных пунктов).

8.2.5. Районы добычи урановой руды

Обеспечение радиационной безопасности на территориях, подверженных воздействию производств по добыче и переработке природного урана, является важной задачей с точки зрения охраны окружающей среды и здоровья населения. С точки зрения потенциальной опасности для населения и окружающей среды наиболее критическими объектами являются хвостохранилища и места приповерхностного захоронения отходов уранодобывающей отрасли.

Интенсивная разработка урановых месторождений на территории четырех республик бывшего СССР (Республика Казахстан, Кыргызская Республика, Российская Федерация, Республика Таджикистан) была начата в конце 40-х—начале 50-х гг. XX в. За время деятельности предприятий урановой промышленности на территориях этих государств накопилось значительное количество отходов, содержащих повышенные концентрации естественных радионуклидов уран-ториевого ряда, обращение с которыми, включая вопросы безопасного длительного хранения или захоронения, а также рекультивации мест размещения отходов, является сложной и ресурсоемкой задачей.

Площадь радиационно загрязненных земель под объектами урановых производств составляет около 80 кв. км, ориентировочная площадь воздействия за счет выноса радионуклидов в окружающую среду — более 200 кв. км. Площадь нарушенных земель по государствам составляет (в кв. км): Республика Казахстан — 51.7, Кыргызская Республика — 6.5, Российская Федерация — 16, Республика Таджикистан — 3 (Межгосударственная целевая программа... 2015).

8.2.5.1. Характеристика радиационного воздействия

Обычно опасность мест складирования вскрышных пород и отходов обогащения, накапливаемых в хвостохранилищах, оценивается в дозах излучения, а также их мощности.

Основные дозиметрические величины

Величина	Единица СИ	Внесистемная единица	Соотношение
Экспозиционная доза	Кл/кг	рентген	1 Р = $2,58 \cdot 10^{-4}$ Кл/кг
Поглощенная доза	грей (Дж/кг)	рад	1 Гр = 100 Рад 1 Рад = 1.14 Р
Эквивалентная доза	зиверт	бэр	1 Зв = 100 бэр
Мощность экспозиционной дозы	А/кг	Р/с, Р/ч	1 Р/с = $2,6 \cdot 10^{-4}$ А/кг 1 Р/ч = $7,2 \cdot 10^{-8}$ А/кг

Доза излучения — в физике и радиобиологии величина, используемая для оценки воздействия ионизирующего излучения на любые вещества и живые организмы. Различают следующие количественные характеристики ионизирующего излучения: экспозиционная, поглощенная, эквивалентная дозы облучения и ряд других. *Экспозиционная доза* определяет ионизирующую способность рентгеновских и гамма-лучей и выражает энергию излучения, преобразованную в кинетическую энергию заряженных частиц в единице массы атмосферного воздуха. Экспозиционная доза — это отношение суммарного заряда всех ионов одного знака в элементарном объеме воздуха к массе воздуха в этом объеме. *Поглощенная доза* показывает, какое количество энергии излучения поглощено в единице массы любого облучаемого вещества и определяется отношением поглощенной энергии ионизирующего излучения на массу вещества. *Эквивалентная доза* рассчитывается путем умножения значения поглощенной дозы на специальный коэффициент — коэффициент относительной биологической эффективности (ОБЭ) или коэффициент качества. *Мощность дозы* (интенсивность облучения) — приращение соответствующей дозы под воздействием данного излучения за единицу времени.

В таблице представлены основные дозиметрические величины и их единицы измерений.

В данном контексте для последующего сравнения приводятся радиологические последствия события 1986 г. — аварии на Чернобыльской АЭС. Разрушение 26 апреля 1986 г. четвертого энергоблока Чернобыльской АЭС, расположенной на территории Украинской ССР (ныне — Украина), носило взрывной характер, реактор был полностью разрушен, и в окружающую среду было выброшено большое количество радиоактивных веществ. Авария расценивается как крупнейшая в своем роде за всю историю атомной энергетики. В первые дни после аварии (28—30 апреля 1986 г.) в самых загрязненных местах (Припять) мощность дозы достигала 1 370 000 мкР/ч. В соседних районах (Киев, Гомель, Брянск) — 600—2200 мкР/ч. В странах Западной Европы — 1400—2500 мкР/ч.

Допустимые дозы облучения для человека. Для человека воздействие на уровне нескольких миллизиверт является слишком слабым, чтобы организм мог на него как-то отреагировать. При дозах менее 100 мЗв какие-либо медицинские последствия радиационного воздействия не выявлены (см. таблицу). При этом подразумевается, что такие дозы получены

не в течение всей жизни, а за один раз или за сравнительно короткое время (например, за год) и плюс к тому, что человек получает от природного воздействия.

Человеку в обычной жизни невозможно получить дозы облучения, намного превышающие фоновые. Например, чтобы получить дозу в 100 мЗв, нужно полгода находиться в условиях радиационного фона в 2500 мкР/ч — это выше значений фона в 250 раз (при обычном фоне в 10 мкР/ч дозу в 100 мЗв придется получать в течение 120 лет). Годовая доза от просмотра телевизора по 3 часа в день составляет 0.001 мЗв. Годовая доза от проживания рядом с АЭС — 0.01 мЗв. Разовая флюорография — 0.6 мЗв (Чернобыльская радиация в вопросах и ответах, 2005).

Допустимые мощности дозы облучения мест складирования вскрышных пород и отходов обогащения, накапливаемых в хвостохранилищах. Средняя по всей площади рекультивированного участка мощность дозы внешнего гамма-излучения на высоте 1 м над поверхностью почвы не должна превышать 20 мкР/ч сверх уровня естественного фона, характерного для данной местности (естественный фон для данной местности определен проектом на уровне 30 мкР/ч), в отдельных локальных точках (не более 20 %) — не выше 60 мкР/ч. Средняя по площади мощность дозы гамма-излучения над поверхностью захороненного хвостохранилища на высоте 1 м не должна превышать 100 мкР/ч. Эксхалация радона из почвы не должна превышать $1 \text{ Бк/м}^2 \cdot \text{с}$.

8.2.5.2. Примеры оценки состояния окружающей среды в районах расположения уранодобывающих предприятий

Кыргызская Республика

Мин-Куш (хвостохранилище «Туюк-Су»). Хвостохранилище «Туюк-Су» расположено в русле одноименной реки. Общий объем намывных хвостов — 450 тыс. куб. м, площадь — 3.2 га. По результатам радиометрической съемки мощность экспозиционной дозы на поверхности хвостохранилища — 25—35 мкР/ч, локально — до 150 мкР/ч, суммарная активность в захороненном хвостовом материале — $5.8 \cdot 10^{13}$ Бк.

Ситуация, сложившаяся в районе хвостохранилища «Туюк-Су», по сравнению с другими объектами является наиболее опасной. На правом борту долины р. Туюк-Су, приблизительно в 300 м ниже хвостохранилища, находится оползень в стадии (на момент обследования 2015 г.) активизации. Вследствие того что часть железобетонных конструкций обводного канала разрушена, произошла неравномерная осадка поверхности хвостохранилища и образовались локальные замкнутые повреждения, не обеспечивающие сток поверхностных вод, защитное покрытие местами нарушено раскопками, ограждения и запрещающие знаки разрушены. Хвостохранилище расположено в зоне, подверженной селям (Межгосударственная целевая программа... 2015).

Каджу-Сай. Хвостохранилище на месторождении «Джилское» эксплуатировалось в период с 1952 по 1966 г. Объем накопленных материалов составил около 150 тыс. куб. м, площадь хвостохранилища — 1.1 га.

Здесь же захоранивались загрязненные грунты, снятые в ходе дезактивации территории закрывающегося предприятия, а также демонтированное радиоактивное оборудование рудника (Межгосударственная целевая программа... 2015).

Общая активность захороненных отходов оценивается в $1,9 \cdot 10^{13}$ Бк. В 60-х гг. XX в. поверхность объекта была закрыта слоем инертного грунта. В последующие годы предпринимались усилия по защите объекта от водной и ветровой эрозии и поддержанию хвостохранилища в безопасном состоянии. По результатам съемочных работ установлено, что контуры хвостохранилища вписываются в изолинии МЭД 25—35 мкР/ч (средний гамма-фон 22—23 мкР/ч). Выделено несколько локальных участков загрязнений с мощностью дозы до 1 500 мкР/ч, образовавшихся в основном в результате раскопок территории местным населением (Межгосударственная целевая программа... 2015).

Республика Таджикистан

Табошар. На территории промплощадки около г. Табошар сосредоточены отвалы горных пород, содержащие сверхнормативные количества радионуклидов, а на хвостохранилищах находятся радиоактивные отходы первичного гидрометаллургического передела урановых руд. На территории площадки размещены 4 карты хвостохранилища, хвостохранилище цеха № 3, хранилище бедных руд, карьер и отвалы пустой породы (Межгосударственная целевая программа... 2015).

В 1973—1975 гг. 4 карты были законсервированы — поверхность и откосы карт засыпаны слоем грунта мощностью до 1 м. Особую опасность представляют нерекультивированные терриконообразные отвалы хвостохранилища цеха № 3 и кучного выщелачивания высотой до 70 м и площадью около 3 га. Объем накопленного материала — 690 тыс. куб. м (Межгосударственная целевая программа... 2015). Поверхность и склоны хвостохранилища не защищены от ветровой и водной эрозии, вследствие чего происходит механическая миграция загрязненного мелкодисперсного хвостового материала. Кроме того, через территорию хвостохранилищ несанкционированно проложены грунтовые дороги, пасется скот, а к северо-западной части хвостохранилища IV очереди непосредственно примыкает частная жилая застройка.

По данным обследования в апреле 2007 г., максимальное значение мощности гамма-излучения на территории около отвала составляет 181 мкР/ч (природный фон — 20—30 мкР/ч). На самих хвостовых отвалах мощность экспозиционной дозы внешнего гамма-излучения (МЭД) достигает значений около 325 мкР/ч. Ранее выполненные исследования (2001 г.) фиксировали на отвале значения МЭД гамма-фона до 1000 мкР/ч. Особую озабоченность вызывают нарушения барьеров, вызванные природными воздействиями (селевые потоки, оползни, эрозия), а также несанкционированное воздействие и вмешательство человека (Межгосударственная целевая программа... 2015).

Российская Федерация

Сокращение уранодобывающего производства вызывает необходимость консервации, ликвидации и репрофилирования тех горнодобыва-

ющих предприятий, деятельность которых экономически неэффективна или экологически небезопасна и сопровождается передачей территорий промышленных зон, зданий и сооружений местным органам для их дальнейшего использования. При этом важное значение приобретают вопросы охраны окружающей среды, обеспечения максимальной радиационной безопасности персонала и населения.

Лермонтовский урановый рудник № 1. Объект расположен на юге Ставропольского края. Лермонтовское производственное объединение (ЛПО) «Алмаз» начало свою деятельность в 1950 г. как рудодобывающее, а с 1954 г. — как рудоперерабатывающее предприятие. В ходе производственной деятельности осуществлялась добыча урановых руд и их переработка в закись-окись урана (Карпенко, 2010).

В сферу деятельности ЛПО «Алмаз» входили два рудника с подземной разработкой (шахты и штольни): рудник № 1 (гора Бештау), расположенный в 4 км к северу, и рудник № 2 (гора Бык), расположенный в 15 км к северо-западу от г. Лермонтов. Рудоперерабатывающим объектом являлся Гидрометаллургический завод (ГМЗ), на котором с 1954 г. перерабатывались руды рудников № 1 и № 2, а с 1974 г. до 1991 гг. также и привозные урановые руды (Карпенко, 2010).

При эксплуатации рудников образовались отвалы забалансовых руд и загрязненных пород, расположенных на территории площадью 36 га на руднике № 1 (Бештау), 18.4 га на руднике № 2 (Бык) и отходы гидрометаллургического завода в открытом хвостохранилище площадью 79.7 га. Общий объем накопленных отходов составляет около 18.8 млн т, из которых на хвостохранилище 14.1 млн т и на отвалах рудников 4 млн т. Общая площадь загрязненных территорий составляет 167 га.

Месторождение урановой руды Бештау (рудник № 1) действовало с 1950 г. по 1975 г., а к 1977 г. были выполнены работы по его ликвидации и рекультивации отвалов. В 1993—1996 гг. были проведены дополнительные действия по исправлению техногенных нарушений и ремонт ранее рекультивированных отвалов. На руднике № 2 (гора Бык) добыча урановой руды производилась в 1956—1990 гг. Отвалы добычи руд на г. Бык бывшего ЛПО «Алмаз» сверху покрыты плодородным слоем почвы толщиной 15 см. Работы по рекультивации отвалов рудника № 2 проводились в период 1977—1999 гг. (Карпенко, 2010).

Вредное воздействие на окружающую среду обусловлено потоком ^{222}Rn в атмосферу с отвалов рудников и особенно из хвостохранилища. Уровни эксхалиции (выделения) радона из грунта в 10—100 и более раз превышают среднемировые показатели и являются основным источником поступления радона в помещения города Лермонтов. Средневзвешенная равновесная концентрация радона в воздухе города составляет от 32 до 55 Бк/куб. м, что в 5—30 раз превышает среднемировые уровни. Средневзвешенная равновесная концентрация радона в жилых помещениях составляет 259 Бк/куб. м, что выше нормативов (Ворушилов, Ем, 2008).

Средний уровень эксхалиции радона в городской черте составляет 250 мБк/кв. м/с, максимальные уровни эксхалиции радона — более 4500 мБк/кв. м/с при среднемировом уровне — 18 мБк/кв. м/с. Средние и максимальные значения ЭЭД (эффективная эквивалентная доза) облуче-

ния населения города только за счет радона по результатам более 4000 замеров составляют соответственно 12—70 м³/год, при допустимом пределе 1 м³/год от всех источников (закон «О радиационной безопасности Российской Федерации»). Радиационно-экологической гамма-съёмкой, проведенной в 2005 г., выявлено около 80 аномальных объектов радиоактивного загрязнения с МЭД (мощность экспозиционной дозы) гамма-излучения от 60 мкР/ч до 16 000 мкР/ч (Ворушилов, Ем, 2008).

Приаргунское производственное горно-химическое объединение (ПАО «ППГХО») — крупное уранодобывающее предприятие России. Предприятие образовано в 1968 г. Добыча урана ведется только подземным способом. Переработка руды осуществляется на гидрометаллургическом заводе и площадках кучного выщелачивания. Готовой продукцией является закись-окись урана.

Основными производственными объектами в составе объединения являются урановые рудники, гидрометаллургический завод с сернокислотным цехом и площадкой кучного выщелачивания, бурогольный разрез, добывающий уголь для собственных нужд и реализации сторонним потребителям, и теплоэлектроцентраль, обеспечивающая производство и город теплом и электроэнергией.

ПАО «ППГХО» является градообразующим промышленным предприятием. Общая численность населения города Краснокаменска составляет 54 тысячи человек. Город расположен в равнинной части пади Сухой Урулюнгуи, имеет наиболее благоприятную в санитарном отношении розу ветров с господствующими ветрами западных румбов. Они исключают превышение норм вредных промышленных веществ в атмосферном воздухе города.

По состоянию на начало 2016 г. в ПАО «ППГХО» имелось около 2700 га нарушенных земель. В основном это земли, занятые горными объектами (карьерами, шахтами), отвалами и хвостохранилищами. В санитарно-защитной зоне на площади 125 тыс. м² мощность дозы гамма-излучения не превышает 0.5 мкГр/ч, на площади 4202 тыс. м² — колеблется от 0.5 до 2.0 мкГр/ч. В зоне наблюдения (42 га) мощность дозы находится на уровне 0.5—2.0 мкГр/ч (Отчет по экологической безопасности ПАО «ППГХО», 2016 г.).

Глава 9

АНАЛИЗ УСЛОВИЙ И ПРОГНОЗ МИГРАЦИИ ПРЕСНЫХ ЗАГРЯЗНЕННЫХ ВОД ОТ ХВОСТОХРАНИЛИЩ ГОКов И ГОРНЫХ ОТВАЛОВ

Хвостохранилища, являясь неотъемлемой частью большинства горно-обогатительных комбинатов (ГОКов), представляют собой обширные природные депрессии (овраго-балочная сеть, перегороженные долины небольших речек и т. п.), заполненные

жидкой хвостовой пульпой (смесью мелко измельченной горной массы с водой или водным раствором — хвостами флотации) — остаточным продуктом обогащения полезного ископаемого. Чаще всего вода хвостохранилищ используется в системе оборотного водоснабжения, т. е. после осветления повторно участвует в обогатительном цикле, что способствует накоплению в ней загрязняющих компонентов. Несмотря на экранирование ложа хвостохранилищ, из них обычно наблюдаются значительные по объему утечки технической воды, поступление которой в водоносные горизонты приводит к загрязнению подземных вод.

Отвалы вскрышных пород, сопутствующие горному производству, также могут являться мощным источником техногенного загрязнения природных вод.

9.1. Хвостохранилища

9.1.1. Особенности гидрогеологических прогнозов

Фильтрация загрязненных вод («промстоков») из бассейна (хвостохранилища ГОК) через глинистые экранирующие отложения приводит к образованию куполов растекания в водоносном комплексе. Интенсивность перемещения промстоков к ближайшим контурам разгрузки (дренажным системам карьеров или водозаборах хозяйственного назначения, расположенным на удаленностях) контролируется преимущественно градиентами этого техногенного планового потока, а поперечное (гидродисперсионное) рассеяние носит подчиненное значение.

Данная задача, имеющая дело с гидродинамически активными источниками загрязнения (расход источника доминирует над расчетным расходом естественного потока), может быть рассмотрена как в плановой 1D/2D постановке (расчеты по линиям/лентам тока), так и в профильной 2D постановке. Как правило, такое «расщепление» задачи оказывается необходимым для повышения степени детализации геомиграционного процесса.

Имеются в виду прогнозные задачи, когда фильтрационные свойства водоносных пород считаются изученными, а граничные условия однозначно определены, как и интенсивность потерь воды их поверхностных бассейнов и дебиты дренажных/водозаборных систем. Результат может быть получен, например, с помощью графоаналитического метода (см. разд. 5.1) или замкнутых аналитических решений, описывающих траекто-

рии движения частиц воды и положение зон захвата потока дренажными/водозаборными сооружениями, а также пространственное (x, y) положение фронта вытеснения пластовой воды загрязненным раствором на различные моменты времени.

1. Замкнутые аналитические решения. В идеализированных условиях (однородный по фильтрационным свойствам водоносный горизонт, простые граничные условия, заданная конфигурация источников фильтрационных возмущений, сводящихся к упрощенным геометрическим фигурам, постоянные во времени интенсивность водоотбора и фильтрационных потерь) для определения пространственно-временных координат фронта (поршневого) вытеснения можно пользоваться известными решениями уравнения в частных производных первого порядка (см. разд. 2.1)

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + u_x \frac{\partial C}{\partial x} + u_y \frac{\partial C}{\partial y} = 0, \quad (9.1)$$

где $u_x = v_x/n$, $u_y = v_y/n$, v_x, v_y — составляющие скорости фильтрации Дарси по осям x и y ; R — фактор сорбционной задержки.

Уравнению (9.1) соответствует система обыкновенных дифференциальных уравнений (или уравнений характеристик):

$$\frac{dx}{u_x} = \frac{dy}{u_y} = -\frac{dt}{R}. \quad (9.2)$$

Для разнообразных схем (модельных представлений) области фильтрации для скоростей $u_x(v_x)$ и $u_y(v_y)$ существуют, в свою очередь, замкнутые аналитические решения. Тогда интегрирование системы уравнений (9.2) приводит к известным (для определенного круга условий) формулам, позволяющим рассчитать положения фронтов фильтрации в различные моменты времени. С набором таких формул (решений) и способов их получения можно ознакомиться в работах (Веригин и др., 1977; Бочевер и др., 1979; Мироненко, Румынин, 1998). В большинстве случаев более эффективным оказывается использование численного или численно-аналитического моделирования.

2. Численно-аналитические решения. Приведем пример использования численно-аналитической программы (кода) ANSDIMAT (см. разд. 5.1 и 5.4) для описания динамики ореола загрязнения, формирующегося за счет утечек загрязненных вод из их поверхностного накопителя (бассейн или «поля фильтрации» — инфильтрационное поле) в поле мощного источника фильтрационного возмущения (группа водозаборных скважин или дренажная система карьера).

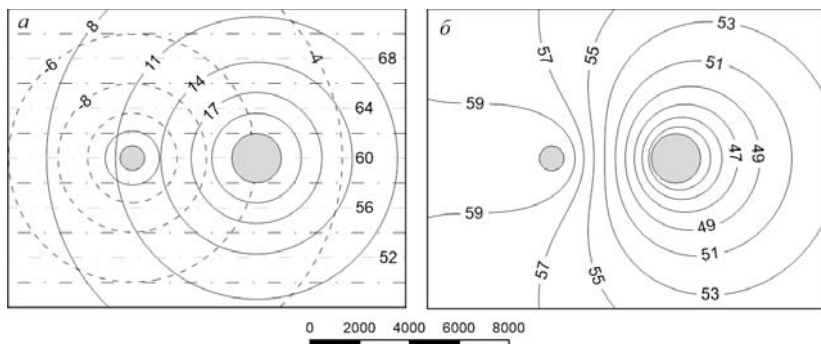


Рис. 9.1. Карты гидроизогипс, построенные по результатам независимого (последовательного) моделирования каждого гидрогеологического объекта (группы водозаборных скважин — *сплошные* линии, источника инфильтрации — *штриховые*, естественного потока — *штрих-пунктирные* линии) (а) и моделирования гидродинамического взаимодействия всех гидрогеологических объектов (б).

Исходные данные заимствованы из работы (Бочевер, Орадковская, 1972, с. 78—81), где соответствующие расчеты выполнены графо-аналитически. Расстояние между геометрическими центрами инфильтрационного поля и водозаборной группы скважин составляет 5 км (рис. 9.1, а). Естественный поток направлен с севера на юг перпендикулярно линии, соединяющей источники фильтрационного возмущения. Водозаборные скважины размещаются на площади, приведенный радиус которой 1000 м, их суммарный дебит — 30 тыс. м³/сут. Радиус инфильтрационного поля — 500 м, а суммарный дебит утечек воды — 15 тыс. м³/сут. Гидрогеологические параметры водоносного горизонта следующие: проводимость 600 м²/сут, пористость 0,1, уклон естественного потока 0,002 м/м.

Карта гидроизогипс, отражающая деформацию исходной плоскопараллельной структуры фильтрационного потока (рис. 9.1, б), позволяет построить линии тока и оконтурить область питания водозаборного узла (рис. 9.2). Эта область характеризуется наличием двух водораздельных точек (S_1 и S_2), маркирующих северную и южную водораздельные линии. Как видно из рисунка, объем загрязненных вод, отбираемых водозаборным узлом, не превысит (в пределе) примерно 30 % от суммарного дебита скважин, т. е. можно ожидать примерно трехкратного разбавления загрязняющих компонентов.

Осталось рассмотреть динамику загрязнения подземных вод, попадающих в область влияния поля инфильтрации. Для этого выполняется расчет положения изохрон, которые на рис. 9.3 ассоциируются с положением крайних точек на линиях тока, берущих начало в источнике загрязнения. Как видно из результатов аналитического моделирования, время достижения первых порций загрязненных вод водозаборного узла составляет около 10 лет. Через 20 лет примерно четверть отбираемых водозабором вод будет представлена водами, поступающими со стороны антропогенного источника загрязнения.

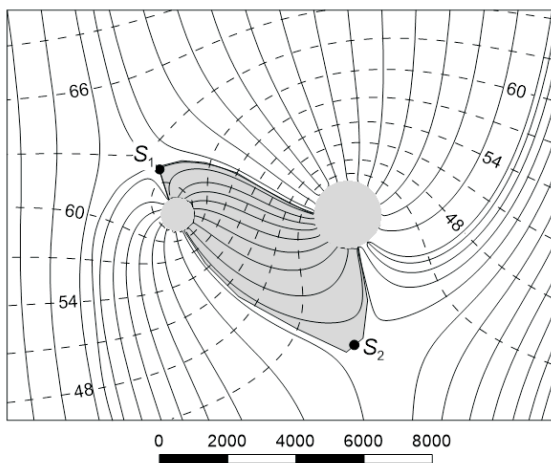


Рис. 9.2. Сетка движения подземных вод (*штриховые* линии — гидроизо-гипсы, *сплошные* — линии тока) и зона захвата загрязненных вод водозаборным узлом.

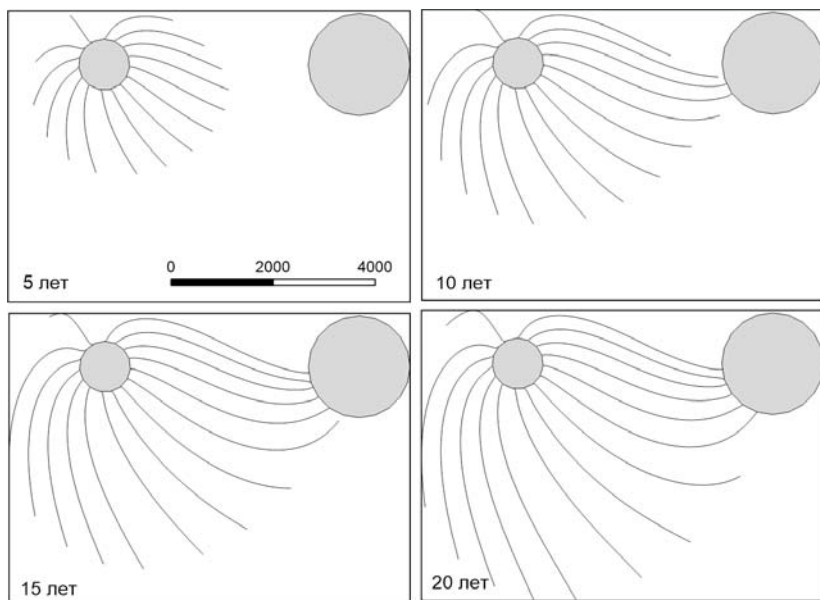


Рис. 9.3. Особенности формирования области загрязнения подземных вод во времени по результатам аналитического моделирования на программном комплексе ANSDIMAT.

9.1.2. Пример прогноза распространения загрязненных вод в реальных гидрогеологических условиях (Губкинско-Стойленский железорудный район КМА)

9.1.2.1. Гидрогеологические условия района

Основные запасы пресных подземных вод района связаны с меловым водоносным комплексом, который подразделяется на два регионально выдержанных горизонта — сеноман-альбских песков (средней мощности 30—40 м) и коньяк-туронских трещиноватых мело-мергельных пород (средняя обводненная мощность 20—30 м). Ниже залегающие глины юрского возраста являются относительным водоупором, отделяющим меловой комплекс от слабообводненных пород кристаллического фундамента (рис. 9.4).

В фильтрационном отношении песчаная толща характеризуется весьма устойчивыми по всей площади ее распространения значениями суммарной гидравлической проводимости ($T = 350—400 \text{ м}^2/\text{сут}$). Фильтрационные свойства мело-мергельного горизонта в плане и в разрезе изменяются в гораздо более широких пределах — коэффициенты фильтрации варьируют от десятых долей до десятков метров в сутки (в среднем составляя

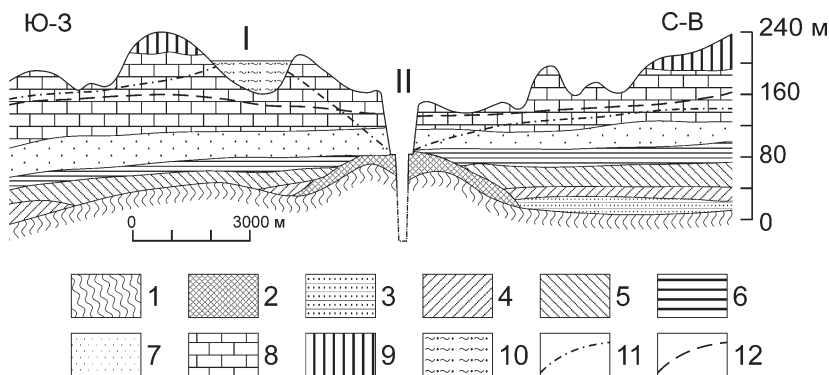


Рис. 9.4. Схематический гидрогеологический разрез пород осадочного комплекса Губкинско-Стойленского горнопромышленного района.

1 — породы кристаллического фундамента; 2 — «залежи» богатой руды, 3 — среднедевонские песчаники (водоносный горизонт); 4 — верхнедевонские глины; 5 — юрские глины и глинистые пески; 6 — апт-неокомские глины и глинистые пески; 7 — альб-сеноманские пески (водоносный горизонт); 8 — коньяк-туронские мела и мергели (водоносный горизонт); 9 — четвертичные суглинки; 10 — намывные отложения; 11 — уровень подземных вод при нарушенном режиме; 12 — то же, при естественном режиме.

I — гидроотвал «Березов Лог»; II — Лебединский карьер (схематический контур).

2—5 м/сут), что обусловлено неравномерной степенью трещиноватости пород; осредненная пористость породных блоков в мелах достигает 40—45 %.

Оба водоносных горизонта тесно связаны между собой и в фильтрационном отношении рассматриваются как единая безнапорная система общей мощностью 40—60 м, питание которой происходит за счет атмосферных осадков и искусственно созданных водоемов (хвостохранилища Лебединского и Стойленского ГОКов, гидроотвала «Березов Лог» и некоторых других бассейнов-накопителей сточных вод). Дополнительным источником питания служат р. Осколец и ее притоки, а также инфильтрация атмосферных осадков (рис. 9.5).

Разгрузка подземных вод с интенсивностью более 11 тыс. м³/ч происходит в дренажные системы действующих Лебединского и Стойленского карьеров (в среднем 6.5 и 4.8 тыс. м³/ч соответственно), а также шахту им. Губкина (около 300 м³/ч) — рис. 9.5.

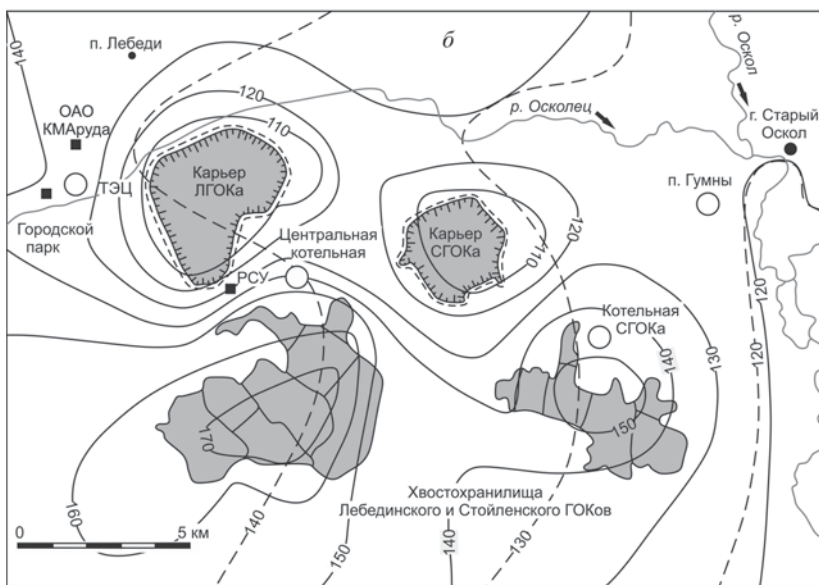
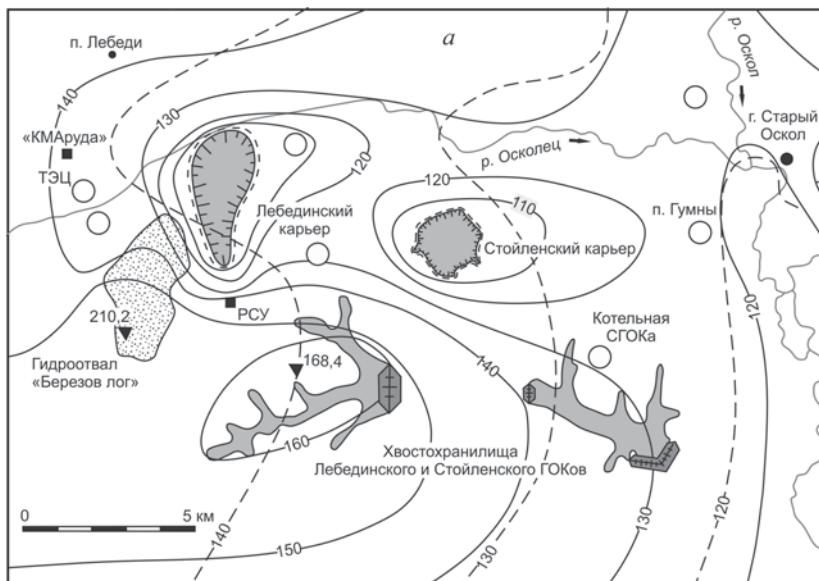
Фильтрационные потери из хвостохранилищ Лебединского и Стойленского ГОКов оцениваются величинами 2500 и 1000 м³/ч. Суммарная инфильтрация через основание гидроотвала «Березов Лог» существенно ниже — 300—400 м³/ч.

9.1.2.2. Режим подземных вод, нарушенный дренажем карьеров и утечками воды из техногенных бассейнов

Строительство и эксплуатация горнопромышленных предприятий привели к значительному нарушению гидродинамического режима подземных вод прилегающей территории и условий их взаимосвязи с поверхностными водами (рис. 9.5). Понижение напоров на контурах карьеров достигает 200—250 м (что привело к частичному осушению вблизи них мело-мергельного горизонта), а площадь региональной депрессионной воронки измеряется 300 квадратными километрами. Интенсивные утечки из бассейнов способствовали образованию вблизи них обширных куполов растекания техногенных вод, во многом определяющих структуру фильтрационных потоков в целом.

Стабилизация гидродинамического режима подтверждается близостью потенциальных поверхностей, характеризующих распределение напоров на моменты времени, весьма удаленные друг от друга, 1980 и 2014 гг. (рис. 9.5).

Это способствовало образованию в районе замкнутого водно-балансового цикла: значительная доля откачиваемой при во-



1 2 3 ○

допонижении воды после участия в различных технологических процессах вновь возвращается в водоносные пласты. Естественно, что в подобных условиях природные подземные воды на значительных площадях оказываются замещенными техногенными стоками. Вместе с тем полученные результаты свидетельствуют о том, что при содержаниях компонентов, достаточно близких к предельно допустимым по ГОСТу «Вода питьевая» значениям, пока наблюдается относительная стабилизация химического состава подземных и поверхностных вод (Петин и др., 2013). Это, в частности, свидетельствует о протекании в них процессов самоочищения, препятствующих накоплению загрязняющих компонентов.

Такие процессы протекают как в водоносных горизонтах, так и в породах, экранирующих хвостохранилища (разд. 9.1.3).

9.1.2.3. Прогноз миграции условно нейтрального компонента (в условиях типового разреза района)

В схематическом представлении процесс миграции выглядит следующим образом. Фильтрация промстоков из поверхностных бассейнов (хвостохранилища ЛГОК и СГОК) через глинистые экранирующие отложения приводит к образованию куполов растекания в меловом водоносном комплексе (рис. 9.5). Интенсивность перемещения промстоков к ближайшим контурам разгрузки (дренажным системам карьеров, расположенным на удалении в несколько километров) контролируется преимущественно градиентами этого техногенного планового потока, а поперечное (гидродисперсионное) рассеяние имеет подчиненное значение.

Особенности развития миграционного процесса в этих условиях рассмотрим в предельно упрощенной в геохимическом отношении постановке, пренебрегающей всеми видами сорбции и внутрифазовыми преобразованиями (комплексобразованием, деструкцией вещества и т. п.). К условно нейтральным компо-

Рис. 9.5. Схема расположения карьеров, гидросооружений и водозаборов подземных вод, совмещенная с картами гидроизогипс мелового водоносного комплекса (Губкинско-Стойленский промышленный район).

а — 1980 г. (Мироненко и др., 1988); *б* — 2014 г. (Еланцева, Фоменко, 2014). 1 — гидроизогипсы ненарушенного гидрогеологического режима (до дренажных мероприятий); 2 — гидроизогипсы нарушенного гидрогеологического режима; 3 — водозабор.

нентам (трассерам) здесь могут быть отнесены нитраты, хлориды и сульфаты (с некоторой оговоркой — см. далее).

Данная задача, имеющая дело с гидродинамически активными источниками загрязнения (их фильтрационный расход доминирует над расчетным расходом естественного фильтрационного потока), может быть рассмотрена в двухмерной плановой и профильной постановке.

Плановая модель. В первом приближении можно предположить, что миграция нейтрального загрязнителя в меловом водоносном комплексе, представленном песчаными и мело-мергельными отложениями, протекает в асимптотическом режиме без заметной деформации профиля концентрации по глубине потока. Скорость единого фронта переноса, формирующегося на продолжительных этапах процесса, близка к средневзвешенной действительной скорости движения подземных вод, определяемой суммарной проводимостью водоносной толщи и средней «солевой» емкостью пород, — пористостью песков и пористостью матрицы меловых пород.

Традиционно такие задачи решаются на сеточных моделях, реализующих конечно-разностные (или конечно-элементные) методы решения дифференциальных уравнений фильтрации и массопереноса. В то же время если водоносная толща не отличается сильной изменчивостью фильтрационных свойств, а конфигурация области фильтрации является достаточно простой, то вполне приемлемые результаты могут быть получены и в рамках аналитического моделирования. Рассмотрим с этих позиций возможности модельного комплекса ANSDIMAT (разд. 5.4 и 9.1.1) применительно к исследованию регионального потока подземных вод, формируемого карьерным дренажем (Лебединский и Стойленский карьеры), водозаборными скважинами, используемыми в системе городского и технического водоснабжения района, а также утечками из двух хвостохранилищ (Лебединского и Стойленского ГОКов) и гидроотвала «Березов Лог» (рис. 9.5).

Все гидрогеологические объекты (внутренние источники гидродинамического возмущения) моделировались с помощью однотипной функции — точечного (в плане) источника-стока (рис. 9.6). Эта функция, по сути, представляла собой элементарное решение для откачивающей или нагнетательной скважины, в данном случае — фундаментальное решение Тейса. Линейное размещение источников и стоков позволило имитировать дренажные контуры карьеров и р. Осколец, которая является контуром питания водоносной толщи. Равномерное распределение стоков в пределах замкнутых областей позволило имитировать утечки из поверхностных бассейнов — хвостохранилищ и гидроотвала. Водозаборные скважины моделировались в виде точечных рассосредоточенных источников. Река Оскол на востоке области моделировалась как линейная граница с постоянным напором.

На карте рядом с гидрогеологическим объектом в форме дроби показаны суммарные дебиты водоотбора/утечки (в числителе) и количество

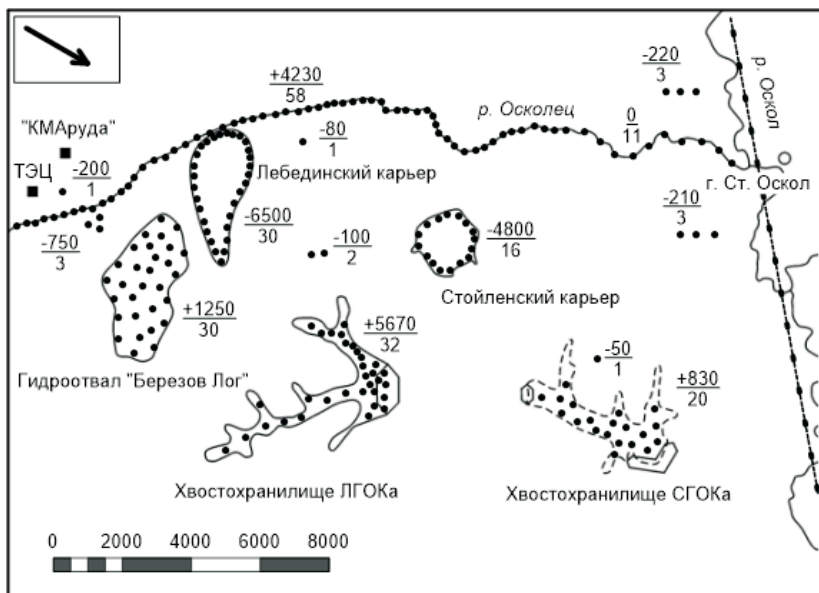


Рис. 9.6. Карта, показывающая расположение основных природных и техногенных объектов, оказывающих влияние на режим подземных вод, и источников-стоков, аппроксимирующих эти объекты.

В числителе дроби со знаком плюс — суммарные потери на инфильтрацию, $\text{м}^3/\text{ч}$, со знаком минус — суммарный дебит водоотбора, $\text{м}^3/\text{ч}$; в знаменателе — количество источников-стоков.

элементарных источников (в знаменателе). Величины дебитов получены прямыми замерами (для дренажных систем) или балансовыми методами (для хвостохранилищ, гидроотвала и р. Осколец). Всего таких источников было задействовано в модели 160. Суммарная проводимость мелового водоносного горизонта была принята равной $900 \text{ м}^2/\text{сут}$, что отвечает среднему значению этого параметра по данным опытных откачек. Для последующего расчета фронтов переноса использовалось значение пористости 35 % (характерное значение активной пористости песков, которое близко к пористости матрицы мело-мергельных отложений). Выбор направления регионального естественного потока базировался на карте изогипс, полученной до начала освоения железорудных месторождений данного района КМА (рис. 9.5).

Результат суперпозиции элементарных решений для точечных источников (полученный с учетом восточной границы первого рода) в форме карты гидроизогипс представлен на рис. 9.7 Сопоставление этой карты с картой фактического материала (см. рис. 9.5) свидетельствует об их полном подобии. Полученное поле напоров позволяет рассчитать и траектории движения частиц воды — линии тока, также показанные на рис. 9.7. Как видно на рисунке, большинство линий тока, берущих начало из ис-

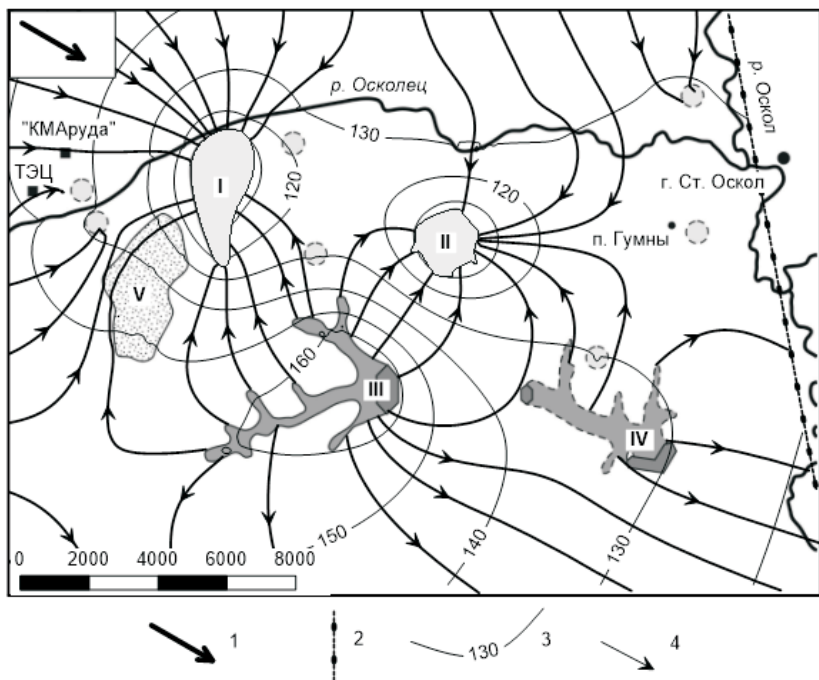


Рис. 9.7. Сетка движения подземных вод, рассчитанная на программном комплексе ANSDIMAT.

I — направление регионального фильтрационного потока; 2 — граница постоянного напора; 3 — гидроизонипса (м); 4 — линия тока.

точников инфильтрационного питания, замыкается на дренажных контурах карьеров. Однако часть инфильтрационных вод, поступающих в водоносный горизонт из хвостохранилищ, вовлекаемая региональным потоком, движется на юго-восток.

Особый интерес представляет расчет изохрон — линий, соединяющих точки с одинаковым временем нахождения в пласте техногенных вод после их инфильтрации через донные отложения. Такой расчет выполнен для вод хвостохранилища Лебединского ГОКа (рис. 9.8). Рассмотрены следующие моменты времени: 15, 50, 100 и 500 лет. Хорошо видно, что 15 лет — это период, когда первые порции условного загрязняющего компонента достигают дренажных контуров карьеров. Через 50 лет происходит относительная стабилизация фронта загрязнения вблизи карьеров, которые полностью перехватывают поток загрязненных вод,двигающийся в северном направлении. На карте выделяются три нейтральные (водораздельные) точки (S_1 , S_2 , S_3) и маркируемые ими водораздельные линии. Эти линии оконтуривают область захвата подземных вод дренажными системами в условиях гидродинамического взаимодействия последних с естественным фильтрационным потоком с

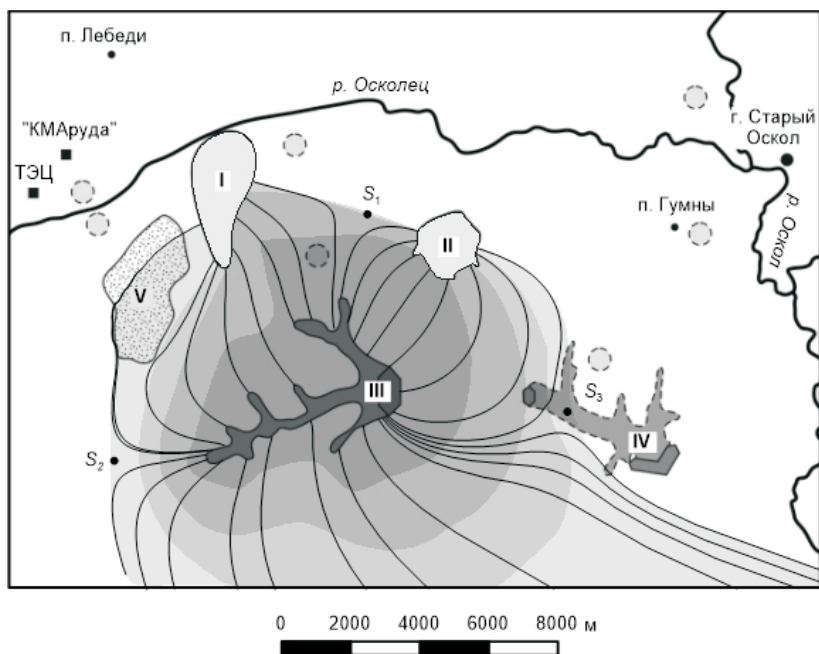


Рис. 9.8. Области, занятые техногенными водами, инфильтрующимися из хвостохранилища ЛГОКа, в различные моменты времени.

Темно-серый цвет — 15 лет; на тон светлее — 50 лет; следующий тон серого цвета — 100 лет; самый светлый тон серого цвета (внешняя граница ореола) — 500 лет.

северо-запада и с южным потоком инфильтрационных вод техногенного генезиса.

Профильная модель (Мироненко и др., 1980). Напомним, что типичным для района является двухслойный разрез (см. рис. 9.4): песчаный водоносный горизонт перекрыт обводненными меломергельными породами (гетерогенная среда с двойной емкостью). Применительно к этим условиям основную роль в перемещении фронта загрязнения играют: 1) конвективный перенос со скоростью, отвечающей средней действительной скорости фильтрационного потока, 2) процессы макродисперсии, обусловленные фильтрационной неоднородностью разреза и гетерогенным строением водоносных меловых пород, 3) процессы дисперсионного и конвективного обмена между меловой и песчаной толщами.

В первые моменты времени фронт загрязнения будет перемещаться с большей скоростью (десятки метров в сутки) по верхней части водоносного горизонта — по трещинам в меловых породах, а по пескам он будет отставать (см. осредненную схему на рис. 9.9, положение *a*). Однако высокие скорости конвективного переноса будут отмечаться в меловых по-

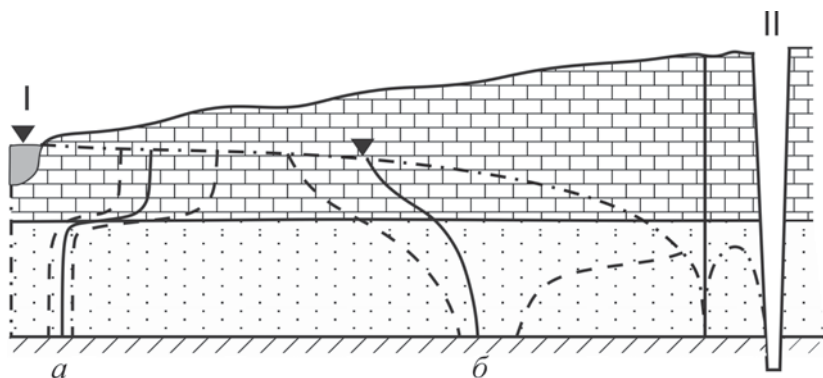


Рис. 9.9. Концептуальная модель геомиграции в двухслойной системе на начальных (а) и продолжительных (б) этапах миграции (участок хвостохранилище—карьер, I—II).

Сплошная линия — положение фронта поршневого вытеснения ($\bar{C} \approx 0.5$); штриховые линии — условные границы зоны дисперсии.

родах лишь в самые первые моменты времени, не представляющие практического интереса для прогнозов. Уже через короткое время меловые породы начинают проявлять себя как среда с двойной пористостью, и под влиянием перепада концентраций загрязняющий компонент интенсивно усваивается пористыми блоками мелов — в ходе процесса молекулярной диффузии. Период времени, в течение которого можно не учитывать ограниченность размеров меловых блоков (см. разд. 3.3.1) при заданных их параметрах, измеряется первыми сотнями суток. При большом времени переноса начинает сказываться ограниченная приемная способность пористых блоков. В первую очередь насыщаются блоки вблизи хвостохранилища, в результате чего здесь образуется зона с постоянной относительной концентрацией $\bar{C} \approx 1$. Постепенно перенос по меловым породам все больше будет приближаться к асимптотической расчетной схеме (локального равновесия) с эффективными параметрами (3.3.1), согласно которой скорости перемещения загрязнения по мелам определяются в основном пористостью блоков (n_0), т. е. расчетная действительная скорость переноса по мелам будет меньше, чем в песках. Поэтому фронт загрязнения по пескам очень быстро сравняется с фронтом по мелам; в дальнейшем распространение фронта по пескам будет идти с опережением по отношению к мелам (рис. 9.9, положение б).

Учитывая, что пески играют основную роль в общем расходе подземного потока, для долговременных оценок, когда время измеряется сотнями—тысячами суток, текущее положение фронта вытеснения может оцениваться из решения задачи чисто конвективного переноса при заданном значении суммарной емкости пород $n^* \approx n_{\text{п}} = 0.35$.

Полученные оценки для конвективного переноса должны быть дополнены рассмотрением дисперсионных эффектов. Для песков их значе-

ние становится пренебрежимо малым уже через сравнительно короткое время: даже с учетом возможного увеличения масштаба дисперсии, обусловленного слоистостью, наличие переходной зоны в песках может не учитываться. Гораздо заметнее макродисперсия в мелах. Так, согласно разд. 3.3.1, можно показать, что при наблюдаемых градиентах фильтрации размеры зоны макродисперсии в мелах для временных диапазонов 1000—2000 сут составляют многие сотни метров.

Далее можно предположить, что межслоевое взаимодействие, обусловленное наличием вертикальной составляющей скорости фильтрации и поперечной профильной дисперсией, приводит к разбавлению загрязняющих растворов, которые поступают в песчаный горизонт из меловых пород на переднем фронте дисперсии, существенно опережающем фронт поршневого вытеснения в песках. Развитие такого рода взаимодействия выводит миграционный процесс на длительных его этапах на асимптотический режим, который может в целом характеризоваться обобщенными параметрами квазиодномерного переноса — константами $n^* \approx n_{\Pi} \approx n_0$ и $\delta^* \approx v_{\Pi}/\alpha n_0 \sim 300$ м.

9.1.3. Гидрохимические преобразования промстоков в системе «техногенный бассейн—донные осадки—водоносный горизонт»

По главным солеобразующим компонентам состав поверхностных (техногенных и загрязненных речных) вод близок к исходному (гидрокарбонатному кальциевому) составу подземных вод верхних горизонтов, имеющих минерализацию до 0.5—0.7 г/л. В то же время воды технических водоемов и р. Осколец «статистически» отличаются по своему химическому и микробиологическому составу от «фоновых» подземных вод. Эти отличия связаны в первую очередь с повышенным содержанием в поверхностных водах соединений группы азота, нефтепродуктов, а также патогенных микроорганизмов. Техногенные бассейны служат источником повышенных концентраций сульфат-ионов, воды хвостохранилищ ГОКов содержат флокюлянт-полиакриламид (ПАА).

На фоне «вялой» общей гидрохимической обстановки физико-химические преобразования сточных растворов фиксируются в основном по изменению содержаний специфических загрязняющих компонентов. Особый интерес представляет исследование техногенеза подземных вод в пределах областей влияния основных гидротехнических сооружений — хвостохранилища и (ранее) гидроотвала «Березов Лог». Эти закономерности определяются во многом направленностью окислительно-восстановительных реакций, протекающих при активном

участии микроорганизмов (Мироненко и др., 1988). Индивидуальными особенностями отличаются преобразования, идущие: 1) в самих водоемах, 2) в донных отложениях, экранирующих эти водоемы, и 3) в области миграции техногенных вод в водоносных горизонтах.

В *технических бассейнах*, где происходит накопление двухфазных стоков горнорудных предприятий, протекают окислительные процессы. Сульфидные минералы вскрышных пород (в гидроотвале) и железных руд (в хвостохранилище) окисляются с образованием сульфатов, ионов железа и водорода. Образующаяся серная кислота нейтрализуется при взаимодействии с карбонатными минералами, а двухвалентное железо в условиях наблюдаемых значений $E_h = 350\text{—}380$ мВ и $pH\ 7.6\text{—}8.0$ окисляется и гидролизуется с образованием гидроокиси $Fe(OH)_3$; содержание же сульфатов возрастает до $100\text{—}350$ мг/л. Окислительные условия контролируют также протекание реакций в системе азотных соединений. Так, ионы аммония и нитриты переходят в более устойчивую форму — нитраты. Эти реакции активно поддерживаются жизнедеятельностью нитрифицирующих микроорганизмов, обнаруженных в водоемах (Мироненко и др., 1988).

Резкая смена физико-химической обстановки ($E_h = 150\text{—}250$ мВ, $pH = 7.5$) наблюдается при фильтрации техногенных растворов *через донные осадки*: здесь протекают восстановительные процессы, также усиленные деятельностью нескольких групп микроорганизмов (тионовых сульфатредуцирующих и денитрифицирующих гетерофитов). Эти процессы приводят к самоочищению техногенных вод от нитратов, восстанавливаемых до свободного азота (денитрификация), и сульфатов, редуцирующихся до сероводорода (сульфатредукция). Образующиеся в результате сульфатредукции сероводород и гидросульфид-ионы способствуют формированию в донных отложениях сероводородного барьера, препятствующего, в частности, выносу железа.

Миграция техногенных вод *в водоносных пластах* сопровождается менее выраженными физико-химическими процессами, протекающими преимущественно в окислительной обстановке: здесь происходит окисление восстановленных (при фильтрации через донные отложения) соединений серы (H_2S , HS^-), сопровождающееся жизнедеятельностью тионовых бактерий (Мироненко и др., 1988). В сеноман-альбских водоносных песках достаточно активно протекают процессы денитрификации, связанные с присутствием в этих отложениях пирита и органического углерода. Таким образом, в пластовых условиях происходит самоочищение сточных растворов от нитратных соединений, среднестатистические концентрации которых в несколько раз ниже соответствующих содержаний в поверхностных техногенных бассейнах и р. Осколец. Поэтому подземные воды коньяк-туронского и альб-сеноманского горизонтов в зоне непосредственного влияния хвостохранилищ характеризуются высокими качественными (с точки зрения их потенциального использования в хозяйственных целях) показателями: они остаются, как и в ненарушенных условиях, пресными с минерализацией, редко превышающей 500 мг/л,

без вкуса, без запаха, умеренно жесткими. Окисляемость меняется от 0.7 до 1.6 мг/л. Содержание азотных соединений, железа и кремния ниже ПДК (Гензель и др., 2010; Крамчанинов и др., 2011).

9.2. Горные отвалы

На большинстве месторождений полезных ископаемых, которые добываются открытым или шахтным способом, рано или поздно встает проблема загрязнения подземных вод сульфатами (при условии наличия в породах примесей пирита и пирротина). В процессе эксплуатации происходит постепенное увеличение концентраций сульфат-ионов в воде с первых десятков мг/л до г/л. Одной из причин ухудшения качества подземных вод является активизация процессов окисления сульфидов и серы в искусственных насыпях вскрышных пород, добываемых попутно с полезным ископаемым, — в горных отвалах.

Экспериментальные исследования (Nicholson et al., 1990) показывают сильное уменьшение скорости окисления пирита со временем, что связано с образованием на его поверхности ингибирующей пленки, представленной в основном лепидокрокитом (γ -FeOОН). Коэффициент диффузии кислорода через пленку (D_m) оценен на уровне $2.6 \cdot 10^{-11}$ м²/сут (примерно на 6 порядков ниже коэффициента диффузии кислорода в воде). Огромное диффузионное сопротивление ингибирующей пленки приводит к тому, что уже через несколько недель интенсивность окисления пирита лимитируется преимущественно диффузионным переносом через пленку и практически не зависит от скорости реакции на поверхности пирита.

Несмотря на влияние данного фактора, сдерживающего окисление сульфидов, физико-химическое выветривание сульфидсодержащих пород протекает довольно активно, о чем свидетельствуют приводимые ниже примеры.

9.2.1. Ковдорское железорудное месторождение (Кольский полуостров)

Ковдорское комплексное бадделеит-апатит-магнетитовое месторождение, открытое в 1933 г., начало обрабатываться в начале 1960 гг. Первоочередной участок обработки был связан со строительством карьера для извлечения руды существенно магнетитового состава.

На западном и северном флангах месторождения начиная с 1980-х гг., наблюдается прогрессирующий рост концентраций сульфатов

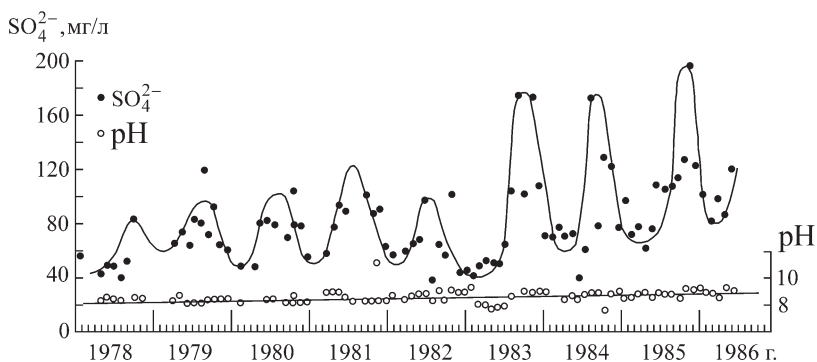
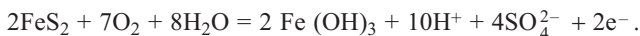


Рис. 9.10. Закономерности временных изменений показателя pH и концентрации сульфатов в карьерных водах Ковдорского месторождения.

при одновременном повышении щелочности водной среды (Мироненко и др., 1988). Содержание ионов SO_4^{2-} в разведочных скважинах, а также в дренажных водах достигало в среднем 250 мг/л (по отдельным пробам до 600 мг/л), что существенно (более чем на порядок) превышало не только фоновые концентрации SO_4^{2-} (5—7 мг/л) в природных водах, но и содержания техногенных сульфатов в хвостохранилище (по нормам рыбохозяйственного водопользования сульфатов в воде не должно быть более 100 мг/л). Наиболее вероятным источником сульфатного загрязнения являются отвалы вскрышных пород, которые включают сульфидные минералы, выщелачиваемые атмосферными осадками. Однако формирование уникального гидрохимического типа щелочных сульфатных кальциевых вод не может быть объяснено только процессами окисления сульфидов (дающих кислую реакцию) и требует привлечения более сложных физико-химических моделей.

Режимные наблюдения позволили выявить общую тенденцию к накоплению ионов SO_4^{2-} в дренажных и карьерных водах (рис. 9.10), которое особенно активно протекало начиная с 1983 г., а также некоторый рост во времени показателя pH. Заметим, что рассматриваемые подземные воды характеризуются также повышенными содержаниями азотных соединений.

Наиболее вероятным источником серы для них являются сульфидные минералы, рассеянные по массе нерудных пород в горных отвалах. Окисление сульфидов, представленных главным образом пирротинном (его содержание достигает 3 %) и пиритом (содержание которого в породе колеблется в пределах 0.1—1.0 %), происходит в условиях активного их взаимодействия на поверхности свежеобнаженных отвальных пород с атмосферной влагой и кислородом воздуха:



Согласно этим реакциям, кислотность среды должна увеличиваться. Между тем гидрохимические материалы показывают обратное: с увеличением содержания сульфатов значения pH растут. Если исключить влияние микроорганизмов (например, тионовых бактерий) на ход реакций, то наблюдаемые гидрогеохимические преобразования могут быть объяснены процессами химического выветривания пород щелочного и ультраосновного состава. Косвенным подтверждением возможности протекания этого процесса служит одновременное увеличение в формирующихся водах содержания ионов Ca^{2+} , входящих в состав наиболее характерных для месторождения породообразующих минералов, таких как диопсид (клинопироксен), анортит (плагиоклаз) и некоторые другие. С этих позиций, например, правомерно рассмотрение реакции



приводящей к гидролитическому разложению анортита до глинистого минерала — каолинита. Таким образом, появление гидроксильных групп способствует «нейтрализации» ионов водорода: $\text{OH}^- + \text{H}^+ = \text{H}_2\text{O}$.

Источником техногенной серы могут служить также атмосферные (как жидкие — в виде дождя, так и твердые — в виде снега) осадки, содержащие в своем составе соединения SO_2 и H_2SO_4 дымовых выбросов горнодобывающего предприятия. С атмосферным загрязнением связано, вероятно, и поступление в подземные воды азотных соединений. Наиболее активная аккумуляция соединений серы и азота в подземных водах происходит опять-таки по площади распространения горных отвалов.

Важная роль атмосферного питания в формировании гидрогеохимического (в нарушенных условиях) режима подземных вод подтверждается данными наблюдений, полученными в годовом разрезе времени. Так, на графике (рис. 9.10), имеющем хорошо выраженный синусоидальный (с нарастающей амплитудой колебаний) характер, отчетливо проявляется тенденция к увеличению концентрации ионов SO_4^{2-} в паводковый (летне-осенний) период, когда активизируется взаимодействие атмосферной влаги с породами отвалов; с другой стороны, в этот период в водоносный горизонт попадает талая вода, загрязненная серными соединениями атмосферных выбросов. Минимумы концентраций SO_4^{2-} соответствуют зимнему межленному периоду, когда роль отмеченных факторов незначительна.

9.2.2. Коашвинское апатит-нефелиновое месторождение (Хибинский щелочной массив)

Похожая с вышеописанной ситуацией, а именно активизация процессов химического выветривания и растворения минералов, в частности окисления сульфидов и серы за счет увеличения площади активной поверхности пород наблюдается и на участках складирования горных отвалов — вскрышных пород, на Коашвинском апатит-нефелиновом место-

рождении (ПО «Апатит»). В водосборную площадь бассейна р. Вуоннейок, где находится карьер, попадают не только отвалы самого карьера, но и отвалы других рудников (рис. 9.11). Река Вуоннейок, пересекающая месторождение с северо-востока на юго-востоке, характеризуется повышенным коэффициентом извилистости и быстрым течением. Основным источником питания реки являются атмосферные осадки и тающие снега. Максимальные расходы реки, включая притоки, составляют около 4500 л/сек. В настоящее время река Вуоннейок на территории месторождения спрямлена и отведена в канал. Временный ручей Коашвайок отведен в зумпф на дне карьера, откуда вода откачивается за пределы месторождения.

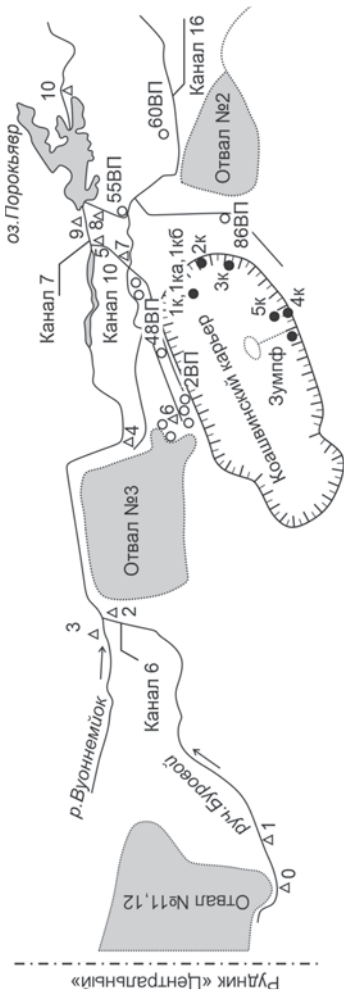
В районе работ выделяются два типа подземных вод: первый — воды, связанные с четвертичными пористыми отложениями; в обводнении Коашвинского карьера участвуют главным образом ошашковский и подпорожский водно-ледниковые горизонты; второй — воды дочетвертичных пород, представленные протерозой-палеозойским комплексом кристаллических трещиноватых пород.

Разработка Коашвинского месторождения ведется открытым способом. Оработка значительно осложнена из-за значительных водоприток в карьер из водоносного комплекса четвертичных пород, приуроченных к межгорной долине р. Вуоннейок. Фильтры скважин водопонижения установлены во втором от поверхности водно-ледниковом горизонте. Отключение скважин в период ремонтных работ увеличивает производительность системы карьерного водоотлива. С 1994 по 1996 г. среднегодовая производительность карьерного водоотлива достигала 2700 м³/ч, при работе скважинного водоотлива в этот же период — 1400 м³/ч.

Уже с первых лет оработки месторождения начали отмечаться неблагоприятные тенденции изменения качества природных (как поверхностных, так и подземных) вод в районе его расположения. Произошло многократное увеличение минерализации вод (до 200—300 мг/л по сухому остатку), при том что все природные воды в районе являются ультрапресными (минерализация менее 50 мг/л). Главными маркерами загрязнения служат сульфат- и нитрат-ионы.

В середине июня 2005 г. было произведено гидрохимическое опробование Коашвинского месторождения в пределах зоны техногенного влияния его оработки (рис. 9.12). Пробы отбирались из р. Вуоннейок, ее притоков (ручьев), водопонизительных скважин, а также из водопроявлений в карьере (места высачивания подземных вод) и карьерного зумпфа (всего отобрано 27 проб).

Как видно из представленных данных (табл. 9.1), за исключением проб в фоновых точках наблюдения 3 и 5к, все пробы воды характеризуются высоким уровнем содержания сульфатов и нитратов. Места отбора этих проб попадают в область влияния горных отвалов (рис. 9.11), где происходит интенсивное питание подземных вод атмосферными осадками в период снеготаяния и в летнее время года. Дополнительное загрязнение происходит за счет инфильтрации из водоотводных каналов с неэкранированным руслом, а также из оз. Порокьявр.



Δ поверхностные воды ● карьерные воды ○ водопонизительные скважины

Рис. 9.11. Схема размещения объектов горного производства в районе Кошвинского месторождения и пункты отбора гидрохимических проб (табл. 9.1).

Таблица 9.1

**Номера точек опробования и концентрации
загрязняющих компонентов**

	Поверхностные водотоки										
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
SO ₄ ²⁻	293	278	291	4.1	70.2	55.1	172	154	16.7	70.6	41.6
NO ₃ ⁻	59.9	47.7	51.2	1.0	13.9	17.2	55.8	50	13.8	14	13.4
pH	7.7	—	7.4	6.8	7.0	7.1	7.1	7.4	—	7.3	7.4
	Карьер						Водопозитительные скважины				
	1к	2к	3к	4к	5к	3-ф	2ВП	86ВП	60ВП	55ВП	48ВП
SO ₄ ²⁻	102	63.4	12.6	7.5	8	61.3	101	42	33	6.2	51.4
NO ₃ ⁻	28.3	67.4	3.7	0.6	1	42	35.5	31	25	6.2	13.1
pH	7.4	7.1	7.1	—	6.4	8.7	7.1	6.4	6.2	6.9	7.0

Основным источником загрязнения являются отвалы № 11 и 12 Центрального рудника. Он дает максимальные концентрации SO₄²⁻ до 290 мг/л, фиксируемые в руч. Буровом. Загрязнение распространяется по руч. Буровому и смешивается с р. Вуоннемйок. Загрязненные речные воды частично захватываются депрессионной воронкой карьера, также понижая качество дренажных вод. Концентрации сульфатов и нитратов в подземных водах в целом ниже, чем в поверхностных водах. Максимально зарегистрированные концентрации SO₄²⁻ отмечены в кусте скважин 1—102 мг/л.

Изменение химического состава сульфатов во времени иллюстрируется графиком, построенным по данным отбора проб из оз. Парокъявр (рис. 9.12). Эти данные характеризуют суммарный эффект всех источников загрязнения, поскольку в оз. Парокъявр в итоге попадают все техно-

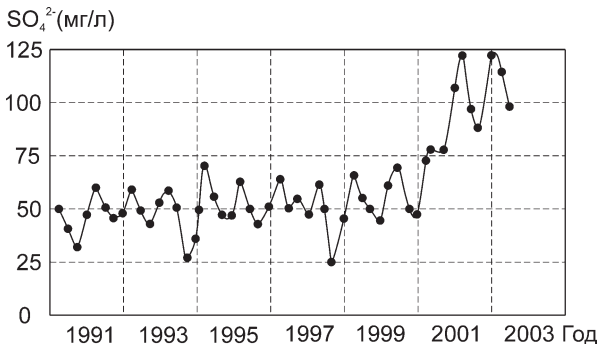


Рис. 9.12. Изменение концентрации сульфатов в воде оз. Парокъявр.

генные воды: из руч. Бурового и р. Вуоннемейок, а также воды из зумпфа карьера и дренажных скважин. Нужно обратить внимание на то, что точка временного прослеживания — это подземные воды, в которые, как предполагается, происходит интенсивное перетекание с поверхностного горизонта.

Из графика на рис. 9.12 видно, что на протяжении 9 лет (с 1991 по 2000 г.) средняя концентрация сульфатов находилась на уровне 50 мг/л, а с 2000 г. наблюдается резкое увеличение концентраций до 120 мг/л. Скорее всего, это связано с влиянием отвала Центрального рудника (№ 11, 12), так как в 2000 г. границы отвала перешли в водосборную часть Коашвинского карьера (руч. Буровой), т. е. график (рис. 9.12) показывает, что техногенное влияние отвала № 3 и отвала № 11, 12 примерно одинаковое. Как и в случае Ковдорского месторождения, воды, несмотря на протекание реакции окисления сульфидов, сохраняют свой щелочной облик. Интересно также отметить, что, как и в случае Ковдорского месторождения, отмечается синусоидальный характер изменения концентрации сульфатов, причем максимальные их концентрации наблюдаются в период весеннего половодья.

Глава 10

МИГРАЦИЯ РАССОЛОВ В ЗОНЕ ВЛИЯНИЯ ПРЕДПРИЯТИЯ ГОРНО-ХИМИЧЕСКОГО ПРОИЗВОДСТВА

Минеральные соли, получаемые в процессе горно-химического производства, широко используются в качестве сельскохозяйственных удобрений, в химической, нефтяной, металлургической и многих других отраслях промышленности. Разработка значительной части месторождений минеральных солей осуществляется подземным (шахтным) способом при глубинах залегания сырья до более 500—600 м.

Минеральные соли являются одним из основных источников калийно-магниевых удобрений, для получения которых в районах добычи данного вида химического сырья строятся горно-перерабатывающие комплексы. Применяемые технологии переработки руд позволяют добиться извлечения полезных компонентов на уровне 27—30 %, остальная добываемая горная масса переходит в отходы (Бобошко, Бачурин, 2002). Поэтому неотъемлемым атрибутом горно-перерабатывающих комплексов являются места складирования жидких и твердых отходов соледобычи — шламохранилища, солеотвалы и рассолосборники, образующие источники загрязнения (засоления) поверхностных и подземных вод рассолами. Для прогнозирования миграции рассолов необ-

ходимо учитывать их повышенную (в сравнении с пресными водами) плотность. Значимость данного фактора может быть проиллюстрирована исследованием формирования ореолов засоления подземных вод в пределах участков размещения предприятий, ведущих разработку Верхнекамского месторождения калийно-магниевых солей. Прежде, однако, рассмотрим некоторые особенности плотностной конвекции в водоносных пластах как физического процесса.

10.1. О некоторых особенностях миграции растворов переменной плотности

Рассмотрим поведение границы раздела двух жидкостей при полном (по всей мощности пласта — рис. 10.1) поршневом вытеснении одной жидкости другой. Пусть жидкости (растворы) различаются по плотности: $\rho_{1,2}$ (индекс 1 относится к исходному — вытесняющему раствору, индекс 2 — к вытесняемому). Известно, что эти различия приводят к «деформации» границы (контакта) раздела жидкостей. Так, как следует из схематического представления процесса на рис. 10.1, уже в начальные моменты времени, когда контакт имеет вертикальное положение вблизи входной границы потока, градиенты давления вблизи подошвы пласта по более плотной жидкости превышают градиент давления этой жидкости вблизи кровли пласта на величину $\sim Hg(\rho_2 - \rho_1)$. Разница давлений заставляет двигаться частицы более плотной воды в нижней части пласта с повы-

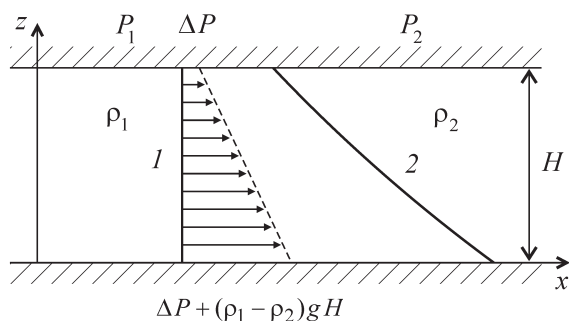


Рис. 10.1. Деформация границы раздела двух жидкостей под действием силы тяжести.

Эпюра распределения начальных давлений ($t = 0$) для случая $\rho_2 > \rho_1$ (1 и 2 — положение контакта при $t = 0$ и $t > 0$ соответственно).

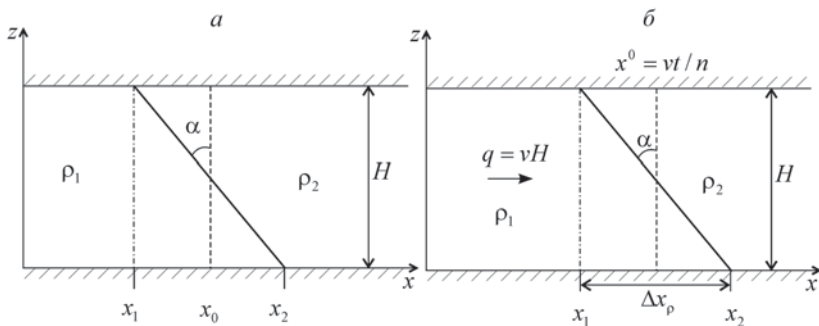


Рис. 10.2. Ротация контакта равновесимых жидкостей.

$$a - v = 0, \quad b - v > 0.$$

шенными скоростями, так что граница раздела принимает наклонное положение. Дополнительное влияние на характер и форму подвижной границы раздела оказывают различия в показателях вязкости взаимовытесняющих растворов.

Исследованию данного класса задач посвящены многочисленные работы фундаментального характера (Чарный, 1963; Bear, 1972; Веригин, Саркисян, 1974). Предельно упрощенным и в то же время базовым может считаться решение об «опрокидывании» исходно вертикальной границы раздела жидкостей в неограниченном пласте ($-\infty < x < \infty$)

$$z(x, t = 0) = \begin{cases} H, & x \leq x_0 \\ 0, & x > x_0 \end{cases} \quad (10.1)$$

в предпосылке отсутствия гидравлического градиента ($v = 0$, $q = vH = 0$) — рис. 10.2. Это решение имеет вид линейной функции на отрезке $[x_1(t), x_2(t)]$ (Gemitzi, Tolikas, 2004):

$$z(x, t) = \begin{cases} \frac{x_2(t) - x}{x_2(t) - x_1(t)} H, & x \leq x_1(t) \\ \frac{x_2(t) - x}{x_2(t) - x_1(t)} H, & x_1(t) < x < x_2(t). \\ 0, & x \geq x_2(t), \end{cases} \quad (10.2)$$

$$x_1(t) = x_0 - \sqrt{\frac{kH\Delta\rho t}{n}}, \quad x_2(t) = x_0 + \sqrt{\frac{kH\Delta\rho t}{n}}, \quad (10.2a)$$

где k — коэффициент фильтрации, H — мощность пласта.

Линейный вид функция $z(x, t)$ сохраняет и при плоскопараллельном вытеснении легкой воды водой с повышенной плотностью. В этом случае координата x_0 получает приращение vt/n , так что x_1 и x_2 определяются зависимостями

$$\begin{aligned} x_1(t) &= x_0 + \frac{vt}{n} - \sqrt{\frac{kH\Delta\bar{\rho}t}{n}}, \\ x_2(t) &= x_0 + \frac{vt}{n} + \sqrt{\frac{kH\Delta\bar{\rho}t}{n}}, \end{aligned} \quad (10.26)$$

откуда длина проекции контакта вод на горизонтальную плоскость будет

$$\Delta x_p = x_2 - x_1 = 2\sqrt{\frac{kH\Delta\bar{\rho}t}{n}}. \quad (10.2в)$$

К близким результатам приводят и более строгие решения задачи взаимного вытеснения растворов, различающихся плотностью.

Доминирующая роль гравитационной составляющей потока соленых вод, сконцентрированных вблизи подошвы водоносного горизонта, приводит к тому, что уклон этой подошвы при значениях, превышающих гидродинамические градиенты пластовых вод, становится доминирующим фактором (при прочих равных условиях), контролирующим направление развития интрузии плотных растворов (см. пример в разд. 10.2.2). В определенных условиях, при выполнении соотношения $I_f/I_s \approx \Delta\bar{\rho}$, линза плотного раствора, находящаяся на наклонном водоупоре, может находиться в состоянии динамического равновесия (рис. 10.3); здесь: I_f — градиент фильтрационного потока, направленного навстречу направлению падения водоупорного основания горизонта, I_s — уклон падения.

При малых расходах утечек тяжелых растворов из поверхностных бассейнов в сравнении с расходами естественного фильтрационного потока гидродинамика последнего может меняться: интрузия плотных вод в основании горизонта уменьшает его «проходное» сечение по чистой воде и как следствие — эффективную проводимость пласта. В ряде случаев это приводит к подпору естественного фильтрационного потока вплоть до изменения его направления.

Весьма специфичен также механизм фильтрации тяжелых растворов от поверхностных бассейнов до подошвы горизонта:

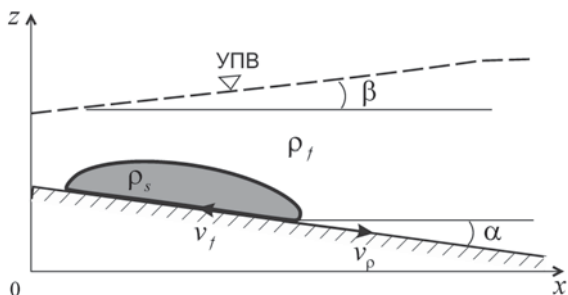


Рис. 10.3. Схематическое представление о гидродинамическом равновесии «линзы» рассола на наклонном водоупорном основании.

интрузия плотных вод развивается не сплошным потоком, а в виде отдельных «струй» даже в условиях однородного по проницаемости разреза (эффект «фингеринга» — рис. 10.4).

Особой сложностью физико-математического описания отличаются процессы плотностной конвекции в неоднородных

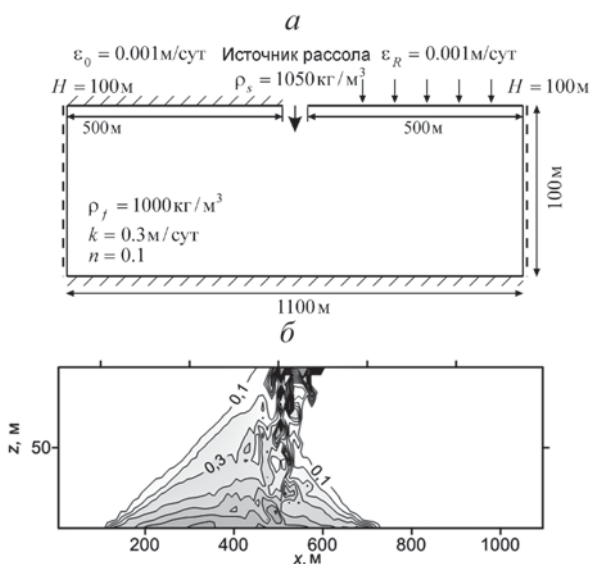


Рис. 10.4. Схема численного эксперимента — утечка рассола из несовершенного бассейна (гомогенный водоносный горизонт) (а). Результаты моделирования миграции рассола на численной программе МОСЗDD ($dx = 10$ м, $dz = 5$ м) (б); расчетное время — 15 000 сут (Румынин, 2011).

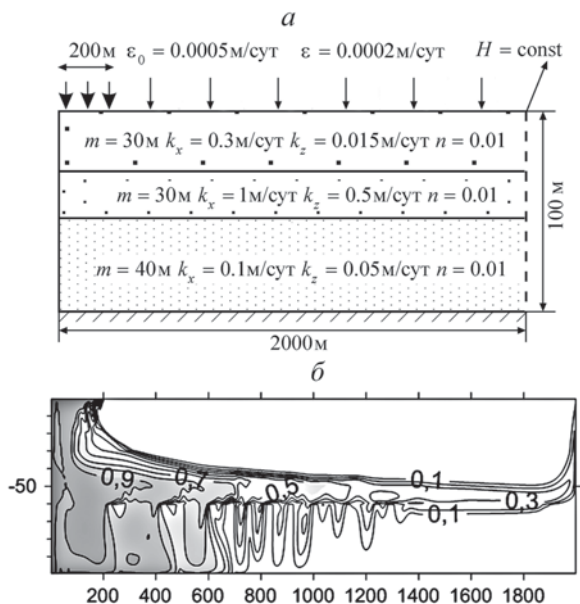


Рис. 10.5. Схема численного эксперимента для слоистой толщи (а). Результаты численного моделирования (TOUGH2/EOS7, 5×1 м) (б); расчетное время — 5200 сут (Румынин, 2011).

по проницаемости породах. В этих условиях различия в плотностях жидкостей вызывают усиление межслоевого массообмена, что существенно меняет представления об интенсивности и направленности конвекции в хорошо проницаемых слоях (рис. 10.5).

Приведенные примеры показывают ряд специфических черт реальных миграционных процессов, всестороннее исследование которых крайне затруднительно без привлечения аппарата математического (численного) моделирования.

10.2. Изучение и прогноз процессов засоления подземных вод на Верхнекамском месторождении калийно-магниевых солей

Верхнекамское месторождение калийно-магниевых солей (ВКМКС) входит в пятерку крупнейших месторождений калийных солей в мире. Его разработка ведется подземным способом на рудниках Усольского и Соликамского районов Пермско-

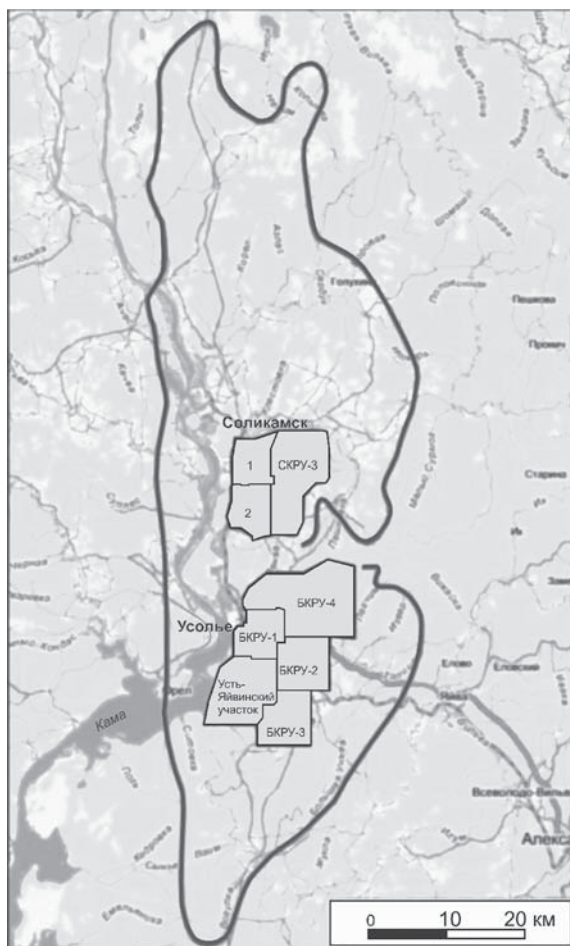


Рис. 10.6. Схема Верхнекамского месторождения калийно-магниевых солей с расположением участков его отработки Соликамскими и Березниковскими калийными рудоуправлениями.

го края. В настоящее время добыча и обогащение солей производится тремя соликамскими калийными рудоуправлениями — СКРУ-1 и СКРУ-2, СКРУ-3 и двумя березниковскими — БКРУ-2, БКРУ-4 (рис. 10.6). С 2011 г. все рудоуправления входят в состав объединенной компании ПАО «Уралкалий». Калийные предприятия включают в свой состав как рудники, ведущие подземную добычу сильвинито-карналлитовых руд и каменной соли, так и обогатительные фабрики по их переработке.

По некоторым оценкам, на территории ВКМКС накоплено более 270 млн т галитовых отходов и более 30 млн м³ глинисто-солевых шламов (Бачурин, Бобошко, 2008).

Основными проблемами освоения запасов калийных солей ВКМКС являются обеспечение защиты рудников от затопления, комплексное освоение его недр и охрана окружающей среды, прежде всего природных вод, от засоления.

Наиболее серьезные и вместе с тем достаточно типичные изменения в естественном гидрохимическом режиме подземных вод на рассматриваемой территории наблюдается в пределах шахтных полей БКРУ-2 и СКРУ-3, где загрязнение подземных и поверхностных вод вызвано в первую очередь утечками рассолов из шламохранилищ, где складировются отходы обогащения калийных солей — соляно-глинистая пульпа с исходной минерализацией в жидкой фазе до 250—350 г/л. Именно потери на фильтрацию рассолов хлоридного натриевого состава с повышенной плотностью и приводят к наиболее существенному загрязнению прилегающих участков местных водоносных горизонтов и водотоков.

10.2.1. Участок шахтного поля БКРУ-2

10.2.1.1. Общая характеристика процесса засоления подземных вод

Природная гидрогеологическая обстановка этого участка представляется достаточно простой (рис. 10.7): основные водоносные горизонты связаны с пермскими образованиями — терригенно-карбонатовой толщей (ТКТ) мощностью около 100 м и залегающими на ней литифицированными песчано-глинистыми породами — так называемой пестроцветной толщей (ПЦТ), обводненная мощность которой около 30 м. Относительным водупором служат породы соляно-мергельной толщи (СМТ) в нижней части разреза.

Коллекторами подземных вод являются известняки, мергели, песчаники, т. е. трещиноватые породы с достаточно выраженной двойной пористостью (пористость блоков составляет 10—15 %, что более чем на порядок превышает значение активной трещиноватости пород); коэффициент фильтрации водоносных пород — единицы метров в сутки.

О масштабах и характере начавшегося процесса загрязнения водоносного массива можно судить на основе данных, полученных в ходе режимных наблюдений, бурения и опробо-

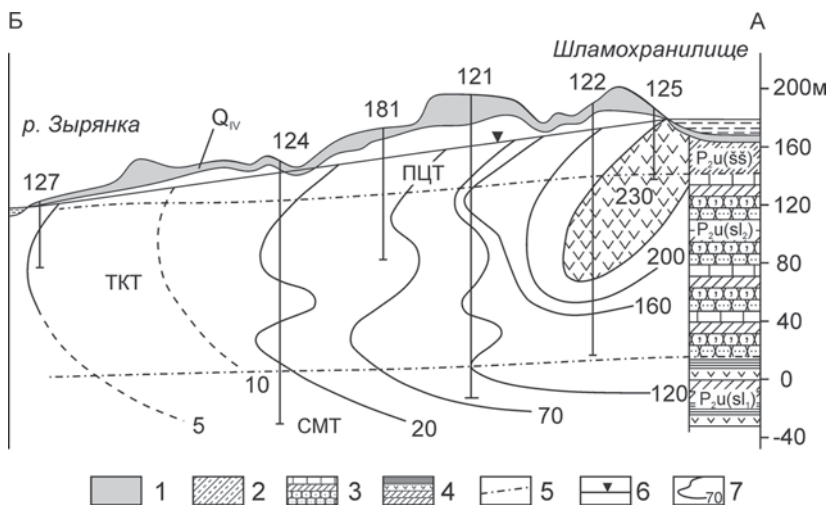


Рис. 10.7. Схематическая геологическая колонка (справа у шкалы а. о.) и изолинии минерализации воды по линии скв. 125—127 участка засоления подземных вод БКРУ-2 (рис. 10.8).

1 — суглинки; 2 — аргиллиты, алевролиты, песчаники; 3 — известняки, песчаники; 4 — мергели с прослоями солей; 5 — стратиграфическая граница; 6 — уровень подземных вод; 7 — изолинии общей минерализации (г/л).

вания разведочных скважин, а также в результате гидрогеологической съемки и геофизических работ. Шламохранилище было введено в эксплуатацию в конце 1962 г. К началу 1972 г. уже появились первые признаки засоления верхней части горизонта, прослеженного на глубину до 30—40 м на расстояниях до 250 м к северу от уреза рассолов. В сентябре 1972 г. следы рассолов были обнаружены в 2000 м севернее шламохранилища, а в сентябре 1973 г. началось прогрессирующее повышение минерализации воды в р. Зырянке и в Верхнезырянском водохранилище, расположенном в 3.5 км к северу от шламохранилища.

В плане (рис. 10.8) поперечные размеры ореола росли по направлению подземного потока: ширина области засоления подземных вод от источника загрязнения к местам их естественной разгрузки увеличивалась примерно в 2—2.5 раза (соответственно от 800 до 2500 м) при расстоянии между бассейном промстоков и рекой около 3500 м. Это обстоятельство свидетельствует о широком развитии в трещиноватых породах процессов планового поперечного перераспределения вещества — смешения техногенных рассолов и естественных вод. Эти процессы развива-

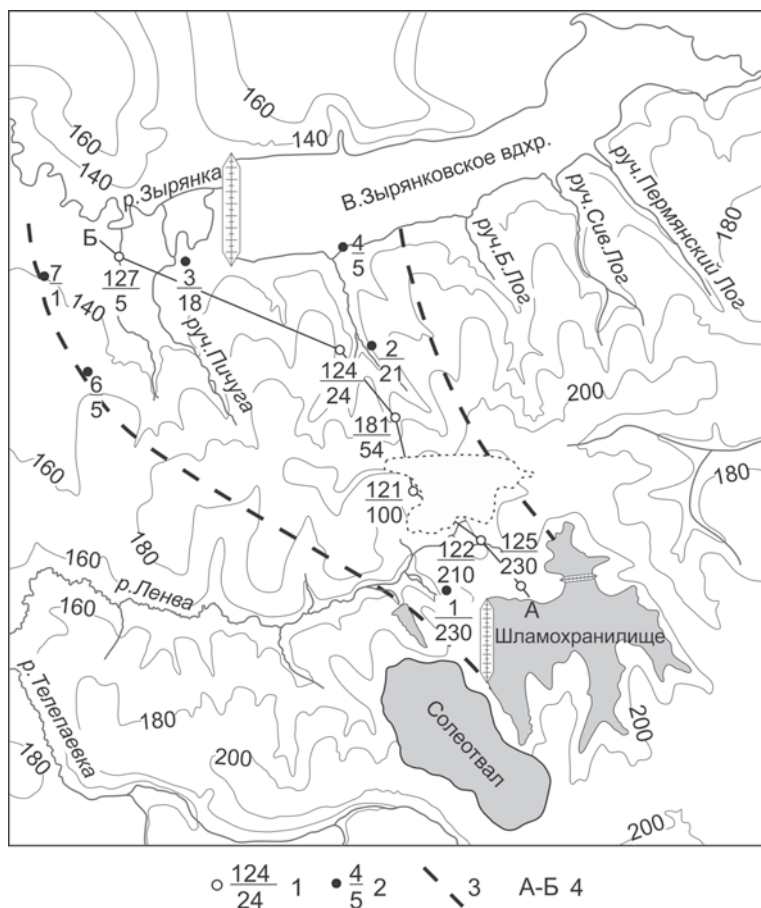


Рис. 10.8. Ореол засоления подземных вод (в плане) на участке шламохранилище—долина реки (1986 г.).

1 — скважина (в числителе — номер, в знаменателе — минерализация, г/л); 2 — источник (в числителе — номер, в знаменателе — минерализация, г/л); 3 — установленная граница ореола загрязнения в плане; 4 — линия разреза (рис. 10.7).

ются при ограниченном влиянии утечек из бассейна на общую структуру естественного фильтрационного поля: удельные потери на фильтрацию соизмеримы с удельным расходом регионального потока.

В профильном строении ореола (см. рис. 10.7) отмечалась существенная неоднородность гидрохимического разреза, причем наиболее сильную деформацию миграционный поток претерпевал вблизи источника загрязнения. В этой зоне на расстоя-

нии до 800—1000 м от шламохранилища четко выражены изменения минерализации как по горизонтали, так и по вертикали. Обращает на себя внимание интрузия неразбавленных рассолов, образовавшаяся вблизи бассейна. За пределами отмеченной зоны значимы лишь колебания минерализации по горизонтали — происходит довольно резкое уменьшение концентрации всех компонентов по направлению основного потока.

Образование крутопадающей интрузии неразбавленных рассолов вблизи водоема свидетельствует о том, что направленность процесса миграции определяется здесь в значительной степени развитием гравитационной конвекции, вызванной различиями в плоскостях сточных и пластовых вод. Интенсивность загрязнения подземных вод существенно замедляется благодаря буферным свойствам гетерогенной среды с двойной емкостью: значительный объем соли, поступающей в пласт, идет на насыщение пористых блоков трещиноватых пород.

Наряду с этим в период эксплуатации хвостохранилища отчетливо проявились дополнительные факторы, увеличившие активность загрязнения подземных вод. Так, образование техногенной трещиноватости в процессе сдвижения пород при их подработке подземными горными выработками способствовало усилению интенсивности солепереноса в пластовых условиях. В зону активного сдвижения также, возможно, попал участок шламохранилища, что привело к нарушению сплошности его экрана и соответственно усилению степени гидродинамической взаимосвязи прометок с подземными водами. Техногенные изменения проницаемости глинистых экранов, т. е. потеря ими водоупорных свойств, связаны также с их физико-химической деструкцией в результате взаимодействия концентрированных растворов с глинистыми отложениями (Дашко и др., 1985).

Несмотря на длительное протекание рассматриваемых процессов засоления, они, возможно, еще далеки от стабилизации и требуют как внимательных миграционных прогнозов (с учетом важного фактора — плотностной конвекции), так и тщательного обоснования водоохраных мероприятий. Для изучения процессов засоления подземных вод был проведен комплекс специализированных полевых и лабораторных исследований; среди них: крупномасштабная гидрохимическая съемка; лабораторное изучение миграции в пористых блоках карбонатных пород и в экраняющих грунтах; опытно-миграционные опробования; термозондирование донных отложений для выявления главных участков инфильтрации рассолов и ее интенсивности; ВЭЗ для оконтуривания ореола засоления; многократное гидрохимиче-

ское опробование скважин режимной сети и поверхностных источников; физическое моделирование миграционного процесса; аналитические и модельные прогнозные оценки; обоснование водоохраных мероприятий.

10.2.1.2. Изучение плановой геометрии ореолов засоления методами поверхностной геофизики

Большая разница между фоновой и наведенной минерализацией подземных вод, достигающая 1—3 порядков, предопределила возможность использования на этом участке метода ВЭЗ для оконтуривания границ ореолов вместо дорогостоящего бурения скважин и гидрохимического опробования (рис. 10.9).

При геоэлектрической схематизации условий участка учитывались следующие обстоятельства. Для участков с фоновой минерализацией подземных вод характерно трехслойное геоэлектрическое строение разреза: верхний слой (пестроцветная и терригенно-карбонатная толщи) с удельным электрическим сопротивлением пород $\rho = 4—6 \text{ Ом} \cdot \text{м}$; глинисто-мергельная толща с пониженным сопротивлением (за счет присутствия естественных соленых вод); пласты каменной соли с сопротивлением в несколько килоом-метров. Наличие в разрезе промстоков с повышенной минерализацией должно приводить к уменьшению мощности первого слоя.

Перед началом геоэлектрической съемки выполнялась калибровка кривых ВЭЗ на фоновых (незасоленных) и на заведомо засоленных участках. Сопоставление с данными гидрохимического опробования скважин и

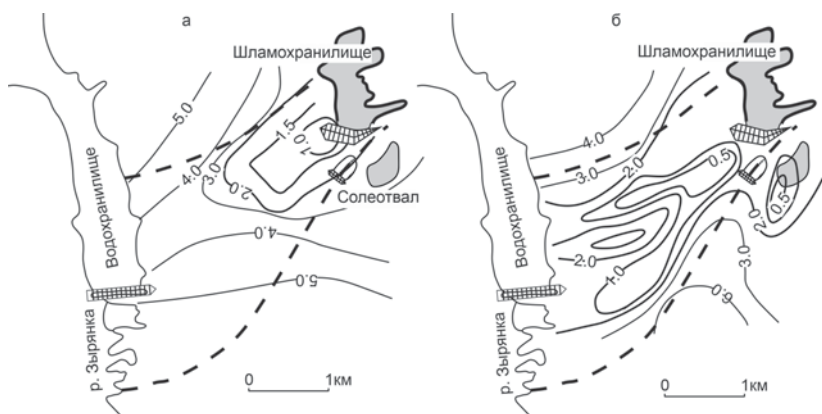


Рис. 10.9. Карта кажущихся электрических сопротивлений ($\text{Ом} \cdot \text{м}$), в пределах ореола засоления пород терригенно-карбонатной (а) и пестроцветной (б) толщах; пунктир — условная граница ореола (Щемелинин, 1983).

источников позволило установить контрольную для данного участка цифру кажущегося электрического сопротивления ($\rho = 2 \text{ Ом} \cdot \text{м}$), приближенно отвечающую границе раздела пресных и соленых вод. Полевые измерения проводились четырехэлектродной установкой по стандартной методике. Интерпретация результатов показала, что геоэлектрические разрезы носят в основном многослойный характер, что свидетельствует о наличии «языков» засоления как в пестроцветной, так и в терригенно-карбонатной толщах. В пределах пестроцветной тоще (рис. 10.9, а) зона пониженных сопротивлений ($\rho \leq 2 \text{ Ом} \cdot \text{м}$), отвечающая области распространения техногенных рассолов оттягивается от источника засоления (шламохранилище) до области разгрузки (водохранилище). В терригенно-карбонатной толще ВЭЗ выполнялись по подошве водоносного горизонта и оконтурили только «интрузию» рассолов, «язык» которой был прослежен на расстояние до 2.0 км от шламохранилища в сторону области разгрузки (рис. 10.9, б). Ниже по подземному потоку в терригенно-карбонатной толще метод ВЭЗ оказался слабочувствительным: загрязненные воды в этой толще здесь ВЭЗ не зафиксированы, хотя бурением (скв. 123г и 127г) они вскрыты и непосредственно вблизи области разгрузки. Порог чувствительности (по минерализации) проявился на уровне около 10 г/л. В целом полученные результаты (рис. 10.9) позволили составить достаточно четкое представление о плановых границах ореола засоления подземных вод на шахтном поле БКРУ-2.

10.2.1.3. Гидрогеохимические преобразования рассолов в пластовых условиях

Для рассолов в шламохранилище, имеющих минерализацию около 230 г/л, характерен следующий состав: Na^+ — 2552, K^+ — 952, Ca — 98, Mg — 150, Cl — 3668 мг-экв/л (исходный раствор содержит некоторое количество — до 100 мг-экв/л — других аниогенных и катиогенных элементов).

Рассмотрим закономерности распределения основных компонентов по главному гидрохимическому профилю АВ, совпадающему примерно с осевой линией ореола засоления подземных вод (рис. 10.10). Прежде всего обращают на себя внимание резкие различия в общем характере графиков зависимости концентрации основных компонентов от расстояния между щелочными металлами (калием и натрием), с одной стороны, и щелочно-земельными (кальцием и магнием) — с другой (рис. 10.10): для первых типично уменьшение относительных концентраций от исходных значений (вблизи бассейна) до фоновых (в области разгрузки фильтрационного потока), а для вторых характерно экстремальное поведение кривых, выражающееся в изменении знака градиента концентрации по потоку подземных вод. Пиковые значения в несколько раз превышают как фоновые концентрации катионов, так и их исходные концентрации в бассейне промстоков.

Интенсивность продвижения ионов калия и натрия заметно ниже скорости переноса хлоридов; это свидетельствует, очевидно, о частичном по-

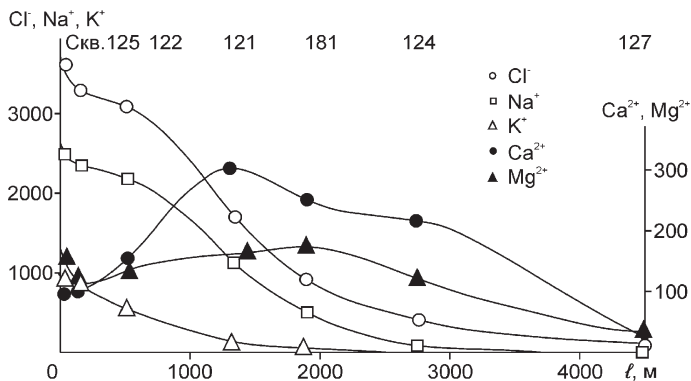


Рис. 10.10. Характер изменения концентрации химических компонентов (мг-экв/л) по оси ореола загрязнения подземных вод.

глошении щелочных элементов породой, причем активность такого рода процессов для ионов калия заметно выше, чем для ионов натрия. Так как одновременно с падением содержания в пластовой воде упомянутых катионов происходит увеличение концентрации ионов кальция и в меньшей степени магния, то логично предположить, что наблюдаемые процессы носят ионообменный характер; они приводят к смене первоначального состава обменного комплекса и к обогащению растворов кальцием и магнием в передней части ореола. Не исключено, что определенный вклад здесь вносят процессы растворения (интенсифицирующиеся с ростом общей минерализации воды), но ясно, что в данных условиях они не являются доминирующими, поскольку контролируются низкой растворимостью карбонатов и силикатов.

В целом данные наблюдений иллюстрируют принципиальную возможность глубокой метаморфизации состава растворов в потоках подземных вод.

10.2.2. Участок шахтного поля СКРУ-3

10.2.2.1. Общая характеристика процесса

Рассматриваемый участок расположен в центральной части Верхнекамского месторождения калийных солей (рис. 10.11). Начиная с 1983 г. основным источником загрязнения подземных и поверхностных вод на территории шахтного поля СКРУ-3 является шламохранилище долинного типа, расположенное в верховьях ручья Архангельский Лог. Оно предназначено для складирования твердых глинистых шламов и хранения рассолов, поступающих с флотофабрики и с участка солеотвала (рис. 10.11). Площадь, занимаемая шламохранилищем, пример-

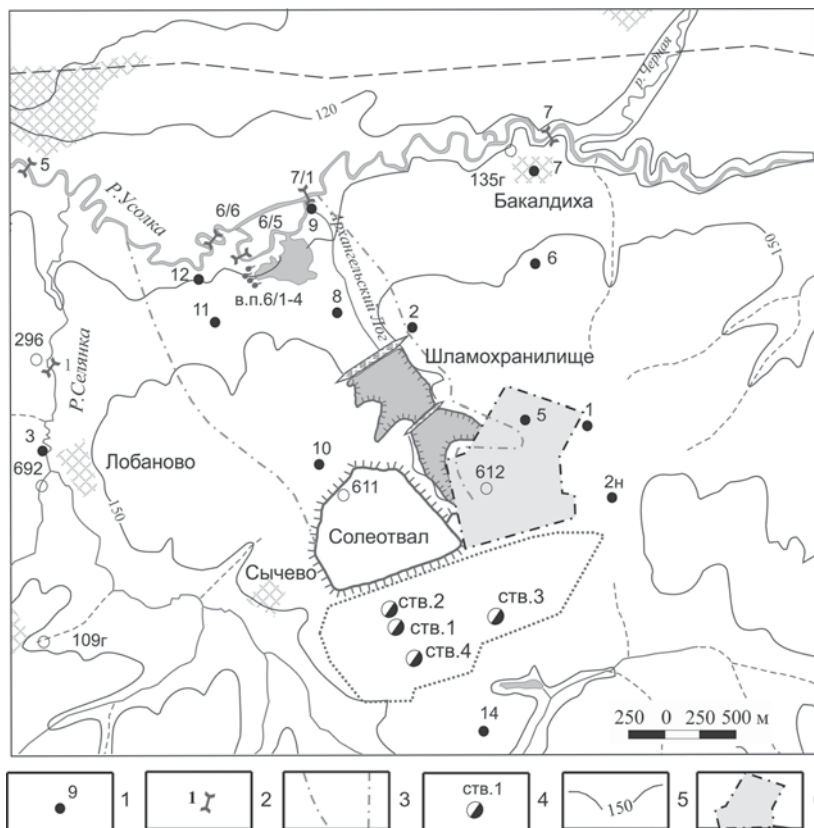


Рис. 10.11. Схема расположения источника загрязнения, скважин и гидропостов режимной сети (по состоянию на 2008 г.).

1 — скважины; 2 — гидропосты; 3 — стационарный ореол засоления (ореол рассеяния); 4 — шахтные стволы; 5 — изолинии рельефа; 6 — контур под расширение солеотвала; 7 — родники в борту карьера (Техногенного озера).

но 100 га, а его емкость — около 9.6 млн м³. Минерализация рассолов хлоридного натриево-калиевого состава колеблется от 250 до 340 г/л. Их плотность 1.17—1.19 г/см³.

Потери рассолов на инфильтрацию составляют 3150 м³/сут (1996—2006 гг.). Ореол засоления, картируемый по результатам отбора проб из скважин режимной сети и родников, а также проб поверхностных (речных) вод, достиг местной зоны разгрузки — р. Усолки (рис. 10.11).

На участке его размещения в геологическом строении надсолевого комплекса пород принимают участие снизу вверх (рис. 10.12): карбонатно-глинистые отложения мощностью

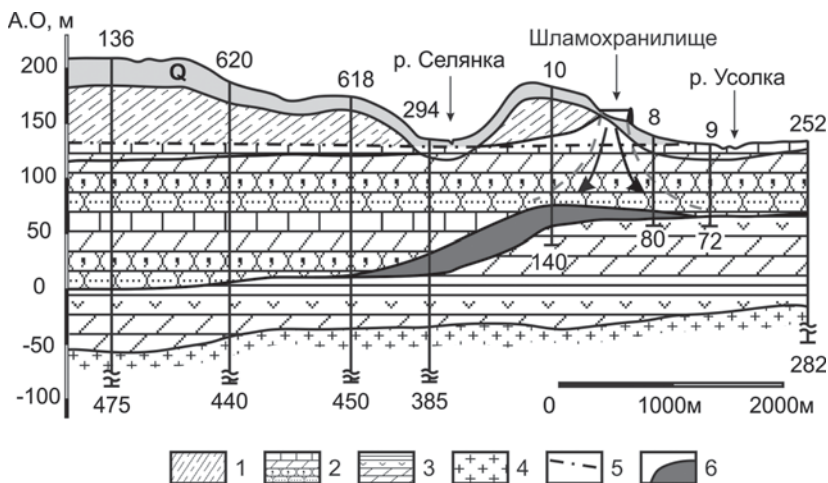


Рис. 10.12. Схематический разрез через тело «интрузии» техногенных рассолов (Макашов, 2010).

1 — ПЦТ; 2 — ТКТ; 3 — СМТ (СМТ₂); 4 — каменная соль; 5 — уровень подземных вод; 6 — интрузия рассолов (20 лет после начала их утечек из шламохранилища).

60—80 м с прослоями и включениями гипса (верхняя часть соляно-мергельной толщи — СМТ); мергели и известняки с прослоями доломитов, песчаников, алевролитов общей мощностью 80—90 м (терригенно-карбонатная толща — ТКТ); элювиальные глины с дресвой и щебнем (до 25—30 м), супесчано-суглинистые, флювиогляциальные, покровные делювиальные и аллювиальные отложения четвертичного возраста (Q) мощностью до 5—16 м. Первый от поверхности выдержанный водоносный горизонт приурочен к трещиноватым известнякам, песчаникам и мергелям ТКТ. Относительно рассолов шламохранилища уровень подземных вод устанавливается на более низких отметках (117—118 м). Это обстоятельство определяет подвешенный режим фильтрации, при котором утечки рассолов возможны на любом участке основания накопителя. Скорее всего, основная зона фильтрации рассолов находится в нижнем отсеке, где мощность экранирующих шламов минимальна, а мощность слоя рассолов максимальна. Естественный геофильтрационный поток имеет северо-западное направление в сторону местной дрены — р. Усолки.

В пределах шахтного поля картируется локальная депрессионная структура — Тверитинский прогиб (мульда) — рис. 10.12. Наиболее погруженная часть депрессии, являющаяся нижним

водоупорным основанием ТКТ, расположена на юго-западе относительно источника загрязнения, что потенциально может определить движение рассолов по наклонному водоупору в юго-западном направлении под влиянием плотностного градиента навстречу естественному потоку подземных вод. Собственно Тверитинский прогиб может выступать в качестве естественной емкости для аккумуляции рассолов. Оценка влияния рельефа водоупора на процесс геомиграции техногенных рассолов возможна методами математического моделирования.

10.2.2.2. Данные режимных гидрогеологических наблюдений

В 1996 г. в пределах шахтного поля СКРУ-3 была создана режимная сеть гидрогеологических скважин и гидропостов. В режимную сеть входят тринадцать кустов скважин, оборудованных на верхнюю-среднюю часть терригенно-карбонатной толщи (ни одна из скважин не вскрывает кровлю СМТ), 5 гидропостов на р. Усолке и один гидропост на р. Селянке (рис. 10.13).

Гидрологические наблюдения показывают, что на участке реки между фоновым и замыкающим гидропостами (г/п 7—г/п 5) с 1996 по 2007 г. отмечался прирост минерализации (рис. 10.13 — данные, осредненные в годовом разрезе времени). Концентрация солей в речной воде на фоновом для шахтного поля г/п № 7 в периоды зимней и летне-осенней межени варьировала от 0.28 до 1.61 г/л (1998 г.). На замыкающем г/п № 5 значения минерализации воды составляли от 0.87 (2001 г.) до 3.1 (1998 г.) г/л.

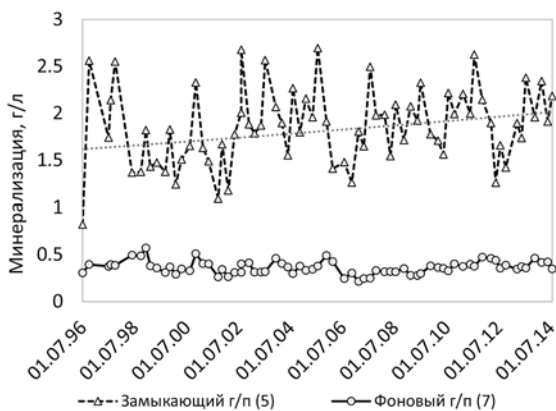


Рис. 10.13. Изменение солевого стока на контролируемом участке р. Усолки.

Поступление солей от объектов хвостового хозяйства в р. Усолку происходит как за счет рассредоточенной разгрузки подземных вод с плановым фильтрационным потоком, так и за счет сосредоточенной родниковой разгрузки загрязненных вод. Основной вклад в формирование химического состава речной воды в пределах шахтного поля СКРУ-3 вносят родники в борту Техногенного озера, соленость воды в них может достигать 25 г/л, при том что суммарный средне-меженный расход родников достаточно высок ($0.7 \text{ м}^3/\text{сек}$) и составляет приблизительно $\frac{1}{4}$ от расхода воды в реке на ближайшем гидропосте (г/п 7/1), расположенном выше по течению.

Данные режимных гидрогеологических наблюдений показывают, что в пределах северного фланга шахтного поля, на участке шламоохранилище—Техногенное озеро, в зоне активного водообмена находится стационарный ореол загрязнения подземных вод (рис. 10.11). Так, в скв. 10/1 и 11/1-5, оборудованных на нижнюю часть ТКТ, стабильно фиксируются высокие значения минерализации (60—80 г/л). Содержание солей в скв. 3/1, 3/2, 9/3, 11/1-3, 10/2, 10/3, 12 и 8/2, оборудованных на среднюю—нижнюю часть ТКТ, в целом ниже, хотя и в них периодически наблюдается рост минерализации до 70 г/л.

10.2.2.3. Анализ геомиграционного процесса

Общий расход фильтрационных потерь можно разделить на две составляющие. К первой составляющей относятся утечки ($Q_{\text{ТКТ}}$), идущие на формирование в нижней части ТКТ обширной подбассейновой «интрузии», содержащей крепкие рассолы с минерализацией 200—300 г/л и мигрирующей в зоне весьма затрудненного водообмена по кровле водоупорной соляной толщи на глубине порядка 100 м. Данная интрузия или ореол растекания предположительно не имеет прямого контакта с поверхностными водами, т. е. разгрузки неразбавленных рассолов в местную гидросеть не происходит.

Ко второй составляющей относятся фильтрационные потери, которые уже в настоящее время оказывают непосредственное влияние на состояние поверхностных и подземных вод в зоне активного водообмена. Загрязнение образуется за счет частичного разбавления и смыва естественным потоком подземных вод фильтрующихся из шламоохранилища техногенных рассолов. При этом формируется ореол рассеяния сильноразбавленных рассолов.

Оценка интенсивности выноса техногенных рассолов в поверхностные воды (Q_p) проведена с привлечением данных гидрологических наблюдений за расходом р. Усолки и солевым составом ее вод в «фоновом» (№ 7) и «замыкающем» (№ 5) гидропостах, а также данных наблюдений за родниковой (минерализация 10—30 г/л) разгрузкой подземных вод (№ 6/5, где фиксируется суммарный расход и родникового стока). Проведенные расчеты показали, что с 1996 по 2000 г. объемы выносимых в реку солей не превышали 21 % от общих объемов утечек из шламоохранилища, при том что интенсивность фильтрации в это время из него была

наиболее высокой. Начиная с 2000 г. разгрузка солей в реку существенно возросла с 21 до 56 %, однако сам источник загрязнения в этот период характеризовался, напротив, снизившейся фильтрацией. Объясняется такое несоответствие, по всей видимости, тем, что при достаточно низких фильтрационных потерях, большая часть рассолов, не успевая достичь приподошвенной зоны водоносного комплекса, «захватывается» естественным потоком подземных вод и мигрирует к месту их разгрузки (в Техногенное озеро). При высоких фильтрационных потерях рассолы достаточно быстро мигрируют в глубь водоносного горизонта, что затрудняет их разбавление и вынос через зону активного водообмена в реку.

Таким образом, можно предположить, что значительная часть фильтрационных потерь рассолов идет на формирование ореола растекания («интрузии»), который мигрирует по кровле водоупорных пород. Остальная часть рассолов переносится от накопителя с потоком подземных вод по наиболее проницаемым зонам и в сильноразбавленном виде разгружается в р. Усолку, образуя стационарный ореол рассеяния. Данные наблюдений показывают, что к концу 1990-х гг. произошла стабилизация границ этого ореола. Его форма и распределение концентрации внутри них с течением времени практически не изменяются. В связи с этим особый интерес представляет прогнозирование формирования глубокозалегающего ореола растекания.

Прогнозные оценки были основаны на математическом моделировании процесса миграции крепких (с минерализацией 250—300 г/л) рассолов в водоносном горизонте со сложным рельефом нижнего водоупорного основания. В качестве вычислительного аппарата использовался программный комплекс DENSFLOW (Коносавский и др., 2002), позволяющий решать сопряженные задачи фильтрации двух жидкостей, имеющих резкую границу раздела, в плановой двухмерной постановке. Алгоритм программы основан на предпосылке Гибена—Герцберга при определении мощности интрузии по напору пресной воды (разд. 6.3.1), так что поверхность интрузии рассолов считается непроницаемой границей для легкой пластовой воды. Предполагается постепенное «наращивание» линзы от подошвы пласта, что возможно при быстром субвертикальном транспорте высокоплотной жидкости под дном бассейна (Румынин, 2011). В качестве водоупорной поверхности принята кровля соляно-мергельной толщи (рис. 10.14), имеющей весьма низкую проницаемость.

Для прогнозного периода (первые десятки лет) утечки рассолов принимались как средние за период с 2000 по 2006 г. Плотность техногенных рассолов с минерализацией 250—300 г/л в соответствии с возможностями программы DENSFLOW вводилась равной 1.19 г/см³. Значение эффективной пористости пород ТКТ принималось равным 0.08, что отвечает полному заполнению пористого пространства солями под влиянием диффузии (предельная асимптотическая модель макродисперсии — см. разд. 3.3.1).

Моделирование показывает, что основная часть техногенных рассолов после их фильтрации из шламохранилища под действием плотностной конвекции погружается в глубь водоносной толщи и продолжает миграцию по кровле водоупора в противоположном от реки направлении

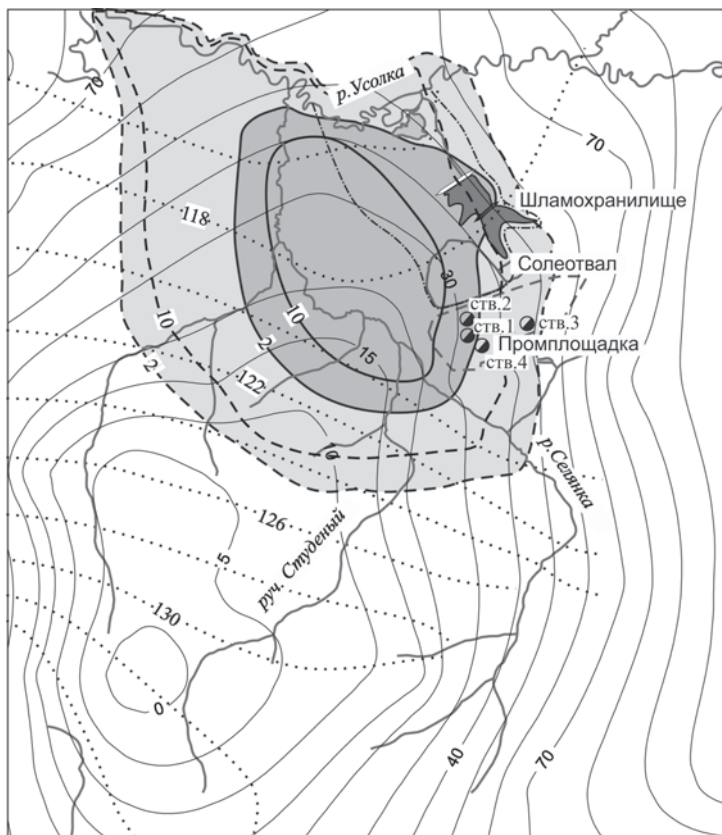


Рис. 10.14. Формирование ореола засоления подземных вод на участке СКРУ-3 (по данным моделирования, Макашов, 2010).

Темно-серый цвет в границах сплошной линии — начальная фаза процесса (примерно 10 лет после начала утечек); светло-серый цвет — примерно 25 лет от начала утечек из шламохранилища. Сплошные изолинии — абсолютные отметки подошвы ТКТ; пунктирные изолинии — поверхность подземных вод ТКТ; штрих-пунктир — ореол рассеяния (рис. 10.11).

(рис. 10.14 и 10.12). Согласно выполненным расчетам, скорость продвижения границ ореола растекания за первые несколько лет от начала фильтрационных потерь составляет 100—300 метров в год. Впоследствии же (для интервала времени 20—25 лет спустя начала процесса), по мере увеличения площади загрязнения, скорость латерального перемещения фронта рассолов не превышает десятки метров в год. Тело солевой интрузии, как и предполагалось, не имеет контакта с руслом р. Усолки. Минимальная мощность слоя незагрязненных пресных вод между ложем реки и линзой рассолов по данным моделирования не превышает 30 м и фиксируется в северо-западной области модели.

Результаты эпигнозных и прогнозных миграционных расчетов, представленные в работе С.Э. Макашова (2010), показали, что гидродинамические и гравитационные силы, действующие на ореол загрязнения, привели его в итоге в статичное положение. «Интрузия» рассолов оказалась как бы «подвешенной» на северо-восточном склоне Тверитинского прогиба (на склоне водоупорной соляно-мергельной толщи). Таким образом, как градиент естественного потока подземных вод, так и уклон кровли водоупорной толщи в данной ситуации являются главными факторами, определяющими характер миграции техногенных рассолов в районе СКРУ-3.

Глава 11

ПОДТЯГИВАНИЯ ГЛУБИННЫХ РАССОЛОВ К КОНТУРАМ ДРЕНАЖА (НА ПРИМЕРЕ КОРШУНОВСКОГО ЖЕЛЕЗОРУДНОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ, ВОСТОЧНАЯ СИБИРЬ)

Рассмотренный в разд. 6.2.1 на уровне модельного анализа миграционный процесс субвертикальной миграции соленых вод в значительной степени идеализирован, ибо в природных условиях существует целый ряд факторов, приводящих к отклонению от рассмотренных расчетных схем. Среди этих факторов — такие как влияние плановой и профильной фильтрационной неоднородности, наличие дополнительных источников питания и разгрузки подземных вод, сложный характер граничных условий, наличие переходной («диффузионной») зоны между пресными и солеными водами и др. Одной из иллюстраций особенностей засоления приповерхностных горизонтов при подтягивании глубинных соленых вод, а также сложностей прогнозных оценок в этих условиях может служить опыт освоения Коршунковского железорудного месторождения.

Одной из задач последующего анализа является оценка влияния переменной (меняющейся по глубине) плотности природных растворов на интенсивность засоления дренажных вод глубинными рассолами. Другая задача — исследовать роль профильной неоднородности пласта, с влиянием которой связывается резко нелинейный характер наблюдаемых графиков роста минерализации дренажных вод в многолетнем разрезе времени. Такой тип графиков, резко отличающийся от теоретических за-

висимостей для идеализированных потоков в однородных средах, может объясняться изменением базиса дренирования водоносной толщи, при котором вскрываются зоны разреза, различающиеся по фильтрационным свойствам.

11.1. Дренажные мероприятия и режим подземных вод, нарушенный горными работами

11.1.1. Основные водоносные горизонты

В разрезе водоносных пород, обрамляющих разрабатываемое рудное тело (рис. 11.1 и 11.3) и принимающих участие в формировании притоков соленых вод к внутрикарьерной системе дренажа, выделяются два основных водоносных горизонта, различающихся по фильтрационным параметрам и показателям качества подземных вод:

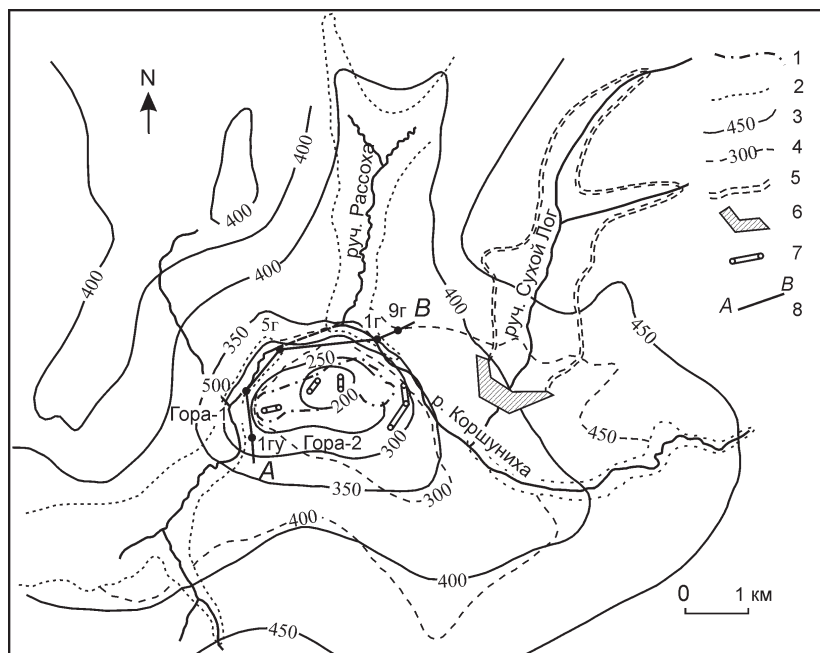


Рис. 11.1. Гидрогеологическая схема Коршуновского железорудного месторождения.

1 — граница рудной залежи; 2 — граница обнажения пород верхоленской формации; 3 — гидроизогипсы, м (1996 г.); 4 — изолинии кровли верхоленских отложений; 5 — хвостохранилище; 6 — дамба хвостохранилища; 7 — дренажные системы; 8 — линия разреза (рис. 11.3).

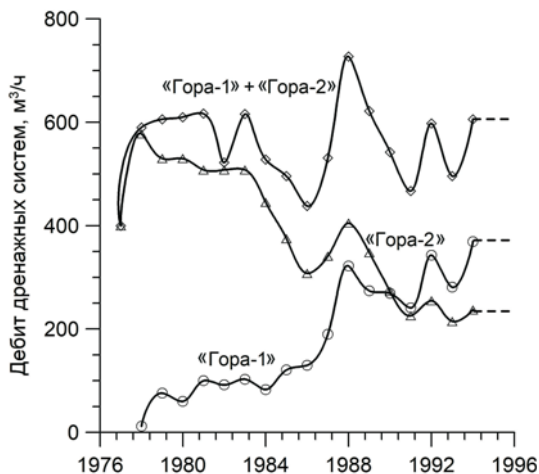


Рис. 11.2. Среднегодовая производительность дренажных систем внутри-карьерного поля.

— водоносный горизонт верхоленской свиты средне-позднекембрийского возраста, приуроченный к пестроцветным породам (чередование известняков, мергелей, аргиллитов, песчаников суммарной мощностью 550—600 м), коэффициенты фильтрации трещиноватых пород 0.01—0.5 м/сут, среднее значение — 0.25 м/сут;

— объединенный водоносный горизонт литвинцевской и ангарской свит, связанный с карбонатными соленосными породами нижнего кембрия, обладающими пониженной проницаемостью (коэффициенты фильтрации не превышают 0.1 м/сут).

С 1973—1974 г. решение проблем эффективного дренажа карьера шло по пути создания узлов скважин локального водопонижения по предварительно взорванной массе крепких руд (искусственные дрены), сконцентрированных на двух участках рудной залежи с условными названиями «Гора-1» и «Гора-2».

С 1977 по 1988 г. наблюдалось плавное нарастание объемов водопритоков к дренажным устройствам на участке «Гора-1» при одновременном уменьшении водопритока к дренажной системе «Гора-2» (рис. 11.2). При этом суммарный водоприток оставался примерно на одном и том же уровне (500—600 м³/ч), который сохраняется до конца 1990-х—начала 2000-х гг. При эксплуатации этих скважин фактически достигается конечное снижение уровня подземных вод ниже дна карьера, что в подавляющем большинстве случаев обеспечивает обработку рудных горизонтов практически в сухих условиях. Однако локализация водопритоков инициировала подтягивание к системам внутрикарьерного дренажа глубинных соленых вод.

11.1.2. Естественная гидрохимическая зональность

На территории Коршуновского месторождения широко распространены породы карбонатного состава, а также соленосные формации, в состав которых входят каменная соль и гипс, что обуславливает химический состав и минерализацию подземных вод. Для водоносных горизонтов Коршуновского месторождения установлена четко выраженная вертикальная гидрохимическая зональность (рис. 11.3): рост минерализации подземных вод с глубиной связан с увеличением степени засоленности пород и затрудненным режимом водообмена в нижних зонах разреза.

Максимальную минерализацию (около 350 г/л) имеют воды литвинцевского и ангарского водоносных горизонтов, вскрытые на глубинах 600—700 м (абсолютная отметка кровли около -350 м). Граница между слабо (< 3—5 г/л) и сильно минерализованными (> 100 г/л) водами довольно контрастная; нарастание концентрации по глубине в пределах переходной зоны $C(z)$ имеет экспоненциальный характер (Мироненко, Румынин, 1999). С увеличением глубины не только возрастает суммарное содержание компонентов, но меняется и тип подземных вод, определяя в целом ярко выраженную для всего разреза водоносной толщи гидрохимическую зональность (рис. 11.3). Наблюдаемая естественная гидрохимическая зональность подземных вод, как уже сказано, оказалась крайне неблагоприятной с точки зрения экологических последствий эксплуатации месторождения.

С момента создания на месторождении системы локального водопонижения начали отмечаться определенные изменения в химическом составе дренажных вод; по мере углубления карьера вода из скважин становится все более минерализованной (рис. 11.4). График таких изменений

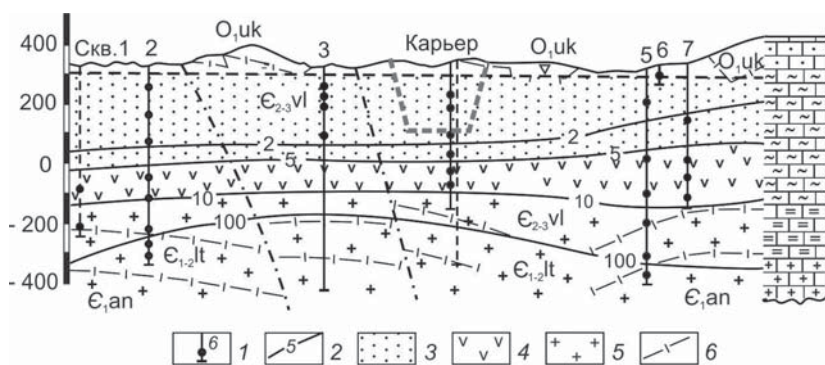


Рис. 11.3. Схема гидрохимической зональности Коршуновского железорудного месторождения. Линия разреза проходит по профилю скважин, обрамляющих рудное тело.

1 — скважины и интервалы опробования; 2 — изолинии минерализации; 3—5 — химический тип вод (Ca-SO_4 , Na-Ca-Cl-SO_4 , Na-Cl соответственно); 6 — границы геологических слоев.

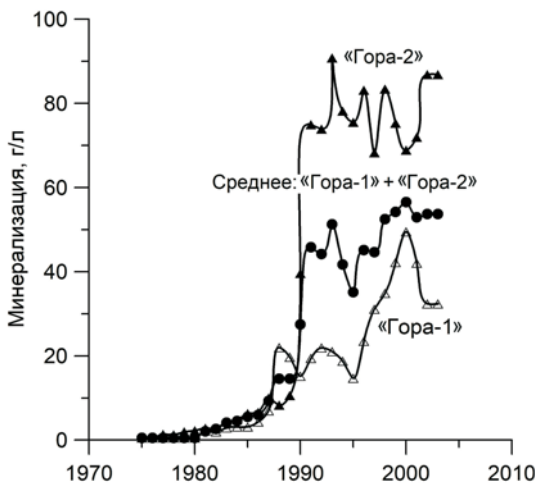


Рис. 11.4. Среднегодовые значения минерализации вод, откачиваемых различными дренажными системами.

построен на основе данных о среднегодовых значениях минерализации дренажных вод, отбираемых различными внутрикарьерными системами водопонижения.

Восходящее движение растворов обусловлено значительным снижением напоров (в настоящее время более чем на 200 м в центре депрессионной воронки) в верхних дренируемых горизонтах, вследствие чего возникли благоприятные условия для разгрузки высоконапорных вод нижнего гидродинамического этажа. Эти растворы, смешиваясь на контурах дренажа с менее минерализованными и пресными подземными водами верхних горизонтов, увеличивают общую минерализацию откачиваемых вод.

11.2. Модельные оценки

Логично предположить, что резкое увеличение темпов нарастания минерализации воды (в период 1986—1988 гг.) обусловлено заглублением дренажных устройств ниже некоторого слабопроницаемого слоя, который долгое время выполнял экранирующую функцию, не позволяя соленым водам разгружаться в карьер (рис. 11.5). Лишь небольшие порции соленых вод могли поступать по узколокальным зонам повышенной проницаемости, обуславливая повышение минерализации воды до 7—10 г/л. Сопоставление графика горных работ и функции минерализации показывает, что такого рода слой-экран должен находиться вблизи отметок $+180 \div +150$ м.

Перед моделированием стояла задача проверки этой рабочей гипотезы, дающей физическое объяснение немонотонному характеру наблюдае-

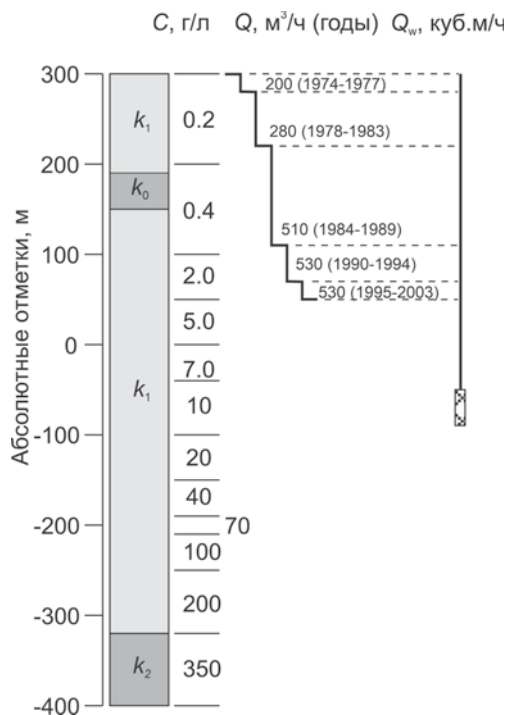


Рис. 11.5. Схема к расчетной оценке субвертикальной миграции рассолов на Коршуновском месторождении.

$k = k(z)$ — коэффициент фильтрации; $C = C(z)$ — минерализация подземных вод; Q — суммарный дебит дренажной системы (в скобках даны временные интервалы, в пределах которых данный дебит сохранялся постоянным); «ступеньки» ломаной линии соответствуют глубине карьера на конец рассматриваемого временного периода; вертикальная линия — опытная скважина на удалении от карьера (Q_w — дебит скважины).

мого роста минерализации подземных вод, отбираемых системами дренажа в пределах карьерного поля. Одновременно полезным представлялось определение влияния вертикального градиента плотности на функцию минерализации. Имея в виду концептуальный характер оценок, можно ограничиться постановкой задачи в цилиндрических координатах.

11.2.1. Схематизация и численная модель

Водозаборные узлы в пределах двух карьерных зон («Гора-1» и «Гора-2») рассматривались в качестве единого (обобщенного) интервала дренирования толщи. Положение этого интервала в пределах модельного разреза дискретно менялось во времени и было увязано с основными этапами освоения месторождения. Длина интервала отвечала примерно сред-

ней величине заглубления карьера за определенные промежутки времени, которые ассоциировались с модельными «стресс-периодами» (рис. 11.5). По сути дела, с учетом цилиндрической симметрии имитировался водоотбор из несовершенной скважины со значительным радиусом, равным среднему радиусу горной выемки, — карьера ($r_k = 200$ м); радиус влияния $R = 10\,000$ м.

Исходная зональность подземных вод по минерализации является сильно неоднородной (рис. 11.5), что обуславливает прогрессирующий рост плотности вод с глубиной. Изменчивость соответствующих характеристик (минерализации, $C(z)$ и плотности, $\rho_s(z)$) была аппроксимирована ступенчатой функцией, включающей 12 фрагментов — «ступенек». Максимальная плотность (12-й фрагмент, где $C = 350$ г/л) = 1300 кг/м³.

Проницаемость (коэффициент фильтрации) k_1 верхоленской свиты в интервале отметок от +300 м (кровля) до -320 м (подошва) по результатам опытных работ и эксплуатационного водопонижения составляет 0.25 м/сут. Однако можно предположить наличие в разрезе верхоленских пород относительно слабопроницаемого прослоя $k_0 < k_1$ в интервале глубин от +190 до +150 м. Именно вскрытие карьером этого слоя могло привести к резкой интенсификации процесса восходящей миграции глубинных рассолов и соответственно к резкому нарастанию минерализации откачиваемых вод. Подстилающие породы литвинцевской свиты имеют коэффициент фильтрации $k_2 = 0.1$ м/сут.

Пористость всей толщ $n = 0.07$. Параметр n опосредованно (эффективно) учитывает блоковую (межтрещинную) емкость фильтрующей среды.

Профильная структура модели была представлена 70 модельными слоями по 10 м мощностью каждый. В плане размер цилиндрических блоков менялся по логарифмическому закону — от 200 м (1-й блок — карьер) до 513 м (30-й блок — граничный). Задача решалась в напорной постановке на программном комплексе TOUGH2.

11.2.2. Результаты моделирования

Моделирование сводилось к подбору проницаемости слабопроницаемого слоя k_0 . В качестве целевой функции использовался график изменения средней минерализации воды $C(t)$, отбираемой дренажной системой (рис. 11.6). Удовлетворительное совпадение модельных результатов с фактической кривой $C(t)$ было достигнуто при значении параметра $k_0 = 0.005$ м/сут (рис. 11.6). Как видно, расчетная кривая характеризуется резким нарастанием скорости увеличения минерализации воды в период 1986—1988 гг. вскрытия контуром дренирования кровли отложений, подстилающих слабопроницаемый слой.

На графике приведен также расчет, сделанный в предпосылке о постоянной плотности подземных вод: $\rho_s = \rho_f = 1000$ кг/м³. В этом случае можно наблюдать сильное несоответствие модельных и натурных данных — в сторону завышения значений расчетных концентраций.

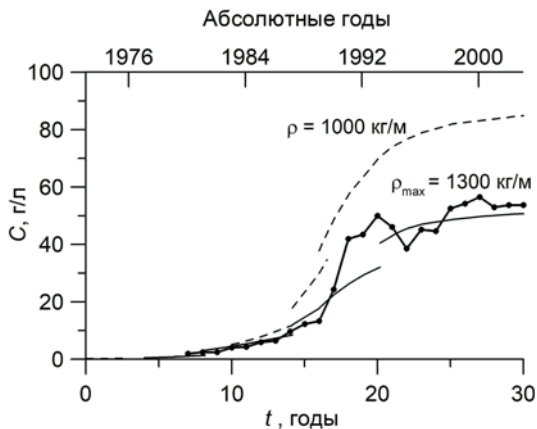


Рис. 11.6. Сопоставление модельных расчетов и данных наблюдений за средней минерализацией (точки на кривой).

$\rho = \rho(z)$ — сплошная линия; $\rho = \rho_f = \text{const}$ — штриховая линия.

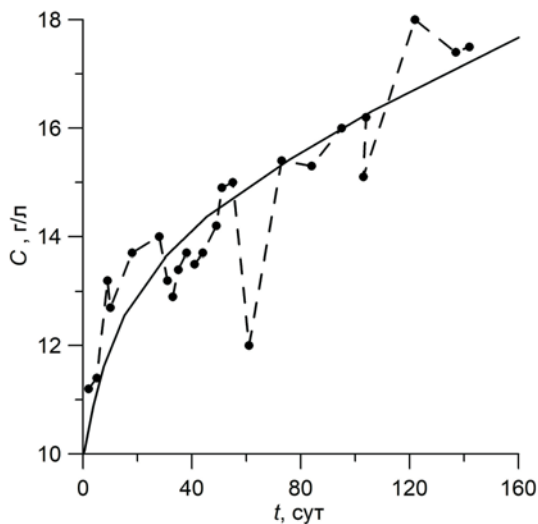


Рис. 11.7. Модельная интерпретация результатов продолжительной откачки.

Точками показаны замеры минерализации в откачиваемой воде.

11.2.3. Интерпретация данных откачки

Справедливость предпосылок схематизации и корректность выбранных параметров были подтверждены данными моделирования длительной (5-месячной) откачки из скважины, находящейся на удалении от карьера (рис. 11.5); фильтр скважины находился в интервале глубин $-350 \text{ м} \div -390 \text{ м}$; дебит откачки $1040 \text{ м}^3/\text{сут}$; за время откачки минерализация воды выросла примерно от 10.5 до 17.5 г/л. Скважина моделировалась четырьмя блоками (по 10 м каждый). Осреднение концентрации проводилось по двум нижним блокам. Как видно из рис. 11.7, модельный график удовлетворительно описывает зарегистрированные в опыте тенденции изменения минерализации воды.

В целом данные наблюдений за перераспределением растворенных солей в водоносном горизонте наряду с регистрацией динамики изменения поля напоров как при опытных откачках, так и процессе эксплуатации гидрогеологических объектов открывает новые возможности калибровки геофильтрационных и миграционных моделей. Очевидно, эффективность такой комплексации повышается за счет привлечения данных изотопных исследований.

Глава 12

ЗАГРЯЗНЕНИЕ ПОДЗЕМНЫХ ВОД РАССОЛАМИ ПРИ ЭКСПЛУАТАЦИИ НЕФТЯНЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ (НА ПРИМЕРЕ ЮГО-ВОСТОЧНЫХ РАЙОНОВ РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН)

Основным источником загрязнения природных вод и почв при эксплуатации нефтяных месторождений в большинстве нефтедобывающих регионов (в частности, в Урало-Поволжском, РФ) являются извлекаемые попутно с нефтью крепкие хлоридные натриевые рассолы общей минерализацией до 250—270 г/л (плотностью $1.15\text{—}1.18 \text{ г}/\text{см}^3$) и повышенным содержанием отдельных микроэлементов (бор, бром, стронций и др.). Большое количество аварий на трубопроводах и эксплуатационных скважинах (рассолы обладают высокой коррозионной активностью по отношению к стальным конструкциям, способствуя потере их герметичности), а также утечки рассолов их поверхностных резервуаров (сборных пунктов, товарных парков, очистных сооружений) приводит к попаданию рассолов в окружающую среду — на земную поверхность и/или непосред-

ственно в геологические слои. Эти рассолы уничтожают или угнетают растительность, засаливают почвы, становятся причиной загрязнения поверхностных и подземных вод, что создает большие экологические проблемы в нефтедобывающих районах. Наиболее ярким примером, иллюстрирующим масштабы и специфику такого рода воздействия на природные условия, является опыт эксплуатации нефтяных месторождений юго-восточных районов Республики Татарстан.

12.1. История техногенного загрязнения подземных вод при освоении нефтяных месторождений региона (Анисимов, Пухов, 2007)

Юго-восток Республики Татарстан до конца 1940-х гг. представлял собой глухие лесостепные сельскохозяйственные районы со слабо развитой местной промышленностью. Сельские населенные пункты располагались преимущественно в долинах малых несудоходных рек: Степной Зай, Ик, Шешма или на их притоках. Реки и родники были чистыми, речная вода широко использовалась населением и была вполне пригодна для хозяйственно-питьевых целей и водопоя скота.

Широкое развитие геологоразведочных работ и нефтедобывающей промышленности в этом регионе началось с 50-х гг. после открытия Шугуровского (1943 г.), Бавлинского (1946 г.) и Ромашкинского (1948 г.) нефтяных месторождений. Позднее нефтедобыча велась на всей восточной части республики, охватывая 21 административный район в Восточном Предкамье и Закамье. Историю освоения нефтяных месторождений и воздействия их на гидросферу региона условно можно разделить на 3 этапа.

Первый этап освоения нефтяных месторождений юго-восточного Татарстана (с начала 1950-х до конца 1960-х гг.) характеризовался бурением большого количества разведочных и эксплуатационных нефтяных скважин, а также строительством многочисленных нефтепроводов и нефтесборных пунктов. Добыча нефти была на уровне 40—50 млн т нефти в год, содержание воды в ней не превышало 2—3 %. Для поддержания давления в нефтяных пластах изымалась значительная часть стока рек (до 200—300 тыс. м³/сут речной воды).

Первые признаки загрязнения подземных вод проявились в середине 60-х гг. и были связаны с «отказами» или нарушениями целостности из-за коррозии эксплуатационных колонн не-

Таблица 12.1

**Изменение показателей химического состава речной воды
в зоне влияния нефтедобычи**

Места отбора проб воды	1951 г. (мг/л)			1970 г. (мг/л)		
	СГ	SO ₄ ²⁻	Минерализация	СГ	SO ₄ ²⁻	Минерализация
р. Бавлинка (р. п. Бавлы)	16	58	523	426	102	1276
р. Мелля (с. Рантамак)	8	226	800	404	369	1480
р. Ик (д. Тумутук)	74	310	926	199	276	1070
р. Степной Зай (д. Св. Озеро)	46	130	486	425	237	1420

фтяных скважин с образованием выходящих на поверхность заколонных перетоков жидкости, а также с авариями на трубопроводах. Изменения химического состава речной воды — характерный показатель воздействия нефтедобычи в этот период (табл. 12.1).

Начало отмечаться также ухудшение качества воды в колодцах деревень, расположенных на надпойменных террасах левого берега р. Степной Зай в центре Ромашкинского нефтяного месторождения. В наследство от первого этапа освоения нефтяных месторождений осталось большое число земляных амбаров, длительное время служивших отстойниками рассола и нефти, около 4700 скважин с недостаточной цементацией кондуктора и эксплуатационной колонной, экологически несовершенные технологии бурения, ремонта и эксплуатации скважин. Результатом этого явилось нарастающее с годами загрязнение атмосферного воздуха, почв, поверхностных и подземных вод.

На втором этапе (1970—1980-е гг.), объем откачки попутных рассолов увеличивался значительно быстрее по сравнению с ростом добычи нефти. В эти годы появилось большое число новых источников загрязнения, в первую очередь из-за аварийных и несанкционированных разливов нефти и рассолов (250—270 г/л), и одной из главных причин таких разливов является коррозионное разрушение нефтепромыслового оборудования и трубопроводов. По мере разработки нефтяных месторождений доля этих рассолов в добываемой продукции нефтяных скважин постоянно росла. На установках подготовки нефти эти рассолы отделялись от нефти и через систему поддержания пластового давления (ППД) закачивались обратно в нефтяные плас-

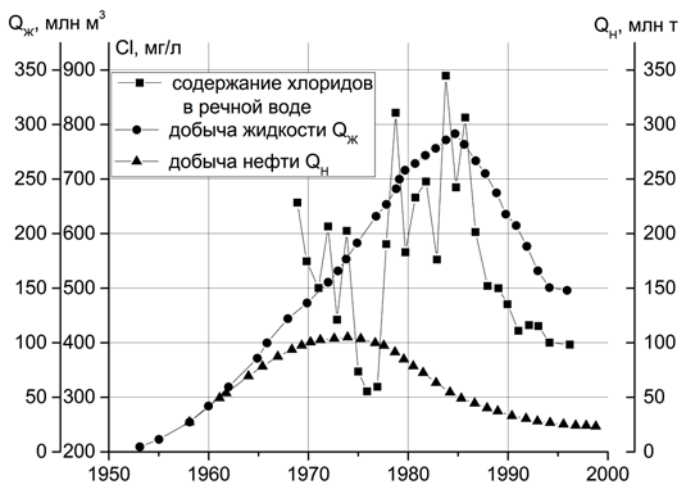


Рис. 12.1. Совмещенный график добычи нефти и попутных рассолов в АО «Татнефть» и загрязнения р. Степной Зай хлоридами в 1950—1999 гг.

ты с целью поддержания в них пластового давления либо утилизируются в других глубоко залегающих поглощающих горизонтах. Самоизливы на устье эксплуатационных скважин (с начала 1960-х гг.) — еще одна причина загрязнения подземных вод.

Случаи серьезного загрязнения подземных вод, используемых для централизованного водоснабжения населенных пунктов, известны с середины 1970-х гг. Причиной загрязнения также служили утечки рассолов из земляных амбаров. Содержание хлоридов в воде родников, находившихся в зоне влияния этих утечек, достигало 5—10 г/л и более.

Максимальное загрязнение речных вод отмечалось в 1980-е гг., когда ежегодное количество порывов на трубопроводах составляло 14—17 тысяч. На эти же годы приходится и максимальная ежегодная добыча попутных рассолов, составлявшая 280—290 млн т (рис. 12.1). При этом обводненность нефтяных скважин чаще всего находилась в пределах 78—84 %. В 1986 г. было зафиксировано максимальное содержание хлоридов в реках: Степной Зай (выше Заинска) — 814 мг/л, Кичуй — 804, Мелля — 642 мг/л. В 1980-е гг. продолжалось загрязнение верхних водоносных горизонтов за счет заколонных восходящих перетоков глубинных высокоминерализованных вод в эксплуатационных скважинах. Иногда подток глубинных рассолов в верхние водоносные горизонты происходил через ранее пробу-

ренные и неликвидированные разведочные и структурные скважины. Так, в 1992 г. в Альметьевском районе из 205 обследованных родников в 70 имело место хлоридное техногенное загрязнение.

Третий этап освоения нефтяных месторождений Республики Татарстан, начавшийся примерно в начале 1990 гг., характеризуется переходом крупных нефтяных месторождений в завершающую стадию разработки, когда при существенном снижении объемов добываемой нефти сохраняется весьма высокая обводненность эксплуатационных скважин. С 1985 по 1995 г. благодаря снижению добычи попутных рассолов и проведенным мероприятиям по борьбе с коррозией количество порывов трубопроводов снизилось более чем в 2 раза. Как следствие, в 2 раза, с 800 до 400 мг/л, уменьшилось содержание хлоридов в речной воде р. Степной Зай (рис. 12.1).

В 1990-е гг. начинают активно внедряться и другие мероприятия по снижению воздействия нефтедобычи на окружающую среду. Началось внедрение программы регионального уровня «Экология», которой предусматривалось: развитие и совершенствование сети наблюдений (мониторинга) природной среды на новых месторождениях и залежах; эколого-гидрогеологическая съемка М 1:100 000 и М 1:50 000 юго-восточных нефтедобывающих районов Татарии; поисково-разведочные работы на пресные подземные воды хозяйственно-питьевого назначения; создание сети наблюдательных скважин на водоносные горизонты пресных подземных вод; исследования технического состояния нефтяных скважин с точки зрения их потенциальной опасности для окружающей среды; выявление и изучение очагов техногенного загрязнения подземных вод с помощью аэрокосмических исследований, бурения экологических скважин, проведение электроразведочных работ (ВЭЗ) и другими методами.

В состав исследований входили гидрогеологическое обследование территории нефтепромыслов и отбор проб поверхностных и подземных вод, наземные геофизические исследования, бурение и опробование гидрогеологических скважин на глубину до 100—150 м, гидрохимические анализы, оценка технического состояния нефтепромысловых сооружений. В результате этих работ было установлено, что на территории нефтепромыслов оказались загрязненными до 30—40 % от общего числа родников, часть которых издавна использовалась местным населением для хозяйственно-питьевого водоснабжения.

С середины 1980-х и до конца 1990-х гг. для выявления и разведки очагов осолонения подземных вод ежегодно бурилось

от 50 до 70 наблюдательных эколого-гидрогеологических скважин, часть из которых вошла в фоновую и региональную сеть гидромониторинга. Было проведено детальное изучение отдельных наиболее опасных очагов загрязнения подземных вод, выполнено районирование территории Ромашкинского и Ново-Елховского месторождений нефти по их современному экологическому состоянию, организован опытный полигон для долгосрочных наблюдений за состоянием и развитием очага загрязнения подземных вод, процессов миграции загрязняющих компонентов в зоне аэрации.

Осуществление перечисленных мероприятий, предусмотренных принятыми ранее экологическими программами (хотя и в неполном объеме), позволило получить объективное и целостное представление об экологической ситуации в нефтяных районах Татарстана, стабилизировать и даже несколько оздоровить обстановку, а в ряде населенных пунктов восстановить удовлетворительные условия для водоснабжения. В результате регион сумел избежать угрозы превращения его в зону экологического бедствия, которая реально существовала в 1980 гг.

12.2. Разведка очагов загрязнения (Учаев и др., 2007б)

Как отмечено ранее, все действующие и потенциальные источники загрязнения по своему положению в геологическом пространстве и по характеру воздействия на водоносные горизонты могут быть разделены на две большие группы: глубинные и поверхностные. К первым относится огромное количество разведочных и эксплуатационных нефтяных скважин, большая часть которых к настоящему времени либо ликвидирована, либо временно законсервирована. Во вторую категорию источников загрязнения, образовавшихся непосредственно на земной поверхности или на глубине нескольких метров, входят аварийные участки трубопроводов, земляные амбары, используемые при бурении и капитальном ремонте эксплуатационных скважин, разгерметизированные узлы технологического оборудования на устьях эксплуатационных скважин, на кустовых и дожимных насосных станциях, в товарных парках. Число таких источников не поддается даже приближенному учету. В период наиболее интенсивной добычи нефти (1970—1980-е гг.) ежегодные потери рассолов из поверхностных источников в результате разливов, аварийных порывов и скрытых утечек составляли не

менее 4—5 млн м³. Поинтервальное опробование пробуренных специально для оценки экологической обстановки скважин, пройденных в отложениях казанского яруса на территории семи нефтегазодобывающих управлений, свидетельствует о том, что основной объем загрязнения (как минимум 70—80 %) поступает в подземные воды из наземных источников.

Рассолы, оказавшиеся в зоне аэрации, в большинстве случаев далеко не сразу и не полностью попадают в ближайший к поверхности водоносный горизонт, который на водораздельных пространствах и склонах речных долин может залегать на глубине нескольких десятков метров. Породы зоны аэрации, состоящие на 60—80 % из слабопроницаемых глин и алевролитов, обладая естественным дефицитом влагонасыщения до 40 %, активно впитывают поступающие с поверхности рассолы. При этом скорость погружения рассолов в зону аэрации оказывается достаточно медленной и определяется не только фильтрационными свойствами наименее проницаемых слоев разреза, но до определенного предела зависит от интенсивности действующего источника. Полевые наблюдения и численные эксперименты на моделях показывают, что сразу после устранения источника поступления рассолов скорость их вертикального перемещения в зоне аэрации снижается до минимума, особенно в меженный период. Только после прохождения весеннего или осеннего паводка нижняя граница засоления опускается на несколько десятков сантиметров глубже своего предыдущего положения.

Основными задачами разведочных работ на очагах загрязнения является определение существующих масштабов, характера и уровня загрязнения подземных вод на отведенных под разведку участках, а также выявление основных источников и путей поступления загрязняющих компонентов в водоносные горизонты. При этом разведочные работы должны быть нацелены на получение информации, позволяющей:

- 1) прогнозировать развитие очага загрязнения и возможные изменения качества воды на действующих или проектируемых водозаборных сооружениях;

- 2) предложить и обосновать возможные мероприятия, направленные на реабилитацию водоносных горизонтов или защиту водозаборов от подтягивания к ним загрязненных подземных вод;

- 3) выявить (если возможно) защищенные от загрязнения резервные источники питьевого водоснабжения.

Приоритетными для изучения следует считать очаги загрязнения, оказавшие неблагоприятное влияние на качество потребляе-

мых питьевых вод либо представляющие серьезную угрозу централизованному водоснабжению крупных населенных пунктов.

Разведочные работы на очагах загрязнения подземных вод могут включать в себя достаточно большое число видов гидрогеологических исследований. Часть из них, такие как родниковая съемка, режимные гидрохимические и гидродинамические наблюдения, наземные электроразведочные работы, разведочное бурение и опробование скважин, моделирование условий переноса загрязняющих компонентов подземными водами, должны обязательно включаться в комплекс работ по изучению очагов загрязнения подземных вод. Некоторые другие виды исследований — кустовые откачки, опытно-миграционные работы, гидрогеотермические наблюдения, фильтрационное опробование и миграционные эксперименты в зоне аэрации, отдельные виды специальных лабораторных исследований — выполняются по мере необходимости, в зависимости от поставленных целей, гидрогеологического строения объекта и его состояния.

Выполняемые работы разумно строить по принципу «самообучающегося эксперимента», сохраняя в каждом случае некоторую их общую последовательность, которая позволила бы использовать полученную ранее информацию для повышения эффективности каждого последующего вида работ. Целесообразна следующая стадийность исследований:

- 1) сбор и анализ имеющихся фондовых материалов по геологическому строению и гидрогеологическим условиям выбранного объекта, вероятным источникам загрязнения подземных вод, химическому составу подземных и поверхностных вод участка за весь период предшествовавших наблюдений;

- 2) рекогносцировочное экологическое обследование очага загрязнения, родниковая съемка, русловые геофизические наблюдения, начало цикла режимных гидродинамических и гидрохимических наблюдений;

- 3) русловые геофизические наблюдения;

- 4) электроразведочные работы на территории очага загрязнения методами срединного градиента, ВЭЗ, дипольного или симметричного электропрофилирования, уточнение площадок бурения разведочных скважин;

- 5) бурение и поинтервальное опробование разведочных скважин, вертикальное электрическое зондирование фоновых и загрязненных участков водоносного горизонта (комплекса), межвенные гидрологические наблюдения на малых реках, дополнительные полевые и лабораторные исследования, завершение цикла режимных наблюдений;

б) камеральная обработка полевых и лабораторных данных, построение и калибровка численной гидрогеологической модели очага загрязнения и решение прогнозных задач.

Информационное обеспечение. Первым источником информации об очаге загрязнения служат обычно данные мониторинговых наблюдений и санитарного контроля источников питьевого водоснабжения, позволяющие получить общее представление об уровне и характере загрязнения верхнего водоносного комплекса по объекту в целом. В идеальном случае эти данные помогают также восстановить историю формирования очага загрязнения, оценить техногенную трансформацию химического состава подземных вод и в первом приближении наметить контуры очага загрязнения.

Другой возможный источник информации — специальные скважины, пробуренные для изучения экологической обстановки. Оборудованы они преимущественно на участках, в наибольшей степени пораженных техногенным загрязнением, и функциональное их назначение состояло в определении источников и путей загрязнения конкретных водных объектов.

Дополнительным источником информации являются материалы экологической съемки масштаба 1:50 000. Среди материалов съемки наибольшую ценность представляют достаточно детальные гидрологические данные по малым рекам региона.

Рекогносцировочное обследование участка и родниковая съемка. Перед этими видами работ ставится задача выбора исходной конфигурации режимной наблюдательной сети. При рекогносцировке участка проводится визуальный осмотр наиболее крупных вероятных источников загрязнения, к которым относятся в первую очередь товарные парки, КНС и подводящие коммуникации. Особое внимание обращается на фильтрующие бассейны, земляные амбары, нефтеловушки, оборудованные в перегороденных земляными плотинами логах, следы разливов технологических рассолов на земной поверхности, которые можно определить по увядшей траве и древесному сухостю.

Родниковая съемка участка ведется по обычной методике, с замером расхода каждого родника, экспресс-определением минерализации и содержания хлоридов и отбором проб воды на сокращенный химический анализ. Параллельно с родниковой съемкой на ручьях и малых реках выбираются места гидростворов для последующих более детальных гидрологических наблюдений.

Режимные наблюдения. Задача таких наблюдений состоит в возможно полном изучении текущего состояния и сезонных изменений напоров, расходов и химического состава подземных вод в отдельных структурных элементах очага загрязнения. Режимные наблюдения включают в себя контроль за химическим составом и гидродинамическими характеристиками подземных поверхностных вод в пределах очага загрязнения. Результаты режимных наблюдений в совокупности с данными бурения и опробования разведочных скважин служат основой для составления фильтрационной и миграционной схемы очага загрязнения.

Режимные гидрохимические наблюдения на начальном этапе разведочных работ проводятся ежемесячно на всех наблюдательных пунктах.

В тех наблюдательных точках, где первые данные свидетельствуют о тенденциях к изменению химического состава подземных вод во времени, пробы продолжают отбирать с месячным интервалом. Там же, где гидрохимический режим оказывается близким к стационарному, переходят на ежеквартальный отбор проб. Большинство проб воды отбирается на сокращенный химический анализ. Из общего объема проб подземных вод как минимум три сопровождаются химическим анализом по расширенному списку компонентов. В этих пробах, кроме макрокомпонентов, определяется содержание типичных токсичных катионов (Li, Be, Ni, V, Ba, Cd, Pb, Hg, Sr), анионов (B, Br), фенолов, нефтепродуктов, а также других компонентов, нормируемых для питьевых вод. Эти пробы отбираются на питьевом водозаборе, наиболее загрязненном роднике или на другом участке водоносного комплекса. Обязательно также берется проба исходного загрязнителя — технологических рассолов, поступающих в глубокие горизонты через нагнетательные скважины, или попутных вод из эксплуатационной нефтяной скважины.

Наземные электроразведочные работы. Главной задачей таких работ становится поиск и оконтуривание низкоомных аномалий удельного электрического сопротивления (УЭС) грунта в приповерхностных слоях разреза. Такие аномалии, как правило, идентифицируются как зоны локализации подземных вод, обладающих повышенной минерализацией. Первичная электроразведочная съемка ведется установками симметричного или дипольного электропрофилирования, обеспечивающими глубину исследований 3—5 м.

Русловые геофизические наблюдения. Опыт гидрологических наблюдений на малых реках региона свидетельствует о том, что доля видимой родниковой разгрузки в речном стоке в меженный период, как правило, не превосходит 10 %. Большую же часть подземного питания малые реки и ручьи получают в виде скрытой очаговой или рассредоточенной разгрузки водоносных горизонтов через придонный аллювий или подрусловые выходы коренных отложений. Благодаря относительно высоким действительным скоростям фильтрации в верхних водоносных слоях, очаги загрязнения подземных вод всегда имеют выход либо на определенные родники, либо на участки субаквальной разгрузки в руслах рек. Довольно широкими возможностями для определения субаквальной разгрузки обладают методы *русловой геофизики*, среди которых, пожалуй, наиболее информативными и вместе с тем экономичными следует признать русловые гидрогеотермические и резистивиметрические наблюдения.

Измерения температуры и электрического сопротивления воды в придонном слое ручьев, рек и водоемов могут выполняться с берега с интервалом между соседними точками 50—100 м либо с лодки в непрерывном режиме. Уже непосредственно на маршруте участки субаквальной разгрузки подземных вод устанавливаются по отрицательным (в теплое время года) или положительным (в холодное время года) температурным аномалиям.

При достаточной интенсивности разгрузки и при различной минерализации подземных и поверхностных вод температурные аномалии со-

проводятся изменением электрического сопротивления воды. На крупных реках и водоемах более типична ситуация, когда температурные аномалии, вызванные разгрузкой подземных вод, сохраняются лишь в придонном слое аллювиальных или коренных отложений и не заметны в речной воде. Поэтому на подобных участках для выделения зон субкавальной разгрузки требуется определять также и температуру верхнего слоя донных отложений, учитывая, что ее величина в значительно большей степени, чем температура речной воды, будет зависеть от вертикальной составляющей скорости фильтрации. Такие измерения, получившие название «термозондирование придонных слоев», могут быть с успехом использованы для поиска и оконтуривания участков даже слабой скрытой разгрузки подземных вод. Для количественной интерпретации термозондирования может использоваться решение задачи теплопереноса в фильтрующих горных породах в предположении, что температура на контуре разгрузки меняется в течение года по гармоническому закону (Мироненко и др., 1980).

Бурение и опробование разведочных скважин. Разведочное бурение является самым информативным для оценки условий существующего загрязнения, но в то же время и наиболее дорогостоящим видом работ. Очевидно, что на каждом очаге загрязнения требуется индивидуальный подход к размещению и выбору конструкции разведочных скважин.

Как минимум одна разведочная скважина должна располагаться на месте или в непосредственной близости от того источника загрязнения, который по совокупности признаков квалифицируется как самый опасный по отношению к основному продуктивному горизонту подземных вод. По крайней мере, одну из скважин следует разместить на участке, где техногенное воздействие на подземные воды наименее вероятно.

Разведочные скважины закладываются в створах между основными источниками загрязнения и питьевыми водозаборами. Общее число разведочных скважин может составлять порядка двух-трех на каждый квадратный километр обследуемой площади.

Опробование отдельных интервалов производится последовательно, по мере наращивания глубины скважины. Длина таких интервалов может составлять 5—10 м, однако при значительной вертикальной разобщенности водопрводящих слоев может возрастать и до первых десятков метров. После прекращения откачки отслеживается восстановление статического уровня. В случае малой водообильности встреченного интервала, не позволяющей провести опытную откачку, гидродинамическое опробование проводят методом экспресс-налива.

Полевые миграционные эксперименты. Целью миграционного опробования водоносных пластов, как правило, считается определение основных параметров массопереноса в них инертных либо сорбируемых компонентов. К таким параметрам в первую очередь относятся активная пористость или трещиноватость водоносных отложений, параметры гидродисперсии и распределения сорбционной емкости в зависимости от концентрации мигрирующего компонента. В силу ряда причин (прежде всего из-за сложного профильного и планового фильтрационного строения) далеко не всегда можно рассчитывать на получение представитель-

ных значений миграционных параметров водоносного комплекса. Более реальной в этих условиях может стать задача определения естественных скоростей миграции несорбируемых компонентов (таких, например, как хлориды) в отдельных водоносных слоях.

Численное моделирование процессов миграции загрязняющих компонентов. Особенностью моделирования процессов миграции на очагах загрязнения подземных вод является, как правило, изначальная неопределенность фильтрационных и миграционных параметров объекта. Поэтому определять или уточнять фильтрационные параметры приходится путем калибровки модели, используя данные о распределении напоров в отдельных слоях и расходов по выделенным лентам тока. Желательно, чтобы моделируемая область представляла собой замкнутый в балансовом отношении участок, на котором величина инфильтрационного питания подземных вод как в целом, так и по отдельным его фрагментам могла бы оцениваться по интенсивности разгрузки подземных вод в речную сеть. Водосборная площадь верхних водоносных слоев на рассматриваемой территории контролируется рельефом местности.

При неупорядоченно слоистом строении водоносной толщи, содержащей большое число невыдержанных по мощности и фильтрационным свойствам водоносных водоупорных слоев, нет смысла включать в модель каждый из этих слоев. В этом случае на модели задается один или несколько (обычно от двух до пяти) фиктивных горизонтально залегающих слоев, обладающих профильной фильтрационной анизотропией.

Все упомянутые методы гидрогеологических исследований достаточно хорошо разработаны, а варианты их практического применения широко освещены в литературе. Тем не менее использование их в гидрогеоэкологических целях всегда несет в себе определенную специфику. В первую очередь это относится к группе геофизических методов.

12.3. Гидрогеологические исследования и наблюдения на опытном полигоне «Васильевка» (Учаев и др., 2007а)

Опытный гидрогеоэкологический полигон организован в 1997 г. на Миннибаевской площади Ромашкинского нефтяного месторождения в 15 км южнее города Альметьевска в окрестностях села Васильевка. В задачи опытных исследований входило изучение режимообразующих факторов, определяющих условия питания и разгрузки водоносных слоев, закономерности поступления и переноса загрязняющих компонентов в породах зоны аэрации, миграционные параметры отдельных горизонтов и водоносной толщи в целом.

Выбранный участок по своему экологическому состоянию относится к числу самых неблагоприятных в регионе. Обширный очаг техногенного загрязнения подземных вод действует здесь на протяжении более чем тридцати лет. Качество воды большинства подземных источников, на ко-

торых оборудованы водозаборы, давно перестало удовлетворять питьевым нормам. Разведочные работы, проводившиеся ранее на участке «Васильевка», показали, что очаг этот типичен для всего нефтедобывающего региона.

12.3.1. Гидрогеологическая характеристика опытного полигона

Опытный гидрогеоэкологический полигон «Васильевка» расположен в верховьях небольшой реки Зай-Каратай, левого притока Степного Зая. Площадь полигона около 16 км². Граница полигона условно проходит по линии водораздела с бассейнами ближайших малых рек: Сурка, Кичуй, Мактама, Улаклы-Чишма. Южная граница установлена в километре от села Васильевка ниже по течению Зай-Каратая. Она пересекает долину реки примерно по линии замыкающего участок гидрологического створа, оборудованного для режимных наблюдений за расходом реки (рис. 12.2).

Водораздельные участки представляют собой широкие (до 2—3 км) равнины с абсолютными отметками земной поверхности 320—340 м. Самые низкие южные участки речной долины имеют абсолютные отметки около 240 м. Склоны долины, особенно восточный, довольно крутые. Оба склона прорезают крупные овраги и лощины, в которых имеются многочисленные выходы родников. Дебит наиболее крупных родников в первые месяцы после прохождения весеннего паводка (в мае—июне) достигает 10 л/с. Три родника каптированы и используются для водоснабжения местного населения и молочно-товарной фермы.

Река Зай-Каратай дренирует верхние водоносные слои. Ее меженный расход в замыкающем створе на южной границе полигона составляет 100—120 л/с. В период межени питание реки обеспечивается исключительно подземными источниками. Исходя из этого, средняя величина модуля подземного стока с площади полигона, установленная по результатам пятилетних гидрологических наблюдений, составила 6—7 л/с·км², что заметно (в 2.5—3 раза) превышает средний показатель для юго-востока Татарстана.

Водоносный комплекс казанских отложений представлен сложно переслаивающимися породами терригенно-карбонатного состава (рис. 12.3). Мощность комплекса на водоразделах составляет 150—170 м, в пойме долины сокращается до 80 м. В разрезе отложений казанского яруса выделяется до семи пачек, отвечающих седиментационным ритмам. Все литологические слои не выдержаны по мощности и не имеют четко выраженных плановых границ. Состоят они из слабосцементированных трещиноватых песчаников или карбонатных отложений с глинистыми прослоями и часто выклиниваются. Как правило, максимальная мощность отдельных водоносных слоев не превышает 5—6 м.

Профильное распределение напоров подземных вод в казанских отложениях имеет общую закономерность: повсеместно происходит их снижение с глубиной. На водоразделах различие между положением пьезометрической поверхности верхних и нижних водоносных слоев комплек-

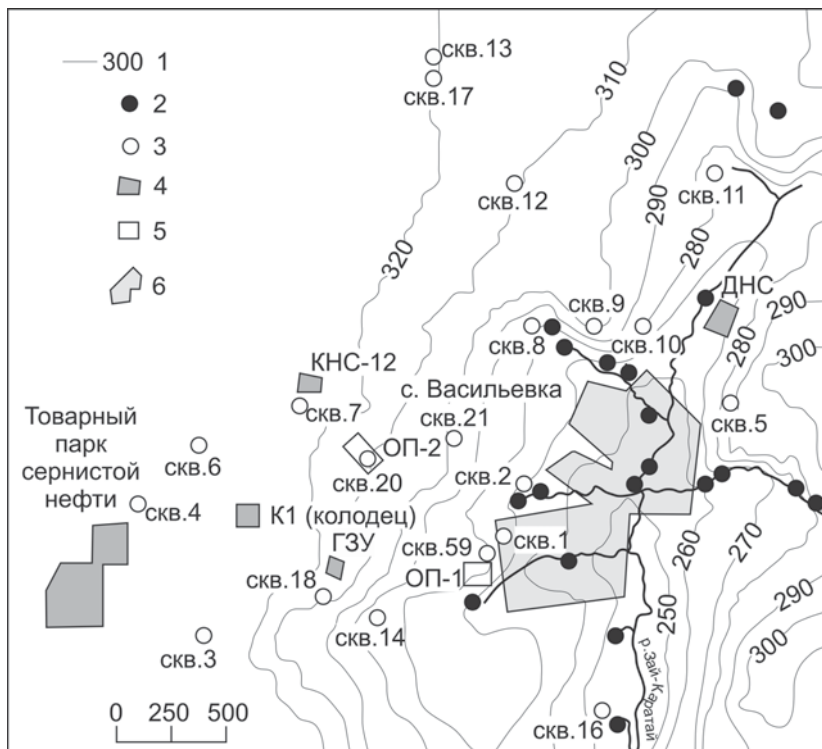


Рис. 12.2. Схема опытного полигона «Васильевка».

1 — изолиния рельефа; 2 — скважина; 3 — родник; 4 — нефтепромысловый объект; 5 — опытная площадка; 6 — зона жилой застройки.

са достигает 60—80 м. Вблизи реки разница сокращается до нескольких метров, но сохраняется тенденция снижения пьезометрического уровня с глубиной. Такая резкая профильная дифференциация напоров стала возможной благодаря двум факторам: присутствию в водоносном комплексе слабопроницаемых разделяющих слоев, затрудняющих гидравлическую связь верхних горизонтов с нижними, и активному дренированию более глубоких водоносных слоев крупными родниками и речной сетью как на территории опытного полигона, так и за его пределами.

Градиент напоров в сторону реки в основных водоносных слоях составляет 0.005—0.01. Большинство родников, в том числе все крупные, показанные на рис. 12.4, выходят из водоносного горизонта мощностью до 3.5 м, образованного плотными известняками. Этот горизонт, имеющий стратиграфическую датировку $P_{2кз}^2$, предположительно считается аналогом серии «серый камень» в стратиграфической схеме.

Опытно-фильтрационное опробование изолированных интервалов водоносного комплекса одиночными откачками, наливами и экспресс-нали-

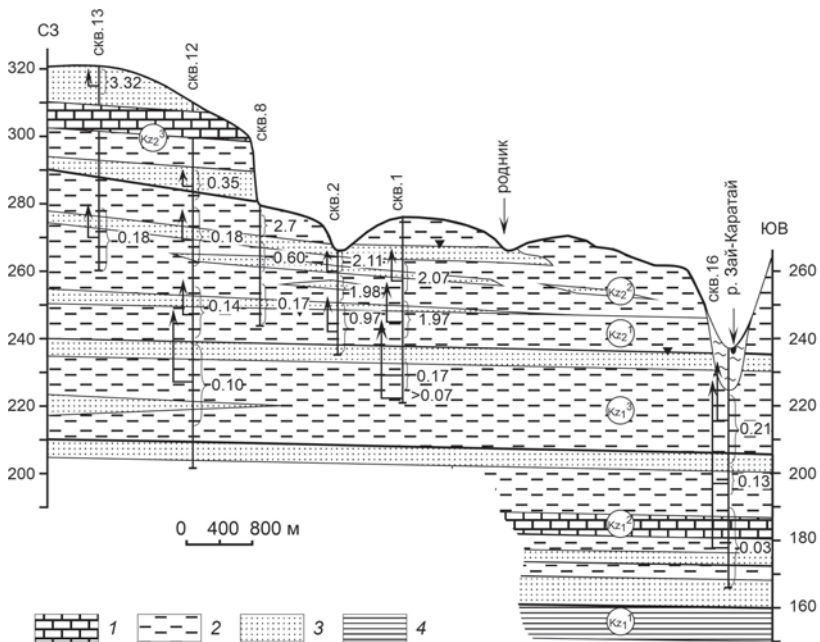


Рис. 12.3. Типовой гидрогеологический разрез водоносного комплекса казанских отложений.

Стрелками показан установившийся уровень подземных вод; справа от обозначенных интервалов — содержание хлоридов в воде, г/л. 1 — карбонатные породы, 2 — алевролиты, 3 — песчаники, 4 — лингуловые глины (региональный водоупор).

вами показало, что водопроницаемость отдельных водоносных слоев может изменяться более чем на два порядка (от десятых долей до $70 \text{ м}^2/\text{сут}$).

На территории опытного полигона расположены многочисленные объекты нефтедобывающего комплекса: товарный парк сернистой нефти, насосные станции ДНС-12 и КНС-12, 73 действующие нефтяные скважины, большое число трубопроводов. Они в разное время служили источниками загрязнения подземных вод и стали причиной формирования обширного очага загрязнения водоносного комплекса казанских отложений, границы которого вышли далеко за пределы опытного полигона.

Поинтервальное гидрохимическое опробование водоносных слоев, вскрытых разведочными скважинами, показало, что увеличение содержания хлоридов и общей жесткости произошло повсеместно, хотя и в различной степени. Наибольшие содержания хлоридов (до 9 г/л) были отмечены в верхних водоносных слоях вблизи наиболее крупных источников загрязнения — парка сернистой нефти и трасс нефтепроводов на северо-западной окраине с. Васильевка. Во всех скважинах было выявлено закономерное уменьшение содержания хлоридов в подземных водах казанских отложений с глубиной. Расположение наиболее загрязненных участков зоны аэрации и водоносных отложений, оконтуренных с исполь-

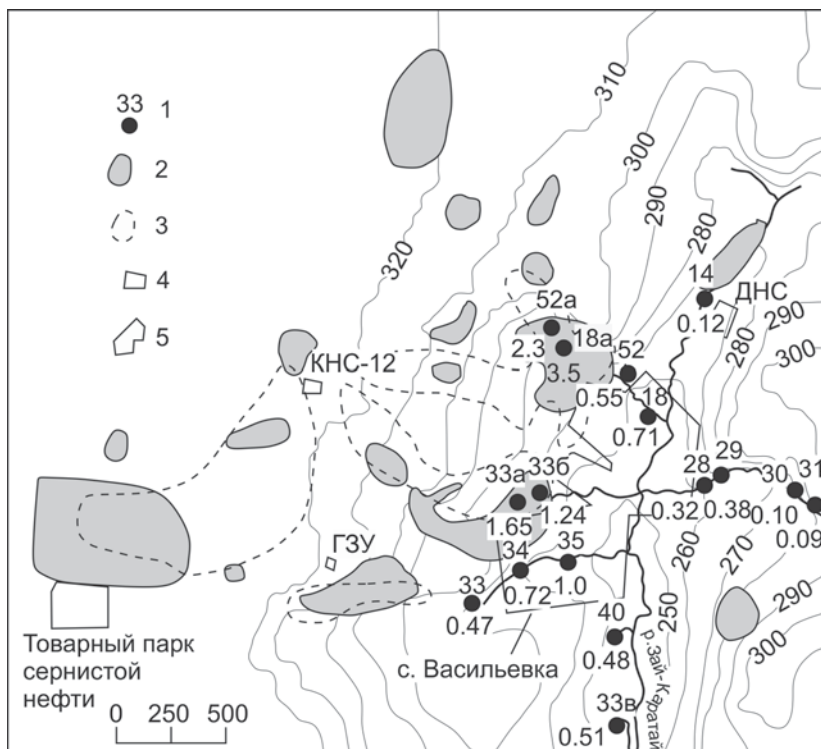


Рис. 12.4. Карта расположения участков наибольшего засоления зоны аэрации и подземных вод (опытный полигон «Васильевка»).

1 — родник, его номер и содержание хлоридов (г/л); 2 — зона поверхностного загрязнения пород; 3 — зона загрязнения подземных вод; 4 — нефтепромысловый объект; 5 — зона жилой застройки.

зованием наземных методов электроразведки в 1994—1995 гг., показано на рис. 12.4.

Загрязнение водоносных горизонтов повлекло за собой загрязнение воды большинства родников, часть которых до сих пор используется местным населением в хозяйственных и питьевых целях. Содержание хлоридов в большинстве из них составляет от 300—400 мг/л до 3—4 г/л (родниковые выходы западнее ЦПС). Только в двух родниках (напротив ДНС-12 и в верховьях кладбищенского оврага) содержание хлоридов держится на уровне 100—150 мг/л.

Многочисленное опробование родников в 1995—2001 гг. позволило выявить широкий спектр химических соединений, загрязняющих водоносные отложения. Наряду с ожидавшимся присутствием в подземных водах высоких концентраций хлоридов, брома, нефтепродуктов в отдельных точках опробования были отмечены повышенные содержания таких мик-

рокомпонентов, как бериллий, кадмий, барий, а также установлено значительное фенольное загрязнение.

К моменту проведения исследований уровень загрязнения подземных вод на территории опытного полигона практически стабилизировался.

12.3.2. Режимные наблюдения

Гидродинамические наблюдения. Действующая наблюдательная сеть опытного полигона состоит из 20 скважин, 1 колодца, 10 родников и 1 гидропоста, оборудованного на замыкающем створе р. Зай-Каратай. Расположение пунктов наблюдательной сети показано на рис. 12.2. На рис. 12.5 показаны характерные графики уровней подземных вод в верхних средних и нижних слоях водоносного комплекса казанских отложений за последние три года, совмещенные с графиком расхода реки. Амплитуда сезонных колебаний уровня подземных вод в самом верхнем водоносном

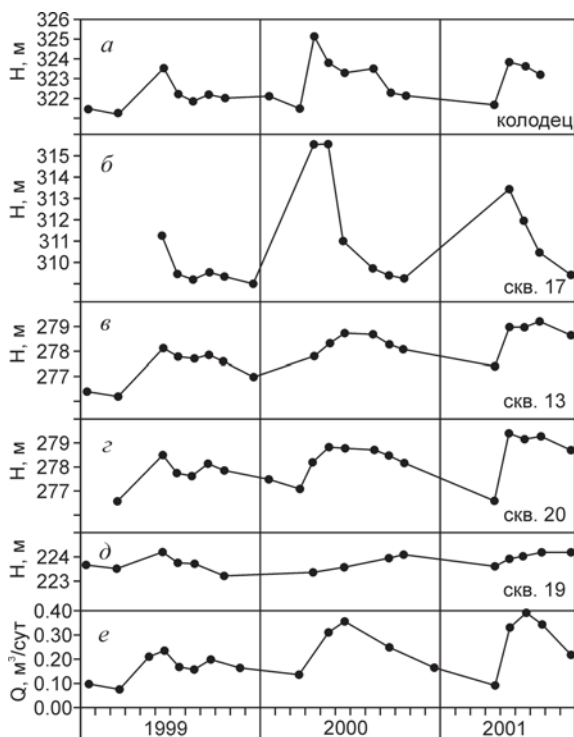


Рис. 12.5. Совмещенный график напоров подземных вод в колодце (а), в наблюдательных скважинах (б—д) и расходов р. Зай-Каратай на замыкающем створе (е).

слое на водоразделах составляла 4—5 м, в средних слоях — 1.5—2 м и в нижней части водоносного комплекса — менее полуметра, с примерено трехмесячным отставанием по фазе от колебаний в верхних слоях.

Анализ сезонных колебаний уровней в верхних водоносных слоях показал, что водоносный комплекс получает основную (около 80 %) долю годового инфильтрационного питания в период весеннего паводка и существенно меньшую (не более 20 %) — во вторую половину осени до появления устойчивого снежного покрова. В теплое время года даже обильные дожди только увлажняют верхний, как правило, более сухой слой зоны аэрации и практически не оказывают влияния на уровни подземных вод и дебит родников. В летний период поступающая в верхние слои зоны аэрации влага практически целиком расходуется на испарение с почвенного покрова и на транспирацию растениями. На это указывало плавное снижение напоров во всех водоносных слоях между маем и октябрём.

Гидрохимические наблюдения. Регулярные наблюдения за химическим составом подземных вод проведены в родниках и на замыкающем створе р. Зай-Каратай. Было установлено, что сильно минерализованные хлоридные натриевые воды, попадая в водоносные пласты, содержащие значительное количество карбонатного материала, вступают в *реакции ионного обмена* и относительно быстро *метаморфизуются* до кальциевых. Мигрируя к родникам и рекам, техногенные стоки *разбавляются* природными гидрокарбонатными кальциевыми водами в десятки раз, в зависимости от интенсивности воздействия источников загрязнения и удаленности участков разгрузки.

Хлоридное загрязнение подземных вод на полигоне зафиксировано во всех пунктах стационарной наблюдательной сети. Графики содержания хлоридов за 1997—2001 гг. по отдельным родникам и на замыкающем речном створе приведены на рис. 12.6. В течение всего периода наблюдений наименее загрязненными оставались родники 30 и 31, расположенные в верховьях единственного левого притока р. Зай-Каратай (см. рис. 12.4).

Неблагоприятная ситуация сложилась на каптированном роднике 18, где в начале 1997 г. содержание хлоридов выросло до 600—700 мг/л и вода перестала удовлетворять питьевым санитарным нормам. Наиболее вероятной причиной загрязнения родника могли стать утечки из проложенных выше по потоку подземных вод технологических трубопроводов, связывающих ДНС-12 с групповыми замерными установками и эксплуатационными скважинами. На остальных родниках гидрохимический режим оставался относительно стабильным. Некоторое увеличение минерализации отмечалось в конце зимней межени, когда падал их расход, и наоборот — в период весеннего паводка наблюдалось кратковременное снижение минерализации в результате разбавления родниковой воды тальми водами.

Химический состав воды в замыкающем наблюдательном створе р. Зай-Каратай оставался на уровне предыдущих лет. Содержание хлоридов здесь изменялось в пределах от 350 до 600 мг/л. Это означает, что общий уровень техногенного загрязнения верхних водоносных горизонтов в последние годы не претерпел существенных изменений.

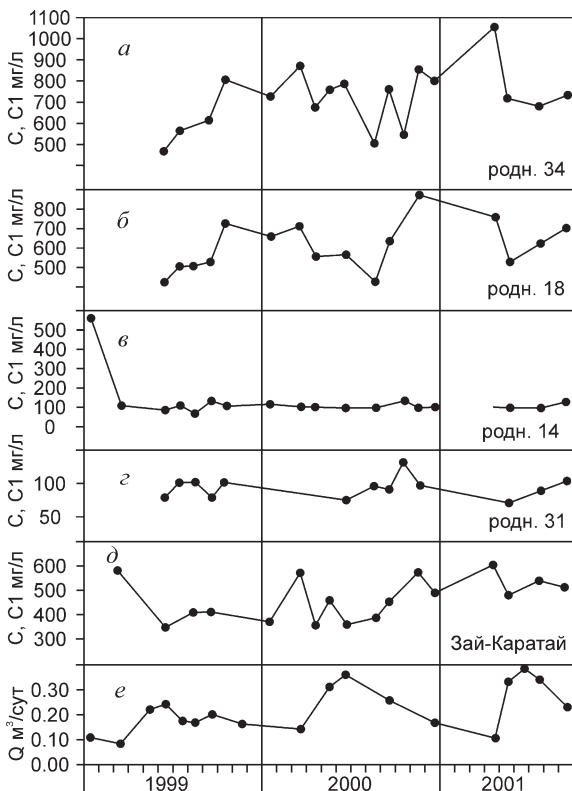


Рис. 12.6. Совмещенный график содержания хлоридов в родниках (а—г), замыкающем створе р. Зай-Каратай (д) и расходов р. Зай-Каратай на замыкающем створе (е).

Общая жесткость подземных вод в различных наблюдательных пунктах менялась от значений, близких к фоновым (6—7 мг-экв/л), до 12—15 мг-экв/л в наиболее загрязненных родниках 34 и 35 (см. рис. 12.4). Причиной повышения жесткости подземных вод стала *метаморфизация* хлоридных натриевых рассолов, поступающих от источников загрязнения в глинисто-карбонатные горные породы. В результате ионообменных реакций натрия раствора на кальций (магний) обменного комплекса горных пород подземные воды становятся очень жесткими. Следует отметить, что большинство родников на полигоне «Васильевка» приурочено к выходам известняков. Таким образом, сочетание карбонатного разреза с утечками рассолов на нефтепромыслах стало причиной значительного увеличения в подземных водах концентрации катионов Ca^{2+} и Mg^{2+} .

Нефтепродукты в концентрациях выше ПДК (0.1 мг/л) обнаружены в большинстве загрязненных родников. Концентрации нефтепродуктов плохо коррелируют с содержанием хлоридов в подземных водах, что сви-

детельствует об активно протекающих *окислительно-восстановительных процессах*, приводящих к деструкции углеводородов, либо дополнительно их поступлении из нефтеловушек и других возможных источников.

Спектр загрязняющих компонентов в подземных водах опытного полигона оказался достаточно широким и не ограничивается макрокомпонентами. Более опасные превышения предельно-допустимых норм обнаружены по бериллию, кадмию, барию, бромю.

12.3.3. Полевые эксперименты в зоне аэрации

Строение зоны аэрации. Выбранная для проведения экспериментов опытная площадка располагается на левом склоне сухого лога выше родника 33 в двухстах метрах юго-западнее окраины села Васильевка на абсолютных отметках 260—280 м. Мощность зоны аэрации в этом месте составляет около 8 м.

В пределах опытного полигона зона аэрации имеет обычное для юго-востока Республики Татарстан геологическое строение. Сложно переслаивающиеся терригенно-карбонатные отложения верхнеказанского возраста представлены глинами, алевролитами, песчаниками, в меньшей степени — мергелеподобными известняками и доломитами. Характерно, что отдельные литологические прослои не выдерживаются по мощности, и уже на небольшом удалении (десятки—сотни метров) можно встретиться с совершенно иным их чередованием и конфигурацией при сохранении общих особенностей геологического строения разреза в целом. Породы зоны аэрации в пределах опытной площадки ранее не подвергались загрязнению со стороны нефтепромысловых сооружений.

Характерные значения естественной весовой влажности для большей части профиля составляют (рис. 12.7): для алевролитов — 18—23 %, иногда — до 27 %, для песчаников — 10—14 %. Объемная влажность у образцов ненарушенного сложения превосходит значение весовой влажности примерно в полтора раза. Существенно, что объемная влажность алевролитов и глин по всему профилю зоны аэрации менялась в небольших пределах: 28—35 % при общей пористости этих пород порядка 40—45 %. Несколько меньшей оказалась естественная объемная влажность песчаников. В зависимости от содержания глинистого материала ее значения составляли от 15 до 25 % при общей пористости 35—40 %. И в глинистых породах, и в песчаниках не было замечено какой-либо тенденции к изменению влажности однотипных слоев в разрезе и плане, а если сравнивать результаты определений за два года — то и во времени.

По данным наливов в шурфы, вертикальный коэффициент фильтрации трещиноватых карбонатных отложений составляет десятки метров в сутки, песчаников — 1—3 м/сут, алевролитов и глинистых отложений — 0.03—0.3 м/сут. Наименее проницаемыми оказались делювиальные отложения, залегающие в тальвеге лога, — их коэффициент фильтрации не превышал 0.01 м/сут.

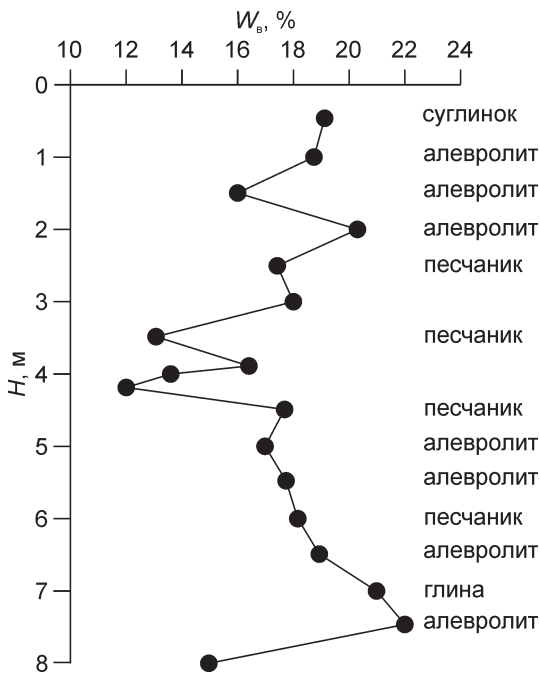


Рис. 12.7. Распределение влажности (W_b , %) в породах зоны аэрации (скв. 1—4).

Всасывающее давление в песчаниках и алевролитах. Конвективный перенос влаги и растворенных химических соединений в частично водонасыщенных гранулированных горных породах происходит под действием гравитационных и капиллярных сил. Гравитационный фактор доминирует в отложениях, состоящих преимущественно из песчаной фракции. Проницаемость таких отложений достаточно высока, а капиллярное давление в них не превышает первых десятков сантиметров. Поэтому вертикальные градиенты потенциальной функции в песках и песчаниках вскоре после начала налива стабилизируются, принимая значение, близкое к единичному. При этом вертикальная составляющая скорости влагопереноса (аналог вертикальной скорости фильтрации) в абсолютном выражении приближается к значению их коэффициента фильтрации.

В алевролитах, состоящих на 25 % и более из пылеватых и глинистых фракций, длительность нестационарных этапов в цикле налив—осушение существенно возрастает. В результате возрастает и влияние капиллярных сил на перенос жидкой фазы, поскольку градиенты отрицательного капиллярного давления в относительно слабопроницаемой пористой среде в такие периоды могут увеличиваться в несколько раз. Суммарное влияние этих сил, направленное на удержание воды в порах, принято характеризовать сорбционно-капиллярным потенциалом влажности или работой, не-

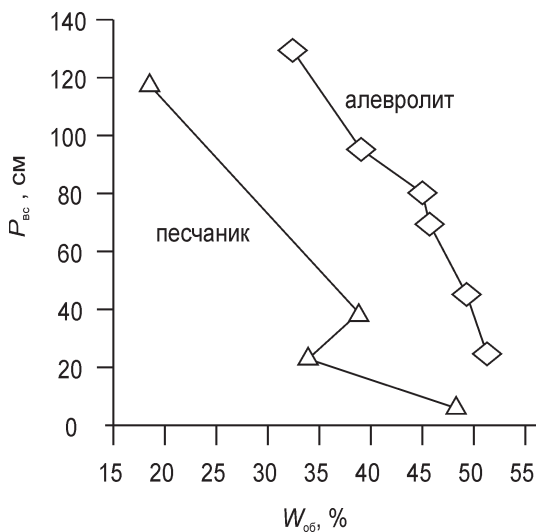


Рис. 12.8. Зависимость всасывающего давления ($P_{вс}$) от объемной влажности ($W_{об}$).

обходимой для извлечения из грунта некоторой массы жидкости. Данная величина находится в прямой зависимости от капиллярного или всасывающего давления во влажных породах.

Определение всасывающего давления проводилось в полевых условиях на опытном шурфе. Схема измерений была принята следующей. В стенке шурфа устанавливался керамический биологический фильтр (аналог тензиометра) диаметром 2.5 см и длиной 20 см, соединенный прозрачным шлангом с вакуумметром. Для снижения инерционности вся система, в том числе и полая пружина вакуумметра, заполнялась водой.

Соотношение всасывающего давления и влажности для каждого типа грунта определялось следующим образом. Сразу же после установки тензиометров проверялась инерционность измерительной системы, которая считалась удовлетворительной в том случае, если время стабилизации показаний вакуумметра составляло не более 10—15 минут. Одновременно рядом с тензиометром отбирался образец грунта для определения влажности. Далее, по мере ступенчатого увлажнения грунта в месте установки тензиометра, велись наблюдения за изменением всасывающего давления и отбирались пробы на влажность. Полученные зависимости величины всасывающего давления от влажности для песчаников и алевролитов показаны на рис. 12.8. Измерениями удалось охватить практически весь диапазон реально возможных изменений влажности алевролитов и слабоцементированных песчаников в естественных условиях.

Определение зависимости коэффициента влагопереноса от влажности. Данная зависимость также является базовой при создании чис-

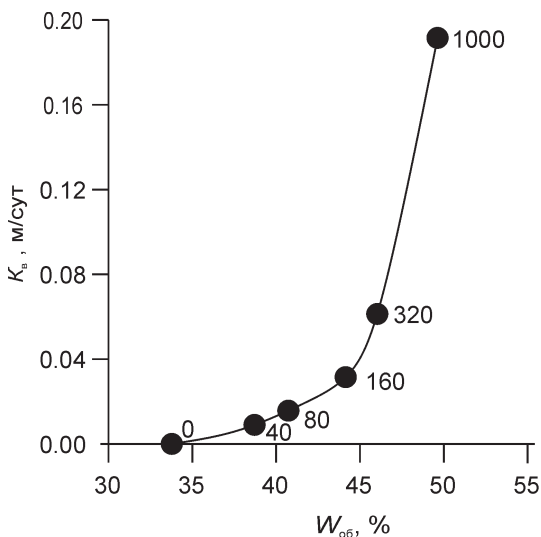


Рис. 12.9. Зависимость коэффициента влагопереноса (K_v) алевролитов от объемной влажности ($W_{об}$).

Числа у кривой — расход налива, мл/ч.

ленных моделей влагопереноса и миграции в ненасыщенной среде. Зависимость устанавливалась экспериментально при проведении длительных наливов в зону аэрации через кольца большого диаметра со ступенчато меняющимся расходом. Во время наливов в слой породы ненарушенного сложения, залегающий в 10 см глубже нижнего сечения кольца, поочередно достигались стабильные значения вертикальных скоростей влагопереноса в диапазоне 0.008—0.2 м/сут. Время стабилизации режима влагопереноса контролировалось тензиометрами, показания которых отмечали возможные изменения всасывающего давления (зависящего от влажности) на заданной глубине. Экспериментальная зависимость коэффициента влагопереноса от влажности алевролитов приведена на рис. 12.9.

Наблюдения за рассолением зоны аэрации. Экспериментальные наливыв хлоридных растворов различных концентраций в породы зоны аэрации проводились с целью выявления основных закономерностей миграции загрязняющих компонентов в верхних неводонасыщенных слоях алевролитов и песчаников. Серия экспериментов состояла в проведении наливов хлоридного рассола в опытные шурфы с последующим наблюдением за вертикальным и горизонтальным распространением хлоридов в верхней части разреза.

Так, оценить среднегодовую скорость вертикальной миграции рассолов в зоне аэрации можно, сравнивая результаты опробования 1999 и 2000 гг. (рис. 12.10). Ориентируясь на полученные за два года данные о профильном распределении хлоридов, установлено, что область засоле-

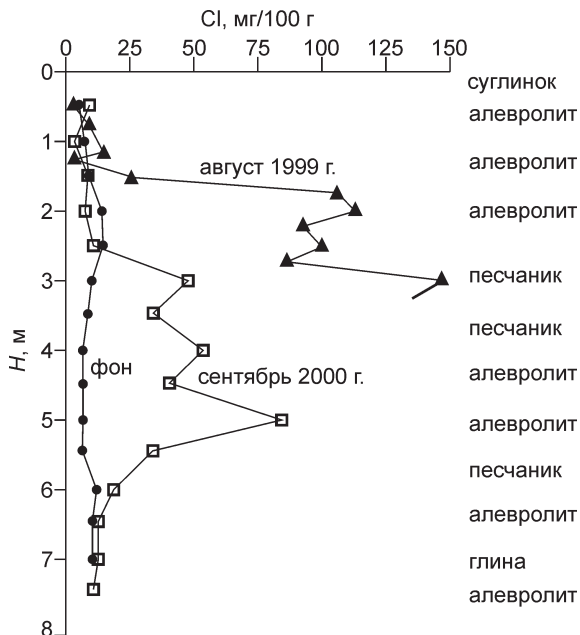


Рис. 12.10. Естественное расслоение пород зоны аэрации после налива раствора с содержанием хлоридов 60 г/л в сентябре 1998 г.

ния распространялась на глубину со скоростью около 1.5 м/год. Перемещение в том же направлении верхней ее границы происходило с постепенным отставанием от нижнего фронта со скоростью около 1 м/год.

12.3.4. Геофизический мониторинг

Геофизический мониторинг позволяет существенно сократить объем буровых и лабораторных работ, ограничив их функции калибровочными и контрольными исследованиями. В настоящем разделе рассматривается пример геофизического мониторинга солевого вторичного источника загрязнения в зоне аэрации по результатам двухлетнего цикла электроразведочных наблюдений на опытной площадке 2, где в полевые сезоны 1999 и 2000 гг. был выполнен полный комплекс электроразведочных наблюдений, включающий электропрофилирование с симметричной установкой (СЭП) и сплошное электроразведочное зондирование (СЭЗ) по профилю 20, пересекающему лог — источник вторичного солевого загрязнения аккумуляционного типа.

В качестве примера на рис. 12.11 показаны псевдоразрезы сопротивлений ρ_k для одного из профилей, построенные по данным СЭЗ в 1999 и 2000 гг. Из анализа этих данных, как и в случае СЭП, следует вполне

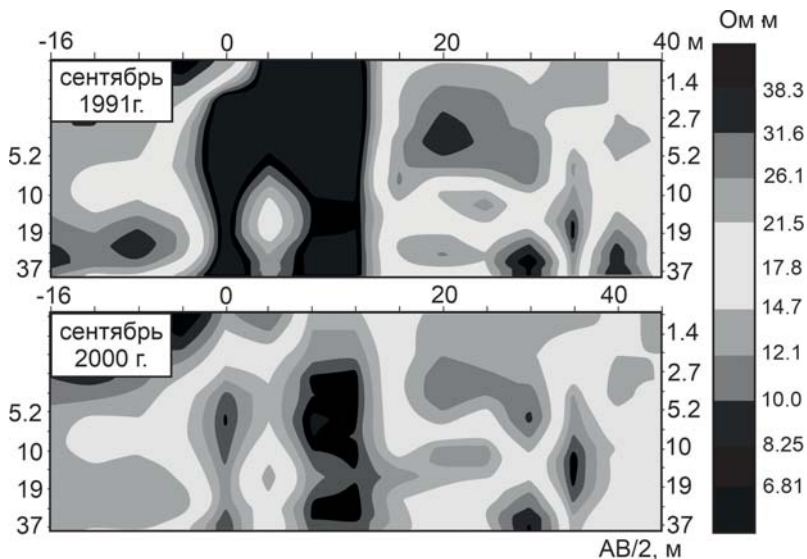


Рис. 12.11. Псевдоразрезы сопротивлений ρ_k .

очевидный вывод о начавшемся процессе реабилитации участка загрязнения в зоне аэрации. Действительно, по сравнению с псевдоразрезом 1999 г. на псевдоразрезе 2000 г. хорошо заметна деградация областей минимальных значений ρ_k , соответствующих загрязненным породам зоны аэрации: 1) существенно сокращается площадь низкоомных участков ($\rho_k < 12 \text{ Ом} \cdot \text{м}$); 2) область минимальных значений смещается ниже дневной поверхности более чем на 1 м; 3) среднее значение в области минимума возрастает вдвое (с 5 до 10 $\text{Ом} \cdot \text{м}$).

12.3.5. Использование тритий/гелий-3 метода определения возраста подземных вод

С целью изучения темпов водообмена и исследования развития засоления подземных вод верхнеказанского водоносного комплекса во времени летом 1997 г. на опытном полигоне «Васильевка» был произведен единовременный отбор проб воды в родниках и водозаборных скважинах для их датирования с помощью изотопного анализа: тритий/гелий-3 метода датирования. Суть метода заключается в том, что для датирования используется комплиментарная пара изотопов — тритий (материнский изотоп) и тритигенный гелий-3 (дочерний изотоп). Таким образом, если измерить в исследуемой воде текущую концентрацию трития, которая является остатком от первоначального его количества в области питания, и концентрацию порожденного этим тритием гелия-3, то по простой фор-

муле радиоактивного распада можно рассчитать время, прошедшее от начала накопления гелия-3 (разд. 7.4.5).

Результаты исследований возраста подземных вод тритий/гелий-3 методом датирования показали довольно большой разброс изотопного возраста опробованных водопунктов от 4 до 14 лет. Одновременно наблюдается отчетливая корреляция возраста и гипсометрического положения родника. Имеется два фактора, которые обуславливают данное распределение. В геоморфологическом отношении водораздельные пространства на полигоне «Васильевка» являются относительно выположенными, а врезы речных долин оказываются довольно глубокими и узкими (долины имеют выпуклый V-образный профиль). Поэтому родники, находящиеся в верхней части склонов, дренируют большие площади, чем родники, имеющие заложение вблизи тальвегов речных долин, гидродинамические уклоны на водораздельных пространствах меньше, что соответствует меньшим скоростям движения подземных вод. Сочетание этих факторов ведет к увеличению времени фильтрации и соответственно возраста подземных вод.

Подводя итог сказанному в настоящей главе, осталось сказать главное. По приближенным оценкам, запасов нефти на месторождениях Республики Татарстан хватит на несколько десятилетий. Продолжается разведка и ввод в эксплуатацию новых мелких месторождений и залежей нефти. На крупных месторождениях остались значительные трудноизвлекаемые запасы нефти в пластах алевролитов. В этих условиях возрастает ответственность за охрану и защиту от загрязнения ресурсов пресных подземных вод, являющихся не менее ценным природным богатством республики, чем нефть.

Часть IV

ЗАГРЯЗНЕНИЕ ПОДЗЕМНЫХ ВОД ЖИДКИМИ УГЛЕВОДОРОДАМИ

Многие химические соединения, находящиеся в жидком состоянии, не смешиваются с водой. При миграции в горных породах они, занимая часть порового (или трещинного) пространства, формируют самостоятельную фазу, находящуюся в контакте с водной или воздушной (если процесс протекает в зоне аэрации или на поверхности потока грунтовых вод) фазами. При этом процесс сопровождается межфазовым массообменом, что приводит к формированию ореолов загрязнения подземных вод растворенными компонентами, входящими в состав несмешивающихся с водой жидкостей и мигрирующими за пределами границы раздела фаз подобно обычным солевым загрязнителям. Исследование такого рода процесса чаще всего связано с необходимостью описания полей загрязнения подземных вод довольно опасными для здоровья людей веществами — углеводородными соединениями.

Описание миграции (фильтрации) несмешивающихся с водой жидкостей (в англоязычной литературе NAPLs — Nonaqueous Phase Liquids) отличается целым рядом особенностей, обусловленных различиями в фазовых проницаемостях и плотностях, капиллярными эффектами, межфазовыми переходами отдельных компонентов и др. Наиболее характерными представителями NAPL являются углеводородные соединения, которые могут отличаться от пластовых вод по плотности как в меньшую сторону — легкие углеводородные соединения, так и в большую — тяжелые углеводородные соединения. В англоязычной литературе широкое распространение получила аббревиатура LNAPLs (Light Nonaqueous Phase Liquids) и DNAPLs (Dense Nonaqueous Phase Liquids). К LNAPL относятся, например, нефтепродукты (такие как топливная нефть, бензин, керосин), к DNAPL — хлорорганические жидкие соединения (такие

как дихлорэтан, трихлорэтан, тетрахлорэтан), а также сложные растворы — креозоты (смесь углеводородных соединений, преимущественно полициклические ароматические углеводороды и фенолы), используемые для обработки древесины (Kueper et al., 2003). Для активно испаряющихся NAPLs нередко используют термин VOC (Volatile Organic Compounds).

При загрязнении грунтовых водоносных горизонтов LNAPL могут образовываться плавающие на поверхности подземных вод скопления (линзы), миграция которых в значительной степени контролируется градиентами естественного фильтрационного потока. При поступлении в водоносный горизонт DNAPL происходит их опускание к его подошве, и процесс контролируется не только (а часто и не столько) гидродинамикой фильтрационного потока, но и морфологией (рельефом) нижнего водоупорного основания. В этом сходство процесса с плановой миграцией рассолов. Во всех случаях масштабы загрязнения подземных вод и пород при их неполном водонасыщении (зона аэрации) определяются также интенсивностью частичного растворения химических соединений, входящих в состав NAPL, и последующем их конвективно-дисперсионным переносом в подземной гидросфере.

Существование границы раздела между фазами и взаимное влияние фаз на проницаемость массива пород — основные факторы, которые отличают поведение NAPL в подземной гидросфере от поведения смешивающихся жидкостей. С прогнозами миграции такого рода контактов и степени взаимного вытеснения жидкостей приходится постоянно иметь дело при оценках течения газа и нефти сквозь пористые пласты в процессе эксплуатации нефтяных месторождений. Процесс имеет также много общего с фильтрацией воды при неполном водонасыщении среды. Поэтому рассматриваемые ниже физико-математические модели во многом унаследовали черты задач, решаемых при анализе условий разработки нефтяных месторождений, а также при агрофизических исследованиях почвенных систем.

В первой главе этой части учебного пособия дается физико-математическая постановка проблемы, рассматриваются параметры, контролирующие поведение NAPL в подземной гидросфере, а также приводятся простейшие аналитические модели, позволяющие выполнить предварительные (разведочные) расчеты распределения NAPL в идеализированных статических и динамических условиях. В следующей главе рассматриваются данные реального мониторинга, иллюстрирующие особенности поведения LNAPL и DNAPL в конкретных гидрогеологических условиях.

Глава 13

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ОПИСАНИЯ ПОВЕДЕНИЯ NAPL В ПОДЗЕМНОЙ ГИДРОСФЕРЕ

13.1. Спецификация многофазной системы

В теории фильтрации под термином «фаза» понимается вещество (однородное или неоднородное по химическому составу), находящееся в определенном физическом (агрегатном) состоянии и занимающее определенный объем порового пространства. Пористая среда может быть заполнена несколькими подвижными (мобильными) жидкими фазами и только одной газовой. В настоящей работе в качестве жидких фаз рассматриваются вода и NAPL (рис. 13.1). Неподвижными являются твердые фазы — минеральный скелет или кристаллическая фаза как продукт агрегатного перехода жидкости в твердое состояние.

Каждая из фаз отделена от других границами раздела, существование которых обусловлено перераспределением сил притяжения между молекулами. В состав каждой из подвижных фаз, за исключением собственно NAPL, могут входить компоненты-представители смежных фаз — ассоциаций индивидуальных

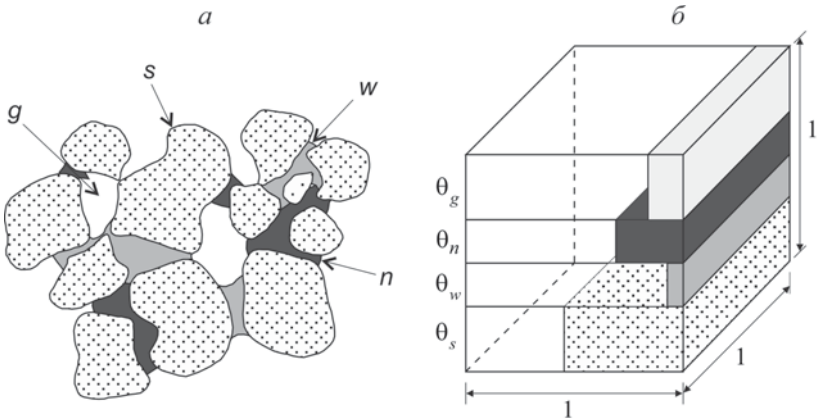


Рис. 13.1. Физическая картина распределения фаз в поровом пространстве (а) и схематическое представление элементарного (единичного) объема пористой среды с распределенными фазами (б).

Здесь и далее: θ_α — объемные содержания фаз ($\alpha = w$ — вода; $\alpha = n$ — NAPL; $\alpha = g$ — газ; $\alpha = s$ — минеральный скелет).

химических элементов и соединений. Массообмен между фазами (растворение, дегазация, испарение, конденсация, адсорбция) может приводить к исчезновению одной из жидких фаз или появлению новой жидкой фазы. NAPL может содержать несколько компонентов, потенциально растворимых в воде. Для водной фазы обычно предполагается, что концентрация растворенных в ней компонентов газовой и органической фаз относительно невысокая, так что процесс растворения подчиняется закону Генри.

Введем несколько основных понятий и определений, характеризующих состояние и параметрическую обусловленность многофазной и многокомпонентной системы (рис. 13.1). В качестве зависимых переменных и физических параметров при математической формулировке соответствующего класса задач подземной гидродинамики рассматриваются:

$\theta_\alpha = \frac{V_\alpha}{V}$ — объемное насыщение породы по α -фазе [L^3L^{-3}],
 V_α — объем α -фазы [L^3], V — объем всех фаз, включая твердую [L^3];

$S_\alpha = \frac{V_\alpha}{nV} = \frac{\theta_\alpha}{n}$ — насыщенность по α -фазе [L^3L^{-3}], n — пористость [L^3L^{-3}].

Для идентификации подвижных фаз используются как цифровые ($\alpha \in \{1, 2, 3\}$, причем индекс 1 относится к воде — более смачивающая фаза, индекс 2 — к органической жидкости (NAPL — менее смачивающая фаза), а индекс 3 — к воздуху), так и буквенные обозначения (например, $\alpha \in \{w, o, g\}$, w — вода, n — NAPL, g — газ/воздух).¹ Очевидно (см. рис. 13.1),

$$\sum_{\alpha=w, n, g, s} \theta_\alpha = 1, \quad \sum_{\alpha=w, n, g} \theta_\alpha = n, \quad \sum_{\alpha=w, n, g} S_\alpha = 1. \quad (13.1)$$

Пусть в элементарном репрезентативном объеме пористой среды происходит совместное течение двух несмешивающихся жидкостей, каждая из которых занимает только часть порового пространства. Если обозначить насыщенность среды по каждой из фаз S_1 и S_2 , то, согласно (13.1), справедливо равенство

$$S_1 + S_2 = 1 \text{ (например, } S_w + S_n = 1 \text{ или } S_w + S_g = 1). \quad (13.2)$$

¹ Буквенные обозначения w, n, g — сокращения английских слов: water (вода), NAPL, gas (gas/воздух). Буквой s (solid) будем обозначать минеральный скелет.

Так как при известной насыщенности по одной из фаз может быть определена насыщенность среды по другой фазе, то из двух характеристик (S_1 и S_2) зависимой остается только одна.

Аналогичным образом можно записать выражение для парциальных насыщенностей в случае трехфазной фильтрации:

$$S_1 + S_2 + S_3 = 1 \text{ (например, } S_w + S_n + S_g = 1), \quad (13.2a)$$

откуда видно, что зависимыми являются уже две переменные.

13.2. Обобщенный закон Дарси

Одной из фундаментальных предпосылок, положенной в основу дальнейшего анализа процесса совместного течения двух или более жидкостей (фаз) в пористой среде, является допущение о разобщенности потоков каждой из жидкостей в поровых каналах: каждая фаза движется под влиянием своего градиента внутрифазового (парциального) давления P_α , не мешая течению соседней фазы (Баренблатт и др., 1984; Басниев и др., 1986). В основе этой предпосылки лежит очевидный физический факт о многократном превышении площади контакта, образованного жидкостями с минеральным скелетом породы, площади контакта между самими жидкостями. Это позволяет пренебрегать силами вязкостного сопротивления между жидкостями при их совместном течении.

Справедливость этого допущения подтверждается большинством физических экспериментов, анализ которых показал их непротиворечивость закону Дарси, определяющем линейную связь скорости фильтрации (v_α) каждой из α фаз с градиентами фазового давления (P_α). Таким образом, несколько фаз, совместно существующих в репрезентативном объеме пористой среды, могут иметь различное давление, что является результатом искривления поверхностей, разделяющих эти фазы. В самом общем векторном виде математическая запись закона Дарси с учетом силы тяжести для многофазной изотермической фильтрации выглядит следующим образом (Баренблатт и др., 1984; Parker et al., 1987):

$$\mathbf{v}_\alpha = -\frac{\mathbf{K}_\alpha}{\mu_\alpha} (\nabla P_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}), \quad (13.3)$$

где P_α — фазовое давление [$\text{ML}^{-1}\text{T}^{-2}$]; \mathbf{K}_α — фазовая проницаемость тензор [L^2]; μ_α и ρ_α — динамическая вязкость [$\text{ML}^{-1}\text{T}^{-1}$] и

плотность $[ML^{-3}]$ жидкости; \mathbf{g} — вектор ускорения силы тяжести $[LT^{-2}]$. Величина \mathbf{K}_α зависит от свойств среды, определяемых ее абсолютной проницаемостью (K) и насыщенностью α фазой (S_α). Но поскольку в двухфазных потоках насыщенность S_2 может быть выражена через насыщенность S_1 ($S_2 = 1 - S_1$), то фазовую проницаемость всегда можно представить в виде функции одной насыщенности ($S \equiv S_1$).

Введя далее понятие *относительной фазовой проницаемости*

$$k_{r\alpha}(S) = \frac{K_\alpha(S)}{K}, \quad (13.4)$$

уравнения (13.3) можно преобразовать к следующему виду:

$$\mathbf{v}_\alpha = -\frac{\mathbf{K}}{\mu_\alpha} k_{r\alpha} (\nabla P_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}); \quad (13.5)$$

здесь \mathbf{K} — абсолютная проницаемость среды $[L^2]$, $k_{r\alpha}$ — относительная фазовая проницаемость $[-]$. Параметр $k_{r\alpha}$ показывает, во сколько раз проницаемость среды для данной фазы оказывается меньше ее абсолютного значения K_{ij} за счет того, что часть порового пространства занята другими фазами.

Уравнение (13.5) описывает движение фаз под влиянием индивидуального (фазового) градиента давления (∇P_α) и гравитационных сил ($-\rho_\alpha \mathbf{g}$).

Межфазовые давления, определяемые разностью фазовых давлений ($P_{\alpha\beta}^c = P_\alpha - P_\beta$), получили название *капиллярных*; например, в трехфазной системе ($g/n/w$) имеем: $P_{gw}^c = P_g - P_w$, $P_{nw}^c = P_n - P_w$ и $P_{gn}^c = P_g - P_n$ (см. разд. 13.3), причем, поскольку $P_{aw}^c = P_{nw}^c + P_{na}^c$, из трех функций капиллярного давления только две являются независимыми. Скорость фильтрации прямо пропорциональна фазовой проницаемости и обратно пропорциональна вязкости фазы.

В гидродинамических построениях обычно пользуются эмпирическими зависимостями $k_{r\alpha} = k_{r\alpha}(S)$, полученными либо посредством прямых динамических экспериментов, в которых устанавливается связь потоков (расходов) флюидов или газов в образцах пород с их насыщенностью, либо аналитических трансформаций капиллярных (гидрофизических) функций $P^c - S$ (P^c — капиллярное давление) (см. 13.4.5). Основываясь на «геометрических» моделях распределения пор по размерам, также можно предсказать поведение функций относительной проницаемости фаз.

Характерной особенностью зависимостей $k_{r\alpha}(S)$ является существование некоторых «критических» точек S_{1c} и S_{2c} , насыщен-

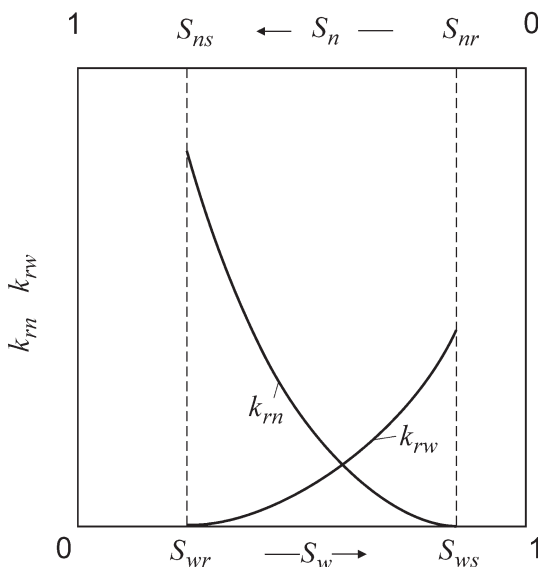


Рис. 13.2. Кривые зависимости относительных фазовых проницаемостей от насыщенности.

S_{wr} и S_{nr} — остаточная фазовая насыщенность; S_{ws} и S_{ns} — полное насыщение w или n фазой при остаточной насыщенности породы другой фазой S_{nr} или S_{wr} .

ности, определяющих физическое состояние и подвижность жидкостей и газов в пористой среде. Для каждой фазы существует минимальная, или остаточная, насыщенность. Например, в двухфазной системе $w-n$ (рис. 13.2) — это насыщенности S_{wr} и S_{nr} , при которых фазы воды и NAPL теряют подвижность.

Потеря подвижности фазы обусловлена потерей связности (непрерывность распределения) соответствующей жидкости в поровых каналах (Митюшин, Разбегина, 2005). Таким образом, значения S_{1r} и S_{2r} характеризуют состояние системы, при котором одна из жидкостей в пористой среде представлена образованиями каплеподобных частиц, гидравлически не связанными с частицами (каплями) в соседних порах. Движение таких дискретных частиц, испытывающих в пористой среде влияние капиллярных сил (см. 13.3.1), возможно только при градиентах давления, многократно превышающих реальные градиенты давления. Поэтому остаточная насыщенность может быть определена как величина насыщенности, слабо меняющаяся (или не меняющаяся вовсе) при существенном увеличении капиллярного давления.

В двухфазной системе $n-w$ характеристика S_{wr} может быть названа *остаточной водонасыщенностью*, а S_{nr} — *остаточной насыщенностью NAPL* (в нефтяных задачах — остаточная нефтенасыщенность). Движение первой фазы может происходить только в том случае, когда $S_w > S_{wr}$, а второй фазы — только при выполнении условия $S_n > S_{nr}$ (рис. 13.2). Соответственно, совместное течение двух жидкостей имеет место, когда насыщенность по первой фазе находится в диапазоне

$$S_{wr} \leq S_w \leq 1 - S_{nr}. \quad (13.6)$$

В обобщенном законе Дарси функция относительной проницаемости $k_{r\alpha}(S)$ отражает способность жидкости двигаться в поровом пространстве, частично занятом другой жидкостью (либо жидкостью и газом). Другими словами, $k_{r\alpha}$ отражает количественную потерю скорости α фазы за счет того, что часть порового пространства занята другой фазой. Асимметричный характер графиков $k_{r\alpha}(S)$ (рис. 13.2), выражающийся в более крутой ветви $k_{rn}(S)$ по сравнению с ветвью $k_{rw}(S)$, говорит о том, что присутствие связной воды (смачивающая фаза) мало влияет на течение несмачивающей жидкости, тогда как присутствие остаточной несмачивающей фазы значительно «стесняет» движение воды (Басниев и др., 2005).

Физически это можно объяснить тем обстоятельством, что вода как смачивающая фаза занимает более мелкие и соответственно менее проницаемые поры, в то время как несмачивающая жидкость заполняет крупные, более проницаемые поры, т. е. вторая фаза является более подвижной в среде и менее зависящей от содержания воды (Charbeneau, 2000). Следует также обратить внимание на то, что сумма проницаемостей для отдельных фаз в многофазовой системе всегда ниже проницаемости породы, установленной по результатам экспериментов с однородными жидкостями (газом).

В целом анализ соответствующих публикаций указывает на большое разнообразие экспериментально выявленных зависимостей $k_{r\alpha}(S)$.

13.3. Явления капиллярности и смачивания

В гидрогеологических задачах многофазовой фильтрации основной интерес представляют взаимодействия на границах раздела фаз: жидкость—жидкость (1—2), жидкость—минераль-

ная поверхность (1—s, 2—s), жидкость—газ (1, 2—g); здесь индексы 1 и 2 относятся к жидким фазам (как правило, 1 — вода (w), 2 — NAPL (n)), s и g — к минеральной и воздушной фазам.

13.3.1. Характеристики, определяющие проявление молекулярных сил на границах раздела фаз

На границе раздела фаз (например, вода—воздух) возникает *поверхностное натяжение*, обусловленное перераспределением сил притяжения между молекулами. Внутри жидкости силы притяжения между молекулами взаимно компенсируются, а на молекулы, находящиеся вблизи поверхности раздела фаз, действует нескомпенсированная результирующая сила, направленная внутрь от поверхности жидкости. В итоге молекулы на поверхности жидкости обладают определенной потенциальной энергией, называемой *поверхностной энергией*.

Межфазное натяжение между двумя жидкостями (1 и 2) будем далее обозначать σ_{21} , а межфазное натяжение между одной (*i*-й) из жидкостей и ее паром — через σ_{31} (или σ_{32}) — *поверхностное натяжение*. В подстрочных индексах принято на первое место ставить индекс менее смачивающей фазы. Единица измерения σ в системе СИ: Н/м = Дж/м². Соотношения между единицами СИ: 1 дин/см = 1 эрг/см² = $1 \cdot 10^{-3}$ Дж/м² = $1 \cdot 10^{-3}$ Н/м. Поверхностное натяжение для жидкостей, находящихся в равновесии с их парами, меняется в диапазоне 10—80 мН/м (миллиньютон/м). Значения для большинства органических жидкостей находятся в диапазоне 20—40 дин/см. Поверхностное натяжение зависит как от свойств самой жидкости, так и среды, с которой жидкость граничит. Межфазное натяжение для поверхности раздела NAPL—вода всегда меньше, чем для поверхности раздела вода—воздух

Другой характеристикой межфазового взаимодействия в капиллярных и пористых средах является *контактный угол* θ_{ij} (статический краевой угол смачивания). Под ним понимается угол, образованный касательной к межфазной поверхности с вершиной в точке раздела фаз. Угол всегда отсчитывается от касательной в сторону более смачивающей фазы. Соотношение, связывающее межфазовые натяжения σ_{is} (*i*-фаза—поверхность) σ_{js} (*j*-фаза—поверхность) и σ_{ij} (*i*-фаза—*j*-фаза), получило название уравнения Юнга:

$$\cos \theta_{ij} = \frac{\sigma_{is} - \sigma_{js}}{\sigma_{ij}}; \quad (13.7)$$

индекс i относится к менее смачивающей фазе, j — к более смачивающей фазе.

В уравнении (13.7) величины поверхностных натяжений σ_{is} и σ_{js} практически неизвестны. Поэтому о соотношении σ_{is} и σ_{js} (т. е. о процессах, происходящих на границе твердой фазы с жидкими фазами) судят по углу θ_{ij} , который служит мерой смачивания жидкостями поверхности твердого тела и, следовательно, представляет косвенную характеристику взаимодействия твердого тела с другими фазами.

Таким образом, уравнение Юнга (13.7) описывает баланс трех межфазовых натяжений в системе, находящейся в равновесии, а угол θ_{ij} характеризует «средство» жидкости и соприкасающейся с ней поверхности материала. С характеристикой θ_{ij} связывается понятие *смачивания*, которое определяется как способность одной жидкости смачивать или растекаться по поверхности твердого тела в присутствии другой жидкости или газа. Когда $\theta^\circ < \theta_{ij} < 90^\circ$, минеральная поверхность предпочтительнее смачивается жидкостью j , нежели жидкостью i . Применительно к динамическим условиям угол θ_{ij} характеризует предпочтительность течения по стенке канала одной жидкости перед другой (в данном случае жидкости j над жидкостью l).

На предельно гидрофильных (весьма хорошо смачиваемых поверхностях) водные капли хорошо растекаются, так что $\theta_{gw} \rightarrow 0^\circ$. В целом контакт воды с большинством гидрофильных поверхностей (в частности, представленных минералами) характеризуется значениями θ_{gw} , меняющимися в диапазоне от 10 до 30° . На гидрофобных поверхностях, плохо смачиваемых водой, $\theta_{gw} = 70\text{—}90^\circ$.

13.3.2. Фазовые давления в капиллярах и пористых средах

Рассмотрим границу раздела несмешивающихся жидкостей в капилляре (рис. 13.3). Величина капиллярного давления, обусловленного поверхностным натяжением, определяется формулой Лапласа:

$$P_{nw} = P_n - P_w = \frac{2\sigma_{nw} \cos\theta_{nw}}{r_c}, \quad (13.8)$$

где r_c — радиус капилляра.

Например, основываясь на формуле (13.8), можно показать, что в песчаниках с размером поровых каналов порядка

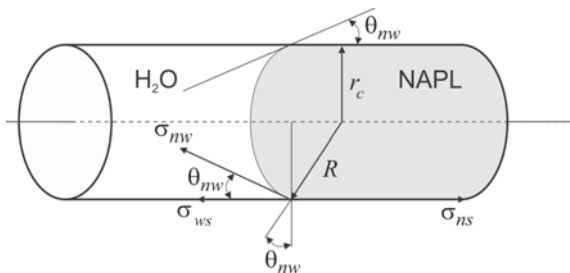


Рис. 13.3. Равновесие в капилляре.

5—10 мкм при характерных значениях межфазовых натяжений 30—50 мН/м капиллярное давление на границе углеводородов с водой может достигать 10 кПа (Митюшин, Разбегина, 2005).

Уравнение Лапласа можно переписать для функции капиллярного напора:

$$h_{mw} = h_n - h_w = \frac{2\sigma_{nw} \cos\theta_{mw}}{\rho_w g r_c}, \quad h_\alpha = \frac{P_\alpha}{\rho_w g} \quad (13.9)$$

($\alpha \in n, w$), причем σ_{nw} — межфазное поверхностное натяжение на контакте жидкостей, ρ_w — плотность воды, g — ускорение свободного падения.

Рассмотренные представления о работе капиллярных сил и возникающих при этом равновесиях, находящих отражение в распределении капиллярных давлений, оказываются весьма полезными для объяснения эффектов, возникающих в пористых средах. Действительно, каждый репрезентативный объем пористой среды характеризуется набором пор различного диаметра, которые могут ассоциироваться с капиллярами. В многофазных системах каждая фаза стремится заполнить такого рода поры-капилляры таким образом, чтобы этот объем отличался минимальной поверхностной энергией контакта фаз с минеральным скелетом. Это достигается, когда наиболее смачивающая жидкость (вода) занимает тонкие (наименьшего диаметра) поры, а наименее смачивающая фаза (воздух) занимает поры наибольшего диаметра, так что для NAPL остается свободным пространство пор среднего диаметра (рис. 13.4). Таким образом, насыщенность среды фазами (S_α) в репрезентативном поровом объеме оказывается связанной с распределением пор по размеру. В этом случае межфазовое (капиллярное) давление становится функцией не размера (диаметра или радиуса) капилляра,

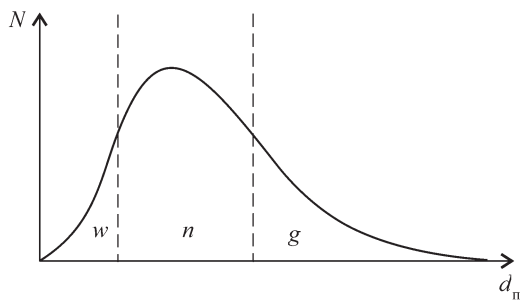


Рис. 13.4. Распределение фаз в поровом пространстве.

g — газ/воздух; n — NAPL; w — вода; d_n — диаметр пор; N — частота встречаемости.

как это, например, следует из моделей единичных обособленных капилляров (13.8), (13.9), а интегральной характеристики — фазовой насыщенности, которая может замеряться инструментально.

Благодаря разности фазовых давлений возникает, в частности, эффект всасывания смачивающей жидкости пористой средой, содержащей менее смачивающую фазу (в частности, воздух). С другой стороны, взаимное вытеснение жидкостей, характеризующихся различными показателями смачивания минерального скелета, приводит к изменению насыщенности среды каждой из жидкостей и как следствие — к возникновению капиллярных давлений.

В течение всех прошедших десятилетий интерес к исследованию функциональной зависимости вида ($P^c \equiv P_{ij}$, $S \equiv S_i$ или $S \equiv S_j$) не ослабевал. Многочисленные эксперименты, связанные с изучением разнообразных пористых сред в условиях насыщения несмешивающимися жидкостями, существенно расширили представления о капиллярных явлениях в многофазных системах. В большинстве экспериментов прослеживаются тенденции процесса, наглядно иллюстрируемые характерным графиком $P^c - S$ на рис. 13.5.

На рисунке хорошо видно, что кривые вытеснения ($n \rightarrow w$) смачивающей фазы несмачивающей фазой имеют критическую точку давления $P_{n \rightarrow w}^{c,e}$ («пороговое» давление), ниже которого кривая насыщенности $P^c - S$ характеризуется сегментом $S \approx 1$ (например, $S \equiv S_1$ — насыщенность по водной фазе). Это значит, что только в области внешнего давления $P > P_{n \rightarrow w}^{c,e}$ несмачивающая жидкость способна преодолеть капиллярные силы и вытеснить из поровой среды смачивающую жидкость. Давление

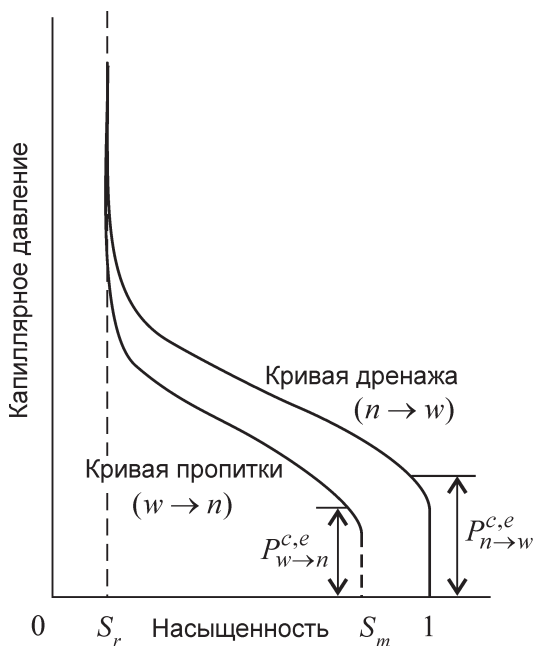


Рис. 13.5. Гистерезис функции капиллярного давления и пороговые давления.

$P_{n \rightarrow w}^{c,e}$ далее будем называть критическим (входным, пороговым) давлением дренажа, превышение которого приводит к быстрому падению насыщенности. В процессе дренажа определенное количество смачиваемой жидкости остается в породе (точка S_r на графике — остаточная насыщенность). Эта жидкость образует прерывистую фазу (скопления каплеобразных частиц и пленки, покрывающие поверхность минеральных частиц) при высоких давлениях.

Обратный процесс вытеснения, когда жидкости меняются местами, на графике $P^c - S$ дает кривую пропитки, которая в силу гистерезисных явлений не совпадает с кривой дренажа. Кривая пропитки также имеет характерную точку перегиба, значение функции P^c в которой $P^c \equiv P_{w \rightarrow n}^{c,e}$: вода не может вытеснить NALP, не превысив критической величины входного давления пропитки $P_{w \rightarrow n}^{c,e}$. Точка S_m на графике рис. 13.5 отвечает остаточной насыщенности по несмачивающей жидкости. В теории влагопереноса в зоне аэрации, где несмачивающей фазой является поровый воздух (g), характеристикам $P_{n \rightarrow w}^{c,e}$ и $P_{w \rightarrow n}^{c,e}$ со-

ответствуют показатели входного давления (высота всасывания) $-\Psi_{ge}$ и $-\Psi_{we}$.

Осталось показать, каким образом межфазовые взаимодействия, контролируемые тензорами межфазового натяжения (σ_{ij}) и контактными углами смачивания (θ_{ij}), определяют распределение капиллярного давления (P_{ij}^c) в горной породе, находящейся в состоянии неполного насыщения, когда в ней одновременно сосуществуют три фазы. Идеалистической моделью элемента такой системы является единичная пора, содержащая все три фазы. Как уже отмечалось, вода, являясь наиболее смачивающей фазой, занимает пространство вблизи контакта с минеральной поверхностью. Центральная часть поры заполнена газом (воздухом). Вода не соприкасается с воздухом, так как между ними находится слой NAPL — фаза, занимающая промежуточное (по смачиваемости) положение.

Отсутствие контакта воды и воздуха означает, что насыщенность породы водой (S_w) есть функция капиллярного давления между водой и NAPL ($P_{nw} = P_n - P_w$). Поскольку вода и газ не имеют общего контакта, суммарная насыщенность жидкостями элемента пористой среды ($S_t = S_n + S_w$) есть функция капиллярного давления между NAPL и газом ($P_{gn} = P_g - P_n$), т. е. две жидкости ведут себя подобно одной жидкости, контактирующей с газовой фазой. Если, наоборот, капиллярное давление рассматривается в качестве функции насыщенности, то $P_{nw} = f(S_w)$, $P_{gn} = f(S_t)$ и $P_{gw} = P_{gn} - P_{nw}$. Это — так называемая концепция *Левверетта*, опубликованная в 1941 г. Эта концепция подразумевает также, что проницаемость среды для водной фазы (относительная фазовая проницаемость k_{rw}) является функцией водонасыщенности (S_w), в то время как относительная фазовая проницаемость k_{rg} — функция суммарной насыщенности S_t .

13.4. Основные параметрические функции, используемые для описания фильтрации NAPL и воды в многофазных системах

Как следует из представленной выше физико-математической постановки задачи, для описания (моделирования) поведения углеводородных жидкостей (NAPL) в пористой среде при ее неполном водонасыщении необходимы представления о характере функциональных зависимостей между фазовыми проницаемостями, насыщенностью и давлением, т. е. информация о $k_r - P^c - S$ -отношениях. Существуют серьезные эксперименталь-

ные трудности получения параметров, определяющих поведение этих функций в системах, представленных одновременно тремя фазами. Поэтому модельный анализ основывается, как правило, на методах, позволяющих предсказывать («конструировать») поведение функций $k_r - P^c - S$ в таких условиях, базируясь на установлении функциональных связей $k_r - P^c - S$ в системах, содержащих только две фазы. Более того, постоянно разрабатываются и совершенствуются расчетные подходы, позволяющие упростить такого рода переход, привлекая двухфазные функции $P^c - S$ для системы вода—воздух. Другой подход — конструирование двух- и трехфазных зависимостей для относительных фазовых проницаемостей с использованием данных о распределении пор по размерам и функций $P^c - S$ при двух- и трехфазной фильтрации.

Такого рода «экстраполяционные» или переходные модели имеют, однако, серьезные ограничения, обусловленные сложностью определения (*a priori*) влияния на $k_r - P^c - S$ -функции остаточной насыщенности среды NAPL и водой при одновременном заполнении породы тремя фазами, а также нестационарностью реального (имеющего место в полевых условиях) процесса и его гистерезисом. Кроме того, принципиальное значение имеет доказательство адекватности экстраполяционных моделей, базирующихся на данных динамических экспериментов в фильтрационных колоннах, реальным природным условиям, где процессы протекают в двух- и трехмерном пространстве. Несмотря на эти ограничения, для исследователей чаще всего не остается другой альтернативы, кроме использования экстраполяционно-параметрических процедур.

13.4.1. Основные модели гидрофизической (капиллярной) характеристики

В любой двухфазной системе $i-j$ существует однозначная связь между капиллярным давлением и насыщенностью породы любой из фаз. Функциональная зависимость, описывающая поведение системы $g-w$, — это соотношение между высотой капиллярного всасывания и влажностью породы, называемое *основной гидрофизической характеристикой*, или сокращенно ОГХ (Пашковский, 1983; Шестаков, Поздняков, 2003). В теории многофазной фильтрации оно также называется *капиллярной характеристикой* (или кривой). Для аппроксимации ОГХ используются аналитические функции (модели), связывающие влажность породы θ (или ее насыщенность S) с капиллярным напором (высотой всасывания) h_{gw} .

Простейшей, и в то же время довольно часто используемой на практике, является показательная функция *Брукса—Корея* (Шестаков, Поздняков, 2003):

$$\bar{S}_w(h_{gw}) = \frac{S - S_{wr}}{1 - S_{wr}} = \begin{cases} \left(\frac{h_d}{h_{gw}}\right)^\lambda & h_{gw} > h_d, \\ 1 & h_{gw} \leq h_d, \end{cases} \quad (13.10)$$

где \bar{S}_w — эффективная насыщенность [-], $h_{gw} = -\psi$ — текущая высота (давление) всасывания (называемая также капиллярным напором (давлением)) [L]; $h_d \equiv -\psi_{ge}$ — входное (пороговое) давление осушения, называемое также «критической» высотой всасывания, при которой воздух прорывается в капиллярно-пористое тело (минимальное капиллярное давление, которое необходимо преодолеть несмачивающей фазе, чтобы проникнуть в поры, занятые смачивающей фазой) [L]; $\lambda (> 0)$ — индекс распределения пор по размерам [-]; θ_w — объемное влагосодержание [L³L⁻³]; θ_{we} — остаточное водонасыщение (доля неподвижной влаги) [L³L⁻³]; θ_{ws} — полная объемная влажность насыщения [L³L⁻³]; $S_w = \frac{\theta_w}{\theta_{ws}}$ и $S_{wr} = \frac{\theta_{wr}}{\theta_{ws}}$ — водонасыщенность (текущая и остаточная).

Не менее популярной, судя по цитируемости в научной литературе, следует признать зависимость *Ван Генухтена* (Van Genuchten, 1980)

$$\bar{S}_w(h_{gw}) = \frac{1}{[1 + (\alpha_{gw} h_{gw})^N]^M}, \quad (13.11)$$

дающая в ряде случаев более точное (в сравнении с 13.10) описание экспериментальных данных. Здесь h_{gw} принимает положительные значения при возрастающем всасывающем давлении; $\alpha_{gw} (> 0)$ — параметр, определяемый средним размером пор [L⁻¹]; обратная величина параметра α_{gw} ($1/\alpha_{gw}$) пропорциональна высоте капиллярного поднятия (h_c); $N (> 1)$ — параметр, зависящий от статистической дисперсии распределения пор по размерам [-]; $M = 1 - 1/N$.

Привлекательность зависимости (13.11) в том, что она благодаря своей гибкости может описывать широкий класс экспериментальных кривых $h_{gw} = f(\theta_w)$, получаемых для самых различных типов пород (Шестаков, Поздняков, 2003).

13.4.2. Экстраполяционные зависимости для двухфазных систем

Соответствующие экстраполяционные процедуры позволяют использовать экспериментальные значения коэффициентов уравнения влагопереноса; например (13.11), могут использоваться для получения расчетных значений, описывающих поведение любой другой двухфазной системы: $g-n$ или $n-w$. В основе этих процедур уравнение Лапласа (13.8), кото-

рое для произвольной пары смачивающей и несмачивающей фазы можно переписать в виде

$$\frac{P_{ij}}{\sigma_{ij} \cos \theta_{ij}} = \frac{2}{r_c}, \quad (13.12)$$

где капиллярное давление P_{ij} , возникающее на контакте каждой из пар жидкостей, определяется следующим образом:

$$P_{ij} = P_i - P_j = \rho_w g h_{ij}. \quad (13.13)$$

Поскольку капиллярное давление $h_{ij} \sim 1/\alpha_{ij}$, а правая часть равенства (13.12) остается неизменной для всех пар, то несложные преобразования, сводящиеся к решению линейной системы уравнений (13.12), дает обобщенное выражение

$$\alpha_{ij} = \frac{\sigma_{gw} \cos \theta_{gw}}{\sigma_{ij} \cos \theta_{ij}} \alpha_{gw}. \quad (13.14)$$

Обычно полагают $\theta_{gw} = 0^\circ$, $\theta_{nw} = 0^\circ$, так что в обобщенном виде можно записать:

$$\alpha_{ij} = \beta_{ij} \alpha_{gw}, \quad (13.14a)$$

где $\beta_{nw} = \sigma_{gw} / \sigma_{nw}$, $\beta_{gn} = \sigma_{gw} / \sigma_{gn} \cos \theta_{gn} \approx \sigma_{gw} / \sigma_{gn}$.

13.4.3. Относительная фазовая проницаемость

В подземной гидродинамике, имеющей дело с многофазными системами, используются главным образом две категории моделей проницаемости фильтрующих сред. Первая основана на использовании эмпирических (обычно степенного вида) зависимостей, связывающих относительную фазовую проницаемость ($k_{r\alpha}$) с фазовой насыщенностью (S_α) или объемным содержанием (θ_α) в породе одной из фаз (обычно водной). Вторая категория моделей (иногда называемых геометрическими) основана на аналитических трансформациях капиллярных функций $h_{ij}(S_\alpha)$ ($\alpha = i, j$ — индексы несмачивающей и смачивающей фаз) (13.3.2); для этого используются модели идеализированных пористых (капиллярных) сред, устанавливающих связь фазовых проницаемостей с распределением пор по размерам, которое, в свою очередь, и находит отражение в функциях капиллярного напора h_{ij} .

В работах по физике нефтяного пласта можно найти целый ряд функциональных зависимостей $k_{r\alpha}(S)$. При этом, однако, разумно использовать простейшие способы аппроксимации параметра относительной проницаемости, имея в виду, что в большинстве случаев они являются достаточными, если учитывать погрешности, которые вносятся при определении других параметров, прежде всего — абсолютной проницаемости пород.

Простейшей для двухфазной системы является степенная зависимость вида

$$k_{rj} = \bar{S}_j^p, \quad k_{ri} = (1 - \bar{S}_j)^p; \quad (13.15)$$

здесь, как и прежде, индексы j и i относятся к смачивающей и несмачивающей фазам; показатель степени p для реальных пород обычно больше 2—3. При концептуальном анализе процессов рассматривается диапазон $p = 1—4$. В двухфазной системе $g—w$ функция связана с коэффициентом влагопереноса соотношением $k_{rw}(\bar{S}_w) = k(\theta)/k_s$ (k_s — коэффициент фильтрации при полном насыщении). Поэтому, в частности, первую формулу в (13.15) можно $k_{rj} \equiv k_{rw}(\bar{S}_w)$ рассматривать в качестве одной из форм представления зависимости С. Ф. Аверьянова (Шестаков, 1995).

Спектр изученных сред с точки зрения описания их фазовой проницаемости расширяется, если для построения зависимостей $k_{r\alpha}(S_\alpha)$ ($\alpha = i, j$ — соответственно для несмачивающей и смачивающей жидкостей) привлекаются гидрофизические или, в более широком смысле, капиллярные функции (см. разд. 13.3.2).

Для построения зависимостей $k_{r\alpha}(S)$ наиболее популярными в почвенной физике являются модели Бурдайна и Муалема. Им соответствуют следующие трансформации базовых капиллярных функций, записанные для относительной проницаемости смачивающей фазы (например, w). Преобразование Муалема для модельной функции Брукса—Корея (13.10) дает выражение для коэффициента k_{rw}

$$k_{rw}(\bar{S}_w) = \bar{S}_w^{(2+\lambda L+2\lambda)/\lambda}, \quad (13.16)$$

используемое для описания фильтрации воды в двухфазной ($g—w$) системе.

Аналогичное преобразование Муалема для функции Ван Генухтена (13.11) приводит к зависимости (Van Genuchten, 1980):

$$k_{rw}(\bar{S}_w) = \bar{S}_w^L [1 - (1 - \bar{S}_w^{1/M})^M]^2, \quad L = 1/2. \quad (13.17)$$

13.5. Межфазовый обмен

Масштабы загрязнения подземных вод и пород зоны аэрации NAPL во многом определяются процессами обмена веществом между исходными продуктами в составе NAPL, поровыми водами, газом и минеральным скелетом (рис. 13.6). К таким процессам относятся растворение, испарение и адсорбция. Для их описания чаще всего используется предпосылка о существовании локального равновесия на контакте фаз, обеспечивающего насыщение веществом NAPL приграничного слоя жидкости или газа до предельного значения (отвечающего концентрации максимальной растворимости компонента в данных условиях).

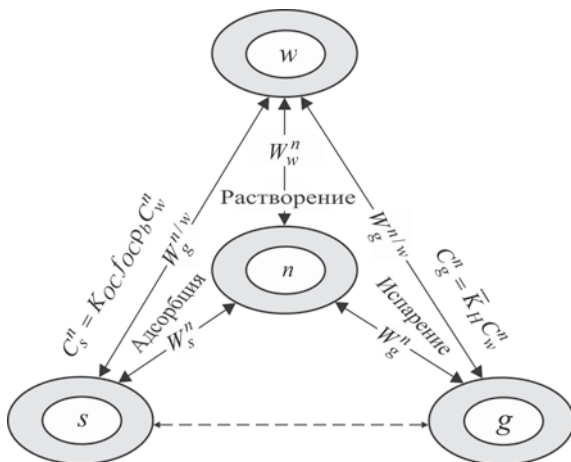


Рис. 13.6. Схематическое представление основных межфазовых взаимодействий в трехфазовой системе ($g-n-w$).

W_{α}^{β} — массовые потоки неравновесных межфазовых реакций; C_s^n и C_g^n — равновесные концентрации NAPL в твердой и газовой фазах.

Описание массовых потоков и баланса вещества при межфазовом обмене требует введения понятия концентрации вещества одной из фаз (фазовая компонента β) в смежных α -фазах C_{α}^{β} (см. разд. 13.1). В простейшем случае трехфазной системы $g-n-w$, где возможны переходы NAPL в водную и газовую фазы, образование паров воды, а также растворение в воде газа: $\alpha \in \{w, n, g\}$, $\beta \in \{w, n \equiv c, g \equiv a\}$, c — органический компонент, a — воздух. Суммарная концентрация компонентов фазы определяется как

$$C_{\alpha} = \sum_{\beta} C_{\alpha}^{\beta}, \quad (13.18)$$

так что $C_w = C_w^w + C_w^n + C_w^g$ (C_w^w — концентрация воды, C_w^n и C_w^g — концентрации растворенных в воде NAPL и газа); $C_g = C_g^g + C_g^n + C_g^w$ (C_g^g — концентрация воздуха, C_g^n и C_g^w — концентрации NAPL и паров воды в газовой фазе); размерность концентраций $[ML^{-3}]$ или $[mol L^{-3}]$. Полагается, что NAPL, являясь самостоятельной фазой, не может содержать воду и газ в качестве фазовых компонент, т. е. $C_n = C_n^n \equiv \rho_n$ — плотность NAPL. Концентрация C_{α}^{β} может иметь как весовое, так и мольное выражение.

Наибольшее распространение получили модели, постулирующие линейную связь между интенсивностью обменного процесса (величина массового потока J_{α}^B) и дефицитом насыщения веществом одной фазы другою, — так называемые модели кинетики первого порядка. Межфазовые обменные процессы сопровождаются деструкцией (распадом) органических соединений. Эти процессы также в большинстве случаев описываются реакциями первого порядка. Разрушение нефтепродуктов в подземной среде происходит под действием разнообразных химических и биологических процессов (Гольдберг, Газда, 1984; Огняник и др., 2006). Остановимся на математической формализации двух наиболее значимых процессов: растворении и сорбции.

13.5.1. Растворение

К настоящему времени накоплен достаточно обширный экспериментальный материал, подтверждающий практическую приемлемость описания процесса растворения однокомпонентного NAPL в рамках кинетической модели:

$$W_w^n = k_w^n a_s ({}^{sat}C_w^n - C_w^n), \quad (13.19)$$

где W_w^n — объемный массовый поток из несмешивающейся с водой жидкой фазы в водную фазу [$ML^{-3}T^{-1}$]; k_w^n — коэффициент массопереноса через поверхность контакта NAPL/вода [LT^{-1}]; a_s — удельная поверхность раздела между фазами [L^2L^{-3}]; C_w^n — текущая концентрация [ML^{-3}], — ${}^{sat}C_w^n$ равновесная концентрация насыщения водной фазы продуктом растворения NAPL (растворимость NAPL) [ML^{-3}].

Интенсивность обмена NAPL с водной фазой зависит от свойств NAPL, характеристик пористой среды, а также от распределения NAPL в поровом пространстве. Трудности описания геометрии контакта NAPL—вода (находящей отражение в параметре a_s) в пористой среде вынуждают пользоваться некоторыми эмпирическими соотношениями.

13.5.2. Сорбция

Сорбционные процессы оказываются наиболее значимыми для растворенных форм углеводов, поскольку явления «связывания» породой исходных (жидких) NAPL в процессе их

фильтрационного переноса в большей степени обусловлены капиллярными эффектами. Для описания адсорбции растворенного органического вещества может использоваться простейшая кинетическая линейная модель

$$W_s^{n/w} = \frac{dC_s^n}{dt} = K_s^{n/w}(C_s^n - K_d \rho_b C_w^n), \quad (13.20)$$

где C_s^n — концентрация NAPL на минеральном скелете [ML^{-3}]; $K_s^{n/w}$ — кинетическая константа [T^{-1}]; K_d — коэффициент равновесного адсорбционного распределения [L^3M^{-1}]; $\rho_b = (1 - n)\rho^s$ — объемная плотность породы [ML^{-3}]; ρ^s — плотность скелета [L^3M^{-1}].

Для равновесного ($K_s^{n/w} \rightarrow \infty$) процесса

$$C_s^n = \rho_b K_d C_w^n. \quad (13.21)$$

Продукты растворения NAPL, относящиеся в своем большинстве к гидрофобным органическим соединениям, практически не сорбируются минеральной фазой. Однако наблюдается линейная зависимость K_d от содержания в породе органического углерода f_{OC} . Таким образом, K_d можно выразить как функцию от содержания природного органического углерода и коэффициента адсорбционного распределения растворенного NAPL на этом веществе:

$$K_d = f_{OC} K_{OC}; \quad (13.22)$$

здесь f_{OC} — исходное относительное содержание органического вещества в породе [MM^{-1}] (обычно в миллиграммах органического углерода на миллиграмм незагрязненной породы); K_{OC} — коэффициент сорбционного распределения на органическом углероде [L^3M^{-1}] (обычно $\text{cm}^3/\text{г}$).

Значения параметра f_{OC} меняются в довольно широком диапазоне — от сотых долей до первых процентов (предпочтительным является диапазон 0.5—1.0 %). Поэтому вариации коэффициента K_d для различных веществ также могут быть весьма существенными. Анализ опытного материала показывает, что для галогенных углеводородов значения f_{OC} , превышающие 0.1 %, являются значимыми с точки зрения влияния адсорбционного процесса на транспорт органических соединений подземными водами.

Анализ адсорбционных процессов, сопровождающих миграцию органических соединений, может быть упрощен, поскольку коэффициент K_{OC}

определяется расчетным путем, т. е. адсорбционные лабораторные опыты не являются обязательными (по крайней мере, на стадии экспертных оценок). Исследованиями установлена положительная линейная корреляция K_{OC} с коэффициентом распределения веществ в системе октанол—вода K_{OW} :

$$K_{OC} \approx 0.63 K_{OW}. \quad (13.23)$$

Уравнения (13.22) и (13.23) позволяют предсказать сорбируемость гидрофобных органических соединений на основе справочных величин и данных о содержании органического углерода в породе. В то же время такой подход может приводить к переоценке сорбционных свойств пород, особенно при низких содержаниях в них органического вещества. Более надежные результаты дают прямые оценки коэффициента адсорбционно-го распределения в лабораторных и полевых условиях.

В качестве примера приведем значения $\log K_{OC}$ (см³/г) для некоторых углеводородных соединений: о-ксилол = 2.84, бензол = 1.58—1.81, 1,2-дихлорэтан = 1.28, 1,1,1-трихлорэтан = 2.3.

В целом, как видно, адсорбция растворенных углеводов является довольно сложным для экспериментального изучения и математического описания процессом.

13.6. Фильтрация в отсутствии межфазового обмена

Вывод уравнения неразрывности в дифференциальной форме для многофазного потока, основанный на рассмотрении массового баланса каждой из фаз, приводится в многочисленных учебниках и работах монографического характера. В наиболее общем виде (для трехфазового потока) результат соответствующих балансовых построений выглядит следующим образом (Bear, 1972):

$$\frac{\partial(nS_{\alpha}\rho_{\alpha})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}) = 0; \quad (13.24)$$

здесь индекс $\alpha \in \{1, 2, 3\}$ отвечает условному номеру фазы (1 — вода, 2 — NAPL, 3 — газ); ρ_{α} — плотность фазы.

Пренебрегая упругостью среды, уравнение (13.24) можно преобразовать к виду

$$n \frac{\partial S_{\alpha}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_{\alpha}) = 0. \quad (13.25)$$

Компоненты скорости фильтрации в уравнении (13.25) определяются градиентами давлений, текущими насыщенностями

среды и силой тяжести. Поэтому первый, прямой, способ математического описания процесса сводится к совместному рассмотрению фазовых давлений и насыщенности в качестве взаимозависимых переменных. Данный подход обычно используется для поиска решения задач пространственной (двух- и трехмерной) многофазной фильтрации численными методами.

Другой подход к построению математической модели процесса сводится к исключению из исходной системы уравнений функций фазовых давлений, когда полагается, что единственной обобщенной функцией процесса может быть насыщенность. Такой подход позволяет в некоторых случаях получить решение краевой задачи в замкнутом аналитическом виде.

Покажем последовательность математических операций, позволяющих найти новую форму представления уравнений неразрывности в (13.25) на примере *двухфазной* фильтрации ($\alpha \in \{1, 2\}$).

Как следует из уравнений (13.24), описание совместной фильтрации двух несмешивающихся жидкостей сводится к рассмотрению следующей системы уравнений:

$$\begin{aligned} n \frac{\partial S_1}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}_1 &= 0, \\ n \frac{\partial S_2}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}_2 &= 0, \\ \nabla P_2 - \nabla P_1 &= \nabla P^c; \end{aligned} \quad (13.26)$$

эти уравнения при их дополнении очевидным равенством

$$S_1 + S_2 = 1 \quad (13.26a)$$

делают задачу замкнутой.

Полагая, как и ранее, $S_1 = S$, $S_2 = 1 - S$, исключим из системы уравнений (13.26) одно из значений насыщенности. В результате получаем следующую замкнутую систему уравнений:

$$\begin{aligned} n \frac{\partial S}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}_1 &= 0, \\ -n \frac{\partial S}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}_2 &= 0, \\ \nabla P_2 - \nabla P_1 &= \nabla P^c, \end{aligned} \quad (13.27)$$

где $\mathbf{v}_\alpha = -\gamma_\alpha(S) \mathbf{K}(\nabla P_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g})$,

$$\gamma_\alpha = \frac{k_{r\alpha}(S)}{\mu_\alpha} \quad (13.27a)$$

— подвижность α -фазы.

Система из трех уравнений (13.27) включает три зависимые переменные: S , P_1 и P_2 . В качестве одной из операций дальнейшего преобразования системы (13.27) можно предложить суммировать правые и левые части уравнений неразрывности (13.27), что дает

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (13.28)$$

где векторная функция \mathbf{v} является суммарной скоростью двухфазного потока:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2. \quad (13.28a)$$

Равенство дивергенции \mathbf{v} нулю (13.28) означает, что скорость \mathbf{v} является либо постоянной величиной, либо функцией, зависящей только от времени.

Используя выражение для фазовых скоростей потока (13.5), запишем уравнение для суммарной скорости

$$-\mathbf{v} = \mathbf{K}[\gamma_1 \nabla P_1 + \gamma_2 \nabla P_2 - (\gamma_1 \rho_1 + \gamma_2 \rho_2) \mathbf{g}]. \quad (13.29)$$

Тогда, подставляя ∇P_2 из третьего уравнения системы (13.27) в уравнение (13.29), получаем

$$-\nabla P_1 = \frac{\mathbf{v} + \gamma_2 \mathbf{K} \nabla P^c - \mathbf{K}(\gamma_1 \rho_1 + \gamma_2 \rho_2) \mathbf{g}}{\mathbf{K}(\gamma_1 + \gamma_2)}. \quad (13.30)$$

Это позволяет найти следующие соотношения между фазовыми скоростями фильтрации и функцией насыщенности:

$$\mathbf{v}_1 = f \mathbf{v} - \mathbf{h} \nabla S + \gamma_2 f \mathbf{K} \Delta \rho \mathbf{g}, \quad (13.31)$$

$$\mathbf{v}_2 = (1 - f) \mathbf{v} + \mathbf{h} \nabla S - \gamma_2 f \mathbf{K} \Delta \rho \mathbf{g}, \quad (13.31a)$$

где

$$f \equiv f(S) = \frac{\gamma_1}{\gamma_1 + \gamma_2} = \frac{k_{r1}(S)}{k_{r1}(S) + \bar{\mu} k_{r2}(S)},$$

$$\mathbf{h} \equiv \mathbf{h}(S) = -\frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \mathbf{K} \frac{dP^c}{dS}, \quad (13.32)$$

$f(S)$ — так называемая *функция Бакли—Левверетта* (Чарный, 1963; Баренблатт и др. 1972; Басниев и др., 1986), определяющая в данном контексте полноту вытеснения NAPL водой; $\Delta \rho = \rho_1 - \rho_2$, $\bar{\mu} = \mu_1/\mu_2$.

Нетрудно заметить, что в отсутствии капиллярных и гравитационных эффектов ($dP^c/dS = 0$ и $\Delta \rho = 0$) функция Бакли—Левверетта представляет собой объемную долю вытесняющей жидкости (в рассматриваемой постановке задачи — вода) в суммарном фильтрационном потоке двух фаз:

$$\mathbf{v}_1 = f(S) \mathbf{v}, \quad (13.33)$$

так что $f(S)$ является своего рода функцией фракционирования. Соответственно

$$\mathbf{v}_2 = (1 - f(S))\mathbf{v}. \quad (13.33a)$$

Полученные соотношения позволяют свести исходную систему уравнений (13.27) к одному уравнению для функции насыщенности:

$$n \frac{\partial S}{\partial t} + \nabla \cdot (f\mathbf{v} - \mathbf{h}\nabla S + \gamma_2 f \mathbf{K}\Delta\rho\mathbf{g}) = 0. \quad (13.34)$$

Существование очевидных равенств

$$\nabla \cdot (f\mathbf{v}) = f\nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla f, \quad \nabla f = \frac{df}{dS} \nabla S \quad \text{И} \quad \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (13.34a)$$

позволяет преобразовать уравнение (13.34) к виду

$$n \frac{\partial S}{\partial t} + f' \mathbf{v} \cdot \nabla S - \nabla \cdot (\mathbf{h}\nabla S) + \nabla \cdot G = 0, \quad (13.35)$$

подобному линейному уравнению конвективной теплопроводности (диффузии) с дополнительным («гравитационным») источником: $G = f\gamma_2 \mathbf{K}\Delta\rho\mathbf{g}$. Когда конвективный член $f' \mathbf{v} \cdot \nabla S$ доминирует, уравнение (13.35) ведет себя подобно гиперболическому уравнению первого порядка. Когда преобладает «кондуктивный» член $\nabla \cdot (\mathbf{h}\nabla S)$, велика роль капиллярных эффектов, а уравнение (13.35) тяготеет к параболическому виду.

При $P^c = 0$ и $\Delta\rho = 0$ уравнение неразрывности (13.35) для каждой из фаз принимает следующий вид:

$$n \frac{\partial S_\alpha}{\partial t} + f'_\alpha \mathbf{v} \cdot \nabla S_\alpha = 0, \quad \alpha = 1, 2 \quad (13.36)$$

$$f_1 = \gamma_1/(\gamma_1 + \gamma_2), \quad f_2 = \gamma_2/(\gamma_1 + \gamma_2), \quad (13.36a)$$

Уравнение (13.36) часто называют уравнением Бакли—Левверетта, описывающим двухфазную систему в условиях, когда можно пренебречь капиллярным давлением и влиянием силы тяжести.

Для нахождения полного решения представленных здесь уравнений (при соответствующим образом сформулированных краевых условиях) необходимо привлечение методов численного моделирования. В то же время ряд полезных закономерностей может быть установлен на основе анализа частных аналитических решений рассмотренных уравнений.

Так, для одномерных потоков уравнение (13.36) при $\alpha = 1, 2$ можно представить в следующем обобщенном виде (Баренблатт и др., 1972):

$$n \frac{\partial S}{\partial t} + q_v(t) \frac{f'(S)}{x^{v-1}} \frac{\partial S}{\partial x} = 0, \quad (13.37)$$

где $v = 1, 2, 3$ — соответственно для линейного, радиального и сферического течений, $q_v(t)$ — суммарный расход жидкости через трубку тока [$q_{v=1}(t) \equiv v(t)$, $q_{v=2}(t) \equiv Q(t)/2\pi m$, $q_{v=3}(t) \equiv Q(t)/4\pi$ — для линейного, радиального и сферического вытеснения], S — насыщенность по первой фазе.

Уравнение (13.37) является дифференциальным уравнением в частных производных гиперболического типа. После введения новых независимых переменных

$$\eta = \frac{1}{v} \left(\frac{x}{x_0} \right)^v \quad \text{и} \quad \tau = \int_0^t \frac{q_v(t')}{n x_0^v} dt' \quad (13.37a)$$

оно преобразуется к виду

$$\frac{\partial S}{\partial \tau} + f'(S) \frac{\partial S}{\partial \eta} = 0; \quad (13.38)$$

здесь x_0 — характерный линейный размер.

Уравнению в частных производных первого порядка (13.38) соответствует система характеристических уравнений

$$\frac{d\tau}{1} = \frac{d\eta}{f'(S)} = \frac{dS}{0}. \quad (13.39)$$

Общее решение системы представляется в виде

$$\eta(S) = f'(S)\tau + \eta_1, \quad \frac{dS}{d\tau} = 0 \quad (\text{или } S = \text{const}), \quad (13.40)$$

где η_1 — начальное распределение. Таким образом, в плоскости (η, τ) характеристики представляют собой прямые линии: каждое значение насыщенности S распространяется со скоростью $d\eta/d\tau$, пропорциональной производной функции $f'(S)$.

Область применения уравнения (13.38) и его решения (13.40) определяется условием непрерывности функции насыщенности (а также производной $\partial\eta/\partial S$), так что специфика решения фильтрационных задач в рамках данной модели (Бакли—Левретта) связана с характером функции $f'(S)$, определяющей скорость смещения различных точек S профиля насыщенности, а также с начальными условиями. Действительно, функция $f(S)$ имеет точку перегиба, а ее производная $f'(S)$ — экстремум (рис. 13.7), вследствие чего одному значению $f'(S)$ могут соответствовать две различные насыщенности. Поэтому при решении задач двухфазной фильтрации необходимо учитывать появление поверхностей разрыва («скачков» насыщенности), при переходе через которые насыщенность принимает конечную величину и происходит стабилизация скорости смещения изолиний насыщенности на фронте вытеснения. Остановимся на этом ключевом аспекте математического описания данного процесса.

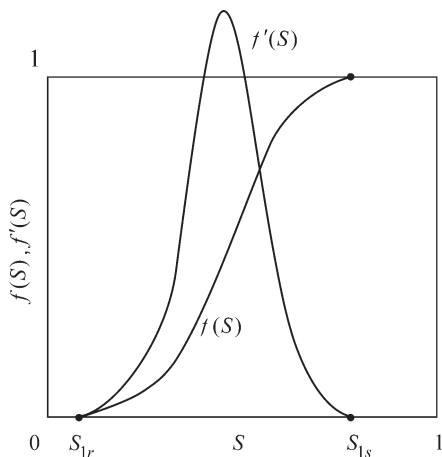


Рис. 13.7. Характер графиков функций $f(S)$ и $f'(S)$.

Положим для определенности, что начальное распределение насыщенности в пласте $S = S^0$, причем $0 < S_0 \leq S_1$. Насыщенность потока на границе $\eta = 0$ составляет S_0 , причем $S_{1s} \leq S_0 \leq 1$, а $f'(S)$ — безразмерная скорость распространения насыщенности заданной величины. В начальный момент времени все точки $S(\eta)$, для которых $S_{1r} < S < S_{1s}$, начнут перемещаться со скоростями, определяемыми значениями функции $f'(S)$, причем чем больше насыщенность, тем больше скорость смещения соответствующей характеристики. Так как функция $f'(S)$ является немонотонной, то очень скоро оказалось бы, что каждой текущей координате соответствуют два значения существенно различающейся насыщенности [а при неоднородном начальном условии — и три значения S (Чарный, 1963; Басниев и др., 1986)]. Кроме того, точки, характеризующиеся более высокими значениями насыщенности, опережали бы точки с меньшими ее значениями. Понятно, что это противоречит физической логике: в каждом сечении в любой момент времени должна существовать одна насыщенность. Такая неопределенность устраняется введением понятия *скачка насыщенности* (Чарный, 1963; Баренблатт и др., 1984), формирование которого ограничивает область применимости уравнения (13.38) и соответствующего ему решения (13.38). Последнее было получено в предпосылке о непрерывности и гладкости профиля насыщенности как функции η и τ . Условие на скачке насыщенности и скорость смещения соответствующего фронта могут быть определены из уравнений сохранения (баланса) масс жидкостей (фаз) в элементарном объеме пористой среды, ограниченном поверхностями A слева (A^-) и справа (A^+) от фронта насыщенности, на котором происходит разрыв (скачок) функции S . Результирующая формула имеет вид (Баренблатт и др., 1972; Басниев и др., 2005):

$$\left(\frac{d\eta}{d\tau}\right)_c = \frac{f^- - f^+}{S^- - S^+}, \quad (13.41)$$

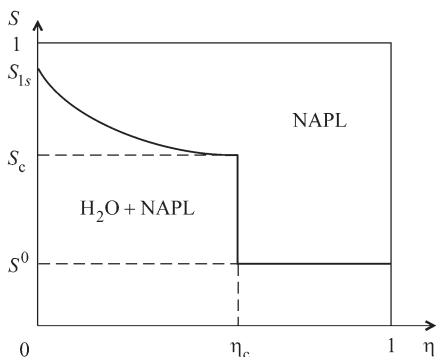


Рис. 13.8. Графическое представление решения для функции насыщенности.

$$S(\eta, \tau) = S^0 (\leq S_{1s}), S(0, \tau) \geq S_{1s} (\leq 1).$$

где $f^\pm = f(S^\pm)$. При постоянной начальной насыщенности (S^0) $S^+ = S^0$, а $S^- = S_c$ (насыщение на фронте). Этим значениям соответствуют вполне определенные значения функции $f(S)$. Интегрирование уравнения (13.41) дает

$$\eta_c = \frac{f^- - f^+}{S^- - S^+} \tau + (\eta_0)_c, \quad (13.42)$$

где $(\eta_0)_c$ — положение скачка при $\tau = 0$; при постоянном начальном распределении $S(\eta_0)_c = 0$.

С другой стороны, если $S_c = \text{const}$, то из уравнения (13.40) следует:

$$\left(\frac{d\eta}{d\tau} \right)_c = f'(S_c). \quad (13.43)$$

Как видно, скорость смещения скачка определяется одновременно и равенством (13.41), (13.43), что позволяет рассчитать собственно значение S_c , воспользовавшись тождеством:

$$f'(S_c) = \frac{f(S_c) - f(S^0)}{S_c - S^0}. \quad (13.44)$$

Таким образом, процесс, схематично представленный на рис. 13.8, описывается: 1) уравнением (13.40), дающим представление о профиле насыщенности $S(\eta, \tau)$ в области непрерывного изменения этой функции; 2) уравнением (13.42), описывающими скорость и положение скачка насыщенности; 3) уравнением (13.44), определяющим величину скачка S_c .

Глава 14

ПРИМЕРЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ПРОГНОЗ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПОДЗЕМНЫХ ВОД NAPL

Углеводороды являются, пожалуй, наиболее распространенным видом загрязняющих веществ, встречающихся в подземных водах. Основные причины загрязнения — аварийные разливы углеводородных жидкостей на поверхности и скрытые их утечки из наземных, а также подземных резервуаров и заглубленных трубопроводов (Гольдберг, Газда, 1984; Гольдберг и др., 2001; Огняник и др. 2006). Даже в такой высокотехнологичной стране, как США, отличающейся жесткими природоохранными требованиями и стандартами, ежегодное количество случаев неконтролируемого высвобождения углеводородов измеряется многими десятками тысяч (Saleem et al., 2004). В России масштабное углеводородное загрязнение подземных вод связано в первую очередь с прямыми утечками нефтепродуктов на нефтеперерабатывающих заводах, сточных вод — на нефтепромыслах, а также потерями сырой нефти. Так, по разным оценкам, потери углеводородного жидкого топлива при транспортировке и хранении колеблются в среднем диапазоне от 0.1 до 0.5 % от общего объема «перевалки» нефтепродукта (Гольдберг и др., 2001). В отдельных случаях масштабы углеводородного загрязнения подземных вод принимают катастрофический характер.

Такие ситуации являются трудно контролируемыми, поскольку точные (а в большинстве случаев и приближенные) объемы загрязняющих веществ, поступающих в подземную гидросферу, остаются неизвестными, а в случаях проявления скрытых утечек неизвестными оказываются и временные диапазоны существования источников загрязнения, т. е. история событий. Поэтому полевые опробования и расчеты, направленные на оценку исходных масштабов загрязнения и восстановление его истории на конкретных участках, занимают одно из центральных мест в общем комплексе гидрогеологических исследований, включающих также прогнозирование и обоснование реабилитационных мероприятий. В целом эти исследования на всех их стадиях требуют описания миграционных процессов, учитывающего особенности многофазной фильтрации.

14.1. Особенности поведения NAPL в подземной гидросфере (качественный анализ)

Различия в физических и химических свойствах воды и жидких углеводородных соединений (NAPL) способствуют формированию физической границы раздела между жидкостями, которая предохраняет их от смешивания. Жидкости, не смешивающиеся с водой, подразделяются по плотности на «легкие» (LNAPL) и «тяжелые» (DNAPL), плотности которых соответственно ниже и выше плотности воды.

14.1.1. Типы и свойства NAPL

Углеводородные соединения (NAPL) существуют в подземной гидросфере в четырех фазах: собственно NAPL (*свободные* углеводороды), обычно представляющие собой смесь нескольких углеводородных жидкостей; *растворенные* компоненты NAPL, переходящие в результате растворения в водную фазу; компоненты NAPL, *испарившиеся* с водной поверхности или поверхности NAPL и перешедшие в газовую фазу; наконец, компоненты NAPL, *адсорбированные* твердой фазой (минеральная поверхность горной породы). В породе постоянно осуществляется обмен между компонентами, находящимися в различных фазах. Направленность обменных процессов зависит от внешних гидродинамических и термодинамических условий.

LNAPL — это обычно нефть и продукты ее переработки (нефтепродукты), представляющие собой смесь широкого спектра органических веществ. Количество соединений в смеси достигает многих сотен и тысяч, однако физические и химические свойства определены примерно для 250 соединений, а токсикологическая информация существует только для 10 % из идентифицированных веществ (Berkowitz et al., 2008).

Физические свойства различных сортов нефти и нефтепродуктов заметно различаются между собой. Органические вещества, входящие в состава LNAPL, характеризуются различной растворимостью в воде. Некоторые из них (например, метил-тетрабутил и спирты) отличаются особо высокой растворимостью. Другие вещества (например, н-додекан и н-гептан), напротив, довольно плохо растворяются в воде. Промежуточное положение по растворимости занимают, например, бензол, толуэн, этилбензол и ксилолы, характеризующиеся средней растворимостью в воде (Berkowitz et al., 2008).

Наиболее типичными и распространенными представителями DNAPL являются хлорорганические соединения. Среди них особое место занимают трихлорэтан (ТСЕ), тетрахлорэтан (РСЕ) и тетрахлорметан (четырёххлористый углерод, СТ или СТЕТ) — вещества, производство которых начиная с середины XX в. достигло особо значительных объемов. Плотность большинства DNAPL находится в диапазоне от 1.1 до 1.6 г/см³, вязкость — от 0.57 до 1.0 сПз (Кюерер et al., 2003). Такое сочетание свойств обуславливает достаточно высокую подвижность DNAPL в подземной гидросфере. Эти жидкости хорошо испаряются, что приводит к активному загрязнению зоны аэрации. Представленные вещества характеризуются относительно низкими значениями коэффициента сорбционного распределения, поэтому растворенные хлорорганические соединения легко переносятся с потоками подземных вод.

Попадая в почвенный слой и затем в подстилающие его горные породы (зона аэрации), NAPL мигрируют первоначально в субвертикальном направлении под действием гравитационной силы. Физические особенности поведения двух видов NAPL (LNAPL и DNAPL) в зоне аэрации довольно близки (Newell et al., 1995). Следует, правда, отметить, что фильтрационная и литологическая неоднородность пород заметно сильнее влияет на латеральное растекания DNAPL по сравнению с LNAPL. В массиве пород почти всегда наблюдается довольно сильное «ветвление» путей миграции DNAPL, приводящее к охвату органическим загрязнением значительных объемов вмещающих пород. В этой связи вводится понятие *относительная вмещающая емкость (retention capacity)*, которое характеризует отношение объема DNAPL (включая подвижную и неподвижную части органической жидкости) к объему породы на участке расположения источника загрязнения (Кюерер et al., 2003). По данным многочисленных исследований, этот показатель находится в диапазоне 0.5—3 %, что часто ниже значений остаточного насыщения. Это значит, что эффективность картирования такого загрязнения с помощью скважин крайне низкая: вероятность вскрытия скважинной зоны, содержащей подвижный продукт, относительно невысока.

14.1.2. Особенности поведения NAPL в подземной гидросфере

Если в породу попадает небольшой объем NAPL, его нисходящее движение в зоне аэрации может довольно быстро замедляться благодаря влиянию капиллярных сил (рис. 14.1). Эти же

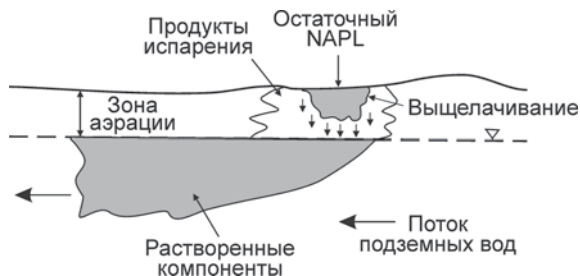


Рис. 14.1. Характерные черты загрязнения подземных вод продуктами растворения (выщелачивания) остаточных количеств NAPL, аккумулированных в зоне аэрации.

силы будут удерживать впоследствии в поровом пространстве жидкие углеводороды в виде отдельных мелких включений, образующих плохо связанные между собой агломераты, в неподвижном состоянии: распределение NAPL носит прерывистый характер, а степень его насыщения пористой среды стремится к величине остаточной насыщенности S_{nr} . В этом случае инфильтрационные воды, фильтруясь через загрязненные породы, за счет процессов растворения и выщелачивания остаточного NAPL насыщаются углеводородами. Сформировавшиеся таким образом техногенные растворы становятся источником загрязнения подземных вод.

Дополнительным фактором загрязнения инфильтрационных и подземных вод является испарение NAPL, аккумулированного в ненасыщенных породах (рис. 14.1). Благодаря испарению время существования остаточного NAPL в жидкой фазе в зоне аэрации ограничено, однако, к сожалению, полного самоочищения пород не происходит, поскольку органические вещества переходят в газовую фазу и адсорбируются породой. Особенно активно в зоне аэрации испаряются хлорорганические вещества, характеризующиеся высоким давлением насыщенного пара. В большинстве случаев период продолжительностью 5—10 лет оказывается достаточным для испарения всего количества остаточных хлорорганических соединений (Kueper et al., 2003). В полностью водонасыщенной среде (водоносный горизонт) роль данного процесса менее существенна.

Если происходит утечка с поверхности достаточно больших объемов NAPL, то жидкие углеводороды будут активно мигрировать в вертикальном направлении в виде непрерывной фазы до тех пор, пока на их пути не будет встречен какой-либо физи-

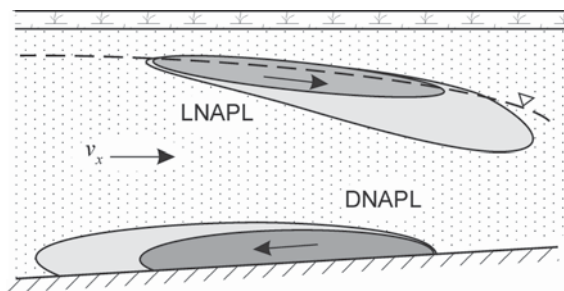


Рис. 14.2. Особенности миграции линз жидких углеводородов различной плотности (LNAPL и DNAPL) в водоносном горизонте.

Штриховая линия — депрессионная поверхность подземных вод, *штриховка* — подошва горизонта).

ческий барьер — слабопроницаемый слой, капиллярная кайма или зеркало грунтовых вод.

В водоносных горизонтах наблюдаются существенные различия в поведении двух рассматриваемых видов загрязняющих жидкостей (рис. 14.2), обусловленные отличиями их плотностей (в меньшую или большую сторону) от плотности воды как основной среды, с которой они входят в контакт, попадая в полностью водонасыщенные породы.

LNAPL, плотность которых ниже плотности воды, мигрируют вблизи депрессионной поверхности подземных вод, формируя линзообразные тела. Их движение контролируется в значительной степени гидродинамикой фильтрационного потока, так что направление движения ореола загрязнения, включающего несмешиваемое с водой жидкое ядро и окружающие его растворенные в воде компоненты, может быть определено из анализа сетки движения подземных вод.

Напротив, тяжелые жидкости (DNAPL) под действием силы тяжести опускаются вглубь горизонта, формируя линзообразные тела на контакте с водоупорными породами основания (подошвы) горизонта. Направление и интенсивность движения тяжелых жидкостей определяются морфологией (в частности, градиентом уклона моноклинально залегающих пород) подошвы горизонта. Такое движение может происходить в направлениях, ортогональных или даже противоположных направлению вектора средней скорости фильтрации. Если на пути миграции DNAPL по подошве горизонта встречаются морфологические депрессии, то тяжелая жидкость будет стремиться заполнить их. При попадании в такую «ловушку» тяжелая жидкость может

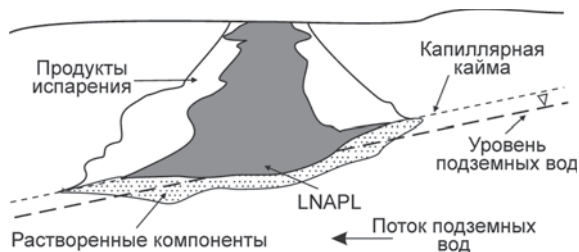


Рис. 14.3. Концептуальная схема загрязнения подземных вод LNAPL (Mercer, Cohen, 1990).

прекратить свое субгоризонтальное гравитационное движение по напластованию, и дальнейшее загрязнение подземных вод будет происходить за счет поступления в них растворенных компонентов с поверхности обособленных тел.

Движение LNAPL в подземной гидросфере контролируется несколькими процессами, проявление которых схематично проиллюстрировано на рис. 14.3. Как только LNAPL достигает капиллярной каймы, начинается его латеральное распространение в виде непрерывной фазы, с определенной насыщенностью $S_n(z)$, распределенной между зоной аэрации и полностью водонасыщенной породой. Миграция осуществляется под влиянием как гравитационной силы, так и капиллярных сил. Хотя основная миграция происходит по направлению максимального градиента потока подземных вод, определенная часть легкой жидкости может мигрировать и в ортогональных направлениях, и частично против потока. При поступлении заметных объемов легкой жидкости на поверхность водоносного горизонта, особенно при функционировании постоянно действующего источника, она может создать «гидростатическую» депрессию в пределах капиллярной каймы и в зоне распространения водонасыщенных пород. Как только источник загрязнения перестает существовать, глубина депрессионного проникновения LNAPL в водоносный горизонт сразу же уменьшается и активизируется миграция LNAPL с потоком подземных вод в горизонтальном направлении.

Основные сложности с предсказанием миграции NAPL в реальных условиях связаны с недостаточной информацией по истории загрязнения (продолжительности существования источников загрязнения и их интенсивности, поскольку утечки углеводородных жидкостей чаще всего носят скрытый характер), а также с трудностями изучения внутрипластовой гетерогенности

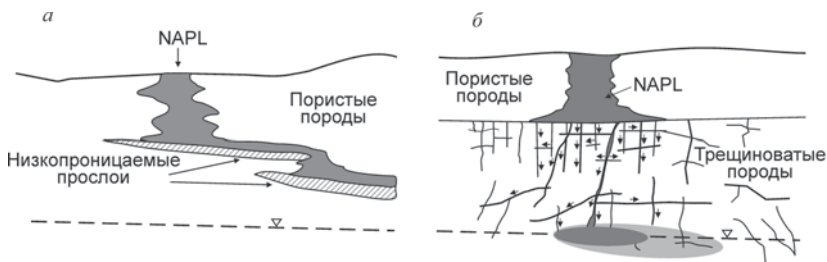


Рис. 14.4. Влияние слабопроницаемых включений (а) и неоднородной трещиноватости (б) на миграцию NAPL в зоне аэрации.

(неоднородности) геофильтрационных разрезов. Например, в пористых породах небольшой прослой слабопроницаемых пород может служить надежным барьером, защищающим водоносный горизонт от проникновения в него углеводородного загрязнения (рис. 14.4, а). Наоборот, в трещиноватых породах единичная высокопроводящая трещина (рис. 14.4, б) может послужить проводником для поступления в водоносный горизонт значительных объемов жидких углеводородов в условиях, когда трещиноватый массив в целом характеризуется относительно низкими фильтрационными свойствами.

Загрязнение подземных вод углеводородами в трещиноватых породах наиболее трудно поддается полевому изучению. Неоднократно отмечалось, что даже с помощью достаточно плотной наблюдательной сети скважин очень редко удается выделить в трещиноватом массиве единые выдержанные слои углеводородных жидкостей. Чаще всего приходится сталкиваться с ситуациями, когда большинство пробуренных наблюдательных скважин не попадает в зоны существования непрерывной фазы углеводородов и они оказываются «чистыми».

Как уже отмечалось, если в подземную гидросферу поступают достаточные объемы жидких углеводородов, то они формируют линзообразные скопления на подошве горизонта (DNALP) или в пределах капиллярной каймы и в верхней части полностью водонасыщенных пород (LNALP). Геометрическая форма линзы (например, ее толщина H_n) и внутрипластовые капиллярные силы, удерживающие такое образование в равновесии, являются важными характеристиками, определяющими возможность миграции NALP в потоке подземных вод, а также эффективность реабилитационных мероприятий. Эти характеристики определяются особенностями гистерезисных функций P^c-S

(см. разд. 13.3.2), различия в пороговых капиллярных давлениях влияют на конфигурацию границы раздела фаз в двух- ($n-w$) и трехфазных ($g-n-w$) системах.

14.1.3. Особенности скважинного контроля

При изучении загрязнения подземных вод легкими углеводородными соединениями (LNAPL) первоочередной задачей является оценка их объемов в верхней части геологического разреза, представленного как полностью (водоносный горизонт), так и частично (зона аэрации) водонасыщенными породами. По сути дела, это наиболее ответственный этап гидрогеологических исследований, от которого зависят как достоверность долгосрочных прогнозов, так и вся надежность планирования видов и объемов мероприятий по реабилитации качества подземных вод на загрязненных участках.

Линза легкой жидкости не является образованием, плавающим на поверхности подземных вод. Здесь более подходит аналогия с айсбергом: вблизи поверхности грунтовых вод сосредоточена только часть углеводородов (причем степень их насыщения породы S_n может быть относительно невелика). Над уровнем воды — в зоне аэрации и особенно ниже этого уровня — в собственно водоносном горизонте степень насыщенности пород может быть весьма высокой, а общая мощность зоны,

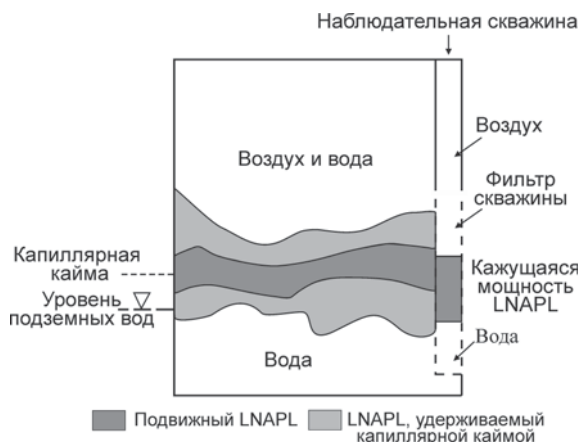


Рис. 14.5. Распределение NAPL в породе и наблюдательной скважине (Newell et al., 1995).

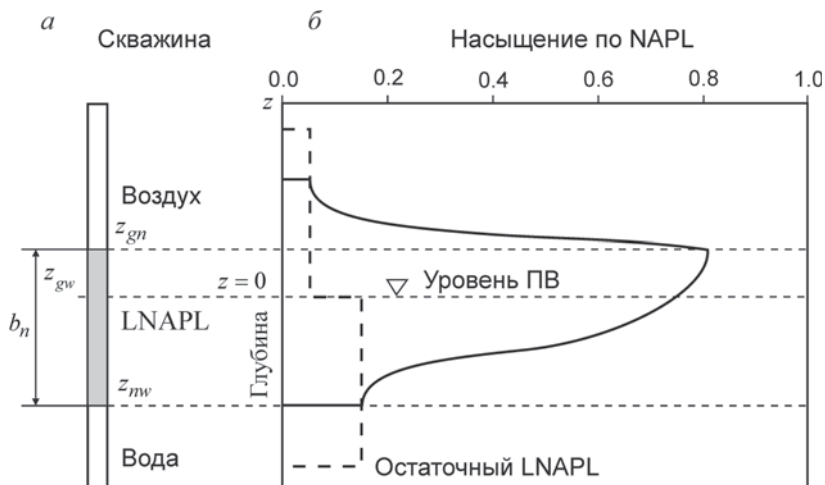


Рис. 14.6. Схема к оценке содержания LNAPL в породе.

a — гидростатическое равновесие LNAPL—вода—воздух в скважине; *б* — распределение насыщенности в породе.

занятой LNAPL-фазой, может быть соизмерима с мощностью всей водоносной толщи (рис. 14.5).

С таким характером распределения функции $S_n = S_n(z)$ связаны значительные трудности в оценке истинного количества загрязняющих веществ в пределах конкретных участков загрязнения, тем более что замеры толщины слоя углеводородов в наблюдательных скважинах (рис. 14.5) не могут напрямую быть использованы для расчета объемов NAPL. Покажем это в рамках несложных физико-математических построений.

Исходными данными для такого рода оценок служат замеры толщины (мощности) слоя LNAPL в фильтровых колоннах наблюдательных скважин (b_n), которая, как известно, не соответствует мощности подвижных углеводородов в породах. Тем не менее эти данные должны использоваться в качестве исходных для расчета профиля насыщенности порового пространства LNAPL выше и ниже уровня подземных вод (рис. 14.6).

Итак, будем считать, что данные мониторинга дают представления о вертикальных координатах гипсометрической поверхности подземных вод z_{gw} , а также об отметках верхней z_{gn} и нижней z_{nw} поверхностей слоя углеводородов в скважине (рис. 14.6). Предположим также, что существует локальное гидростатическое равновесие между флюидами в скважине и

окружающих породах, определяемое следующими соотношениями (Farr et al., 1990)

$$z_{gw} - z_{nw} = \frac{\rho_n}{\rho_w} (z_{gn} - z_{nw}) = \frac{\rho_n}{\rho_w} b_n; \quad (14.1)$$

здесь b_n — толщина слоя LNAPL в скважине, которая в данном контексте может отождествляться с понятием кажущейся мощности линзы жидких углеводородов. Как видно, ни уровень воды, ни уровень LNAPL в скважине не совпадают с уровневой поверхностью подземных вод. Важно также отметить, что LNAPL не формирует линзы, плавающей на поверхности капиллярной каймы. Такое распределение фаз нарушало бы фундаментальные уравнения, описывающие распределения давлений жидкости в пористой среде и в наблюдательной скважине в условиях равновесия (Farr et al., 1990). Поровое давление воды выше уровня подземных вод является отрицательным относительно атмосферного давления. Также LNAPL в пористой среде выше границы раздела $g-n$ в наблюдательной скважине существует при отрицательном давлении.

Наконец, решение задачи предполагает, что функция $S_w(h_{gw})$ является однозначно заданной. Ясно, что если нам удастся найти распределение капиллярных напоров $h_{ij}(z)$ по известным характерным точкам z_{ij} , то будет возможен переход к распределениям $S_\alpha(z)$. Поэтому решение задачи должно начинаться с анализа гидростатического равновесия в системе наблюдательная скважина—пласт, в котором выделяются две характерные зоны — полного и частичного водонасыщения.

Пусть в каждой фазе ($g-n-w$) распределение давления является гидростатическим (Charbeneau, 2003). Например, для пары жидкостей $n-w$ имеем

$$P_n(z) = P_n(z^*) - \rho_n g(z - z^*), \quad (14.2)$$

$$P_w(z) = P_w(z^*) - \rho_w g(z - z^*), \quad (14.3)$$

где z^* — вертикальная координата произвольной плоскости сравнения, выбираемая из условия на скважине.

Тогда профиль вертикального капиллярного давления, являющийся разностью фазовых давлений $P_{nw}(z) = P_n(z) - P_w(z)$ будет описываться распределением

$$P_{nw}(z) = P_{nw}(z^*) + (\rho_w - \rho_n)g(z - z^*). \quad (14.4)$$

Отсюда видно, что разумно выбрать плоскость сравнения $z = z^*$ таким образом, чтобы на этой плоскости капиллярное давление было нулевым. Такой является плоскость, совпадающая с положением нижней границы слоя LNAPL в скважине. Это следует из уравнения Лапласа (13.8) $P_{nw} \sim 1/r_c$, где радиус скважины r_c является достаточно большим в сравнении с радиусом пор, так что $P_{nw}(z^*) \rightarrow 0$ (Charbeneau, 2003). Очевидно, что такое допущение предполагает возможность рассмотрения контакта воды и LNAPL в скважине в качестве граничного условия для профиля давления в прилегающих породах. Это справедливо, когда распределение фаз в скважине является равновесным с распределением рассматриваемых фаз в породе.

Таким образом, капиллярное давление возрастает снизу вверх, следуя закономерности

$$P_{nw}(z) = (\rho_w - \rho_n)g(z - z_{nw}). \quad (14.5)$$

Равенство (14.5) может быть переписано для функций капиллярного напора:

$$h_{nw}(z) = (1 - \bar{\rho})(z - z_{nw}), \quad (14.6)$$

($h_{nw} = h_n - h_w$, $h_\alpha = P_\alpha / \rho_w g$ — приведенный фазовый напор, $\bar{\rho} = \rho_n / \rho_w$ — относительная плотность LNAPL).

По аналогии с (14.2) и (14.3) можно записать выражения и для другой пары ($g-n$) фазовых давлений $P_g(z)$ и $P_n(z)$:

$$P_g(z) = P_g(z^*) - \rho_g g(z - z^*), \quad (14.7)$$

$$P_n(z) = P_n(z^*) - \rho_n g(z - z^*). \quad (14.8)$$

Капиллярное давление для этой пары фаз будет

$$P_{gn}(z) = P_{gn}(z^*) + (\rho_n - \rho_g)g(z - z^*). \quad (14.9)$$

Так как капиллярное давление на контакте LNAPL и воздуха в скважине равно нулю, то в этом случае плоскость сравнения целесообразно выбрать исходя из равенства $z^* = z_{gn}$, что дает

$$P_{gn}(z) = (\rho_n - \rho_g)g(z - z_{gn}), \quad (14.10)$$

или

$$h_{gn}(z) = \bar{\rho}(z - z_{gn}). \quad (14.11)$$

Водная поверхность ($z = z_{gw}$) является поверхностью нулевого капиллярного давления $P_{gw}^c(z = z^*) = 0$, поэтому

$$h_{gw}(z) = z - z_{gw}. \quad (14.12)$$

Подставка (14.6), (14.11) и (14.12) в равенство $h_{gw} = h_{gn} - h_{nw}$ дает соотношение:

$$z_{gw} = (1 - \bar{\rho})z_{nw} - \bar{\rho}z_{gn}, \quad (14.13)$$

Формула (14.13) в точности соответствует уравнению гидростатического равновесия (14.1), что подтверждает корректность выполненных построений.

14.2. Пример исследования загрязнения подземных вод легкими углеводородными соединениями (участок Loma la Lata, Аргентина)

Данный раздел посвящен анализу условий загрязнения подземных вод легкими жидкими углеводородами (LNAPL) и модельной оценке эффективности мероприятий по реабилитации качества подземных вод в зоне влияния поверхностного накопителя газоконденсата производственного нефтегазоперерабатывающего комплекса Лома-ла-Лата (Loma la Lata), Аргентина.

14.2.1. Краткая характеристика процесса

Причиной загрязнения подземных вод углеводородами на данном участке послужили утечки (начиная с 1978 г.) техногенных растворов из поверхностного резервуара «Pileta», предназначенного для накопления газового конденсата. Жидкая углеводородная фракция газового конденсата представлена смесью углеводородов, по составу близкой к газолину. Водоносный горизонт, в котором происходит миграция углеводородов, представлен гравийно-галечными отложениями с песчаным заполнителем. Средний диапазон изменения коэффициента фильтрации (k) 10—15 м/сут.

К 1996 г. в водоносном горизонте сформировался обширный ореол загрязнения подземных вод легкими углеводородами (LNAPL) (рис. 14.7, а). Максимальные значения мощности линзы газа по отдельным скважинам достигали 1 м. Загрязняющие растворы распространялись преимущественно в юго-восточном направлении от источника загрязнения под влиянием гидравлического градиента (средние значения 0.005—0.006 м/м) естественного фильтрационного потока. Площадь, охваченная загрязнением, составляла около 70 га.

Мероприятия по реабилитации водоносного горизонта, начавшиеся в 1996 г., заключались в откачке водно-газолиновой смеси эксплуатационными (дренажными) скважинами с последующей очисткой воды на поверхности. Эксплуатация скважин дала заметный результат: замеры по скважинам показали, что

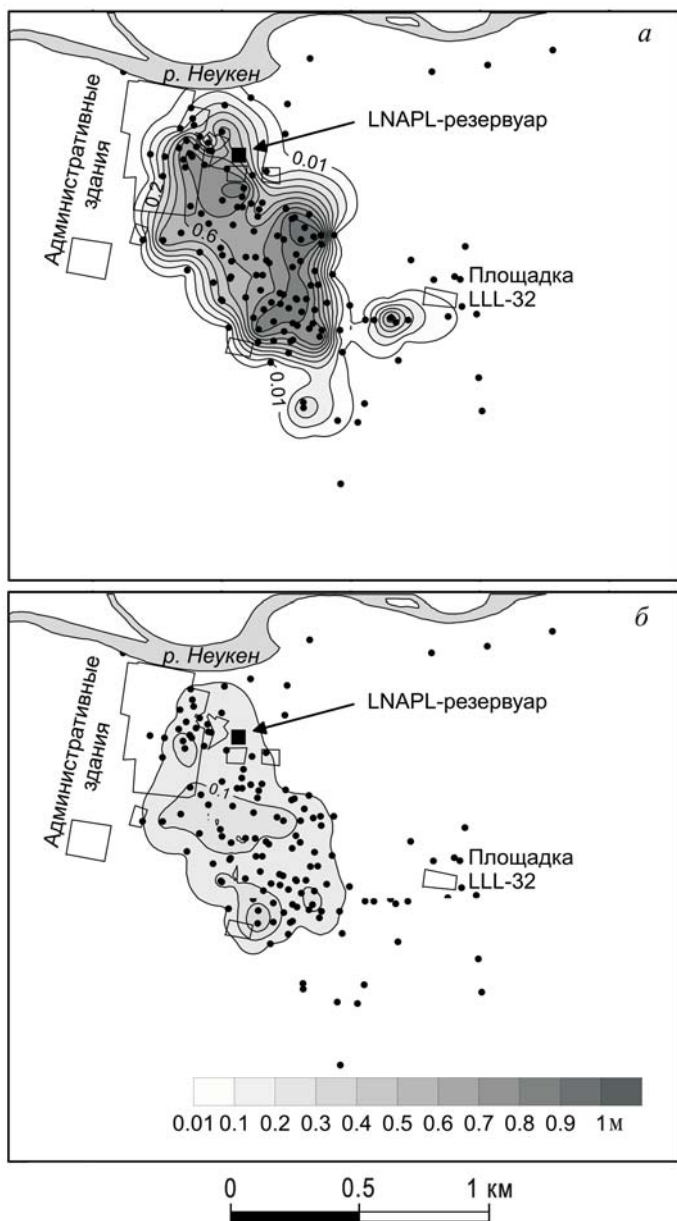


Рис. 14.7. Линза газаolina в изолиниях мощности (b_n , м) углеводородов в наблюдательных скважинах по состоянию на 1996 (а) и 2000 (б) гг.

Оттенки серого на масштабной шкале — мощность газаolina.

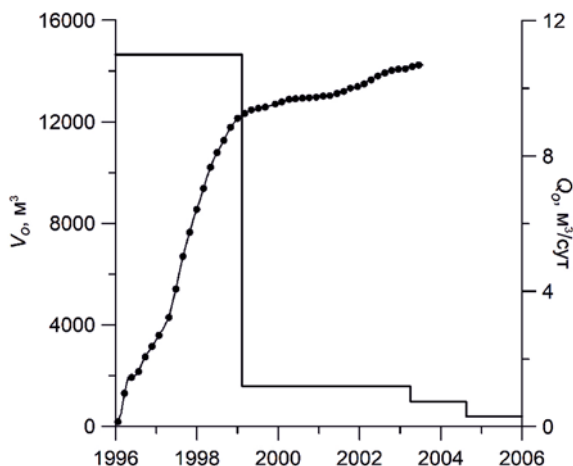


Рис. 14.8. Графики роста объемов отбираемого продукта во времени $V_o(t)$ (линия с точками, отвечающими выполненным замерам) и падения дебита отбора газаolina скважинами $Q_o(t)$ (ступенчатая линия).

толщина слоя газаolina начала уменьшаться (рис. 14.7, б): b_n меняется во времени от 0.55 м (1996 г.) до 0.04 м (2003—2005 гг.). Произошло сокращение и площади самой линзы углеводородов в водоносном горизонте.

Как видно из представленных данных (рис. 14.8), начальный, примерно двухлетний этап характеризовался достаточно высокой производительностью (до 10—12 м³/сут) забора углеводородной жидкости скважинами. Затем производительность системы начала резко падать, и уже начиная с 2002 г. отбор углеводородов не превышал десятых долей кубических метров в сутки. В отборе газаolina и воды принимали участие в среднем около 20 скважин, более-менее равномерно распределенных в пределах области, занятой загрязненными водами. Средний дебит каждой скважины составлял 20.4 м³/сут (данные на 2005 г.). Таким образом, в сутки отбиралось около 420 м³ эмульгированного раствора (смесь воды и углеводородной жидкости), причем на долю газаolina в начальный период приходилось не более 1.5—2 %. Затем эта доля в смеси упала до десятых долей процента. Грубо говоря, в 2003 г. для отбора 1 м³ газаolina требовалось отобрать около 1000 м³ подземной воды.

В принципе такое поведение системы, выражающееся в существенном затухании дебитов отбора углеводородов $Q_o(t)$ с течением времени, отвечает известным теоретическим представлениям (Charbeneau, 2003). Главной причиной падения дебита

$Q_o(t)$ при примерно постоянном водоотборе $Q_w(t)$ является уменьшение относительной фазовой проницаемости $k_{rn}(S_n)$ (или $k_{rn}(b_n)$), что обуславливает и резко нелинейный характер графиков $Q_o(t)$.

14.2.2. Моделирование трехфазной фильтрации

Общепризнано, что программный комплекс TOUGH2 (Pruess et al., 1999; Falta et al., 1995) является одним из наиболее приспособленных численных инструментов, предназначенных для решения задач многофазовой фильтрации. Он позволяет одновременно решить нестационарную задачу фильтрации, массопереноса и теплопереноса в насыщенной и ненасыщенной пористой среде для смешивающихся и несмешивающихся жидкостей с учетом плотностной конвекции. Поэтому данный программный комплекс, включающий модуль T2VOC, был выбран для дальнейшего модельного анализа изучаемого процесса.

Экспериментальные исследования, направленные на изучение физических свойств пород рассматриваемого участка, выполнены в весьма ограниченном объеме. Поэтому основные представления о диапазонах изменения численных значений емкостных и капиллярных параметров были получены из доступных баз данных, включающих результаты исследования пород различной структуры и состава, а также из анализа дополнительных литературных источников: *UNSODA Data Base* (Leij et al., 1996) и *API (American Petroleum Institute) Data Base* (Beckett, 2003).

Модельная область (рис. 14.9) в плане разбита на 616 блоков (по оси X — 28 блоков, по оси Y — 22 блока) размером 100×100 м. В разрезе модель была разбита на 23 расчетных слоя с мощностями от 25 см в насыщенно-ненасыщенной зоне распространения ореола газа до 3 м в нижней части водоносного горизонта. Столь мелкая профильная фрагментация модели в зоне развития ореола позволила достаточно корректно описать влияние плотностной дифференциации вещества, а также учесть растворение исходного продукта.

Для определения относительной проницаемости по каждому из флюидов (вода, газ и органическое вещество) $k_{r\alpha} - S_{\alpha}$ использовалась модифицированная функция Стоуна (Falta et al., 1995):

$$\begin{aligned}
 k_{rg} &= \left[\frac{S_g - S_{gr}}{1 - S_{wr}} \right]^{N_s}, \quad k_{rw} = \left[\frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right]^{N_s}, \\
 k_{rn} &= \left[\frac{1 - S_g - S_w - S_{nr}}{1 - S_g - S_{wr} - S_{nr}} \right] \left[\frac{1 - S_{wr} - S_{nr}}{1 - S_w - S_{nr}} \right] \times \\
 &\times \left[\frac{(1 - S_g - S_{wr} - S_{nr})(1 - S_w)}{(1 - S_{wr})} \right]^{N_s}, \quad (14.14)
 \end{aligned}$$

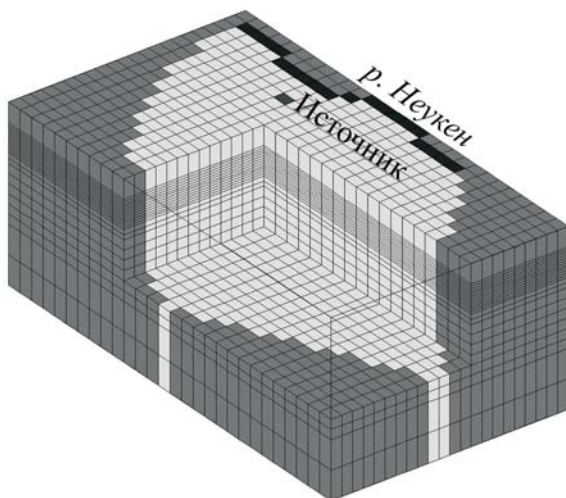


Рис. 14.9. Трехмерное представление модельной области.

Блоки: *светлые* — активные, *темные* — неактивные.

где N_s — показатель степени, т. е. данная функция предполагает степенное увеличение относительной фазовой проницаемости при увеличении насыщенности пород флюидом.

В программе TOUGH2/T2VOC возможно задание различных типов зависимостей, связывающих капиллярное давление в пористой среде, заполненной водой и жидкой органической фазой, и насыщенность. В базовом модельном варианте для данного участка использовалась линейная зависимость, но с ограничением по максимальному всасывающему давлению (соответствует минимальному насыщению по одной из фаз). Моделирование процесса предполагало задание остаточного водонасыщения пород, а также остаточной насыщенности по органической жидкости. Эти значения использовались при расчете функций относительной проницаемости и капиллярного давления. Остаточное насыщение по газовой фазе принималось равным нулю.

Анализ базы данных, заложенной в программу TOUGH2/T2VOC, а также литературных источников позволил выбрать значения параметров, характеризующих свойства газа, а также способность его к растворению и адсорбции. Плотность и вязкость газа, принятые при моделировании, составляют соответственно 730 кг/м^3 и $6 \cdot 10^{-4} \text{ Па} \cdot \text{с}$. Растворимость в мольных долях:

$$\chi \approx \frac{sat C_n^w}{M_o \rho_w / M_w}, \quad (14.15)$$

где M_n — молекулярный вес вещества (в г/моль); M_w — молекулярный вес воды (18 г/моль); ρ_w — плотность воды (998.232 г/л). Раствори-

мость $^{sat}C_n^w$ соответствует 0.164 г/л. При молекулярном весе газаolina 99 г/моль получаем коэффициент $\chi = 2.987 \cdot 10^{-5}$. Влияние равновесной адсорбции органического вещества учтено в эффективной пористости $n_e = n + f_{OC}K_{OC} \rho_b$ (см. разд. 13.5.2).

Расчетные варианты и калибрация модели. Целевыми функциями при сопоставлении данных моделирования и натуральных наблюдений являлись:

- распределение поля напоров (давления);
- форма ореола загрязнения в плане и разрезе (толщина линзы газаolina);

- накопленные (кумулятивные) объемы извлекаемого газаolina во времени, а также соотношение извлекаемых фаз ($n-w$).

Сложность решения поставленной задачи заключается, помимо неопределенности параметров, в отсутствии точных данных по объемам утечек из бассейна, а также по истории отбора газаolina скважинными системами. Все это делало необходимым выполнение многовариантных расчетов с большим диапазоном изменения многих параметров.

В ряде случаев удавалось добиться хорошего совпадения распределений насыщенности, характеризующих исходную форму ореола (до мероприятий по реабилитации) загрязнения на 1996 г. При этом, однако, не удавалось добиться сколько-нибудь удовлетворительного согласования этих результатов с данными отбора газаolina $V_o(t)$ и воды на этапе реабилитации участка. Очевидно, это связано с сильной нелинейностью процесса в целом.

Форма ореола в плане и особенно в разрезе во многом зависит от величины капиллярных сил на границе двух фаз (вода—газолин, газолин—газ). Были просчитаны варианты с вариациями максимального капиллярного давления от нуля (нулевое капиллярное давление) до 15 000 Па. Оптимальным оказалось значение 5000 Па (около 50 см водяного столба). Главное, эти капиллярные силы контролируют перераспределение жидкостей между водоносным горизонтом и зоной аэрации, тем самым определяя толщину слоя газаolina в наблюдательных скважинах.

Описание базового расчетного варианта. В задачу соответствующих модельных расчетов входило исследование поведения ореола загрязнения подземных вод на всех этапах развития миграционного процесса — 1978—2005 гг. (1978 г. — начало накопления газаolina в поверхностном резервуаре «Pileta»). При этом считалось, что источник загрязнения прекратил свое существование в 1996 г. Дренажные скважины в период с 1996 по 2005 г. работали с постоянной средней производительностью. Полученные данные о пространственном распределении органических соединений (рис. 14.10) на 1996 г. свидетельствуют о том, что численная модель достаточно адекватно описывает общие тенденции развития миграционного процесса.

1. Ореол, представленный нерастворенной фазой, движется в южном направлении в противоположную сторону от р. Неукен (Neuquén). Основная масса загрязнителя растекается по верхней части водоносного горизонта. Поэтому направление движения данной фазы хорошо контролируется гидродинамикой регионального фильтрационного потока; скорость смещения отходов составляет 70—80 м/год;

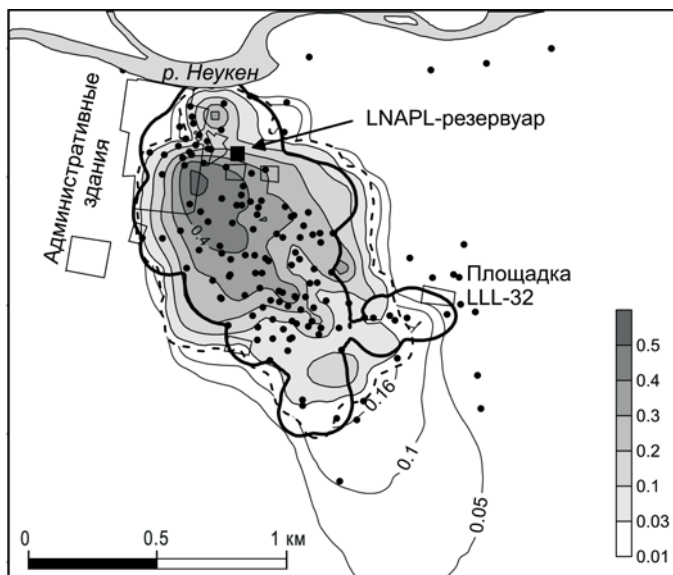


Рис. 14.10. Распределение газаolina и его растворенной части, 1996 г. (базовый вариант).

Жирная линия — фактическое распределение газаolina, отвечающее изолинии его мощности в скважинах ($b_n = 1$ см); *тональный серый цвет* — распределение насыщенности газаolina S_n (цифры на масштабной шкале); *штриховые линии* — насыщенность газаolina $S_n = 0.01$; *сплошные* — растворенная часть, г/л.

2. Ореол загрязнения по растворенной части органических соединений в целом наследует форму интрузии исходного продукта (рис. 14.11), однако масштабы загрязнения подземных вод данными соединениями заметно больше. В частности, видно, что скорость миграции растворенной органики превышает скорость движения исходного продукта. В центральной части ореола концентрации достигают концентраций насыщения — около 0.16 г/л, на периферии ореола они падают до первых десятков единиц миллиграмм на литр.

Модельные расчеты показали (рис. 14.11), что включение эксплуатационных скважин в 1996 г. ведет к заметному падению насыщенности породы газаoliном и сокращению площади линзы загрязнения.

Сравнение модельных и фактических данных (рис. 14.12) по отбору газаolina во времени $V_o(t)$ показывает, что модель достаточно правильно отражает и временные тенденции развития процесса, причем наблюдается хорошее согласование модельных результатов и с аналитическими расчетами на всем изучаемом временном интервале.

График на рис. 14.12 отражает основные тенденции реабилитационного процесса: интенсивный приток газаolina к откачивающим скважинам на первом этапе их эксплуатации (1996—1998 гг.) и существенное за-

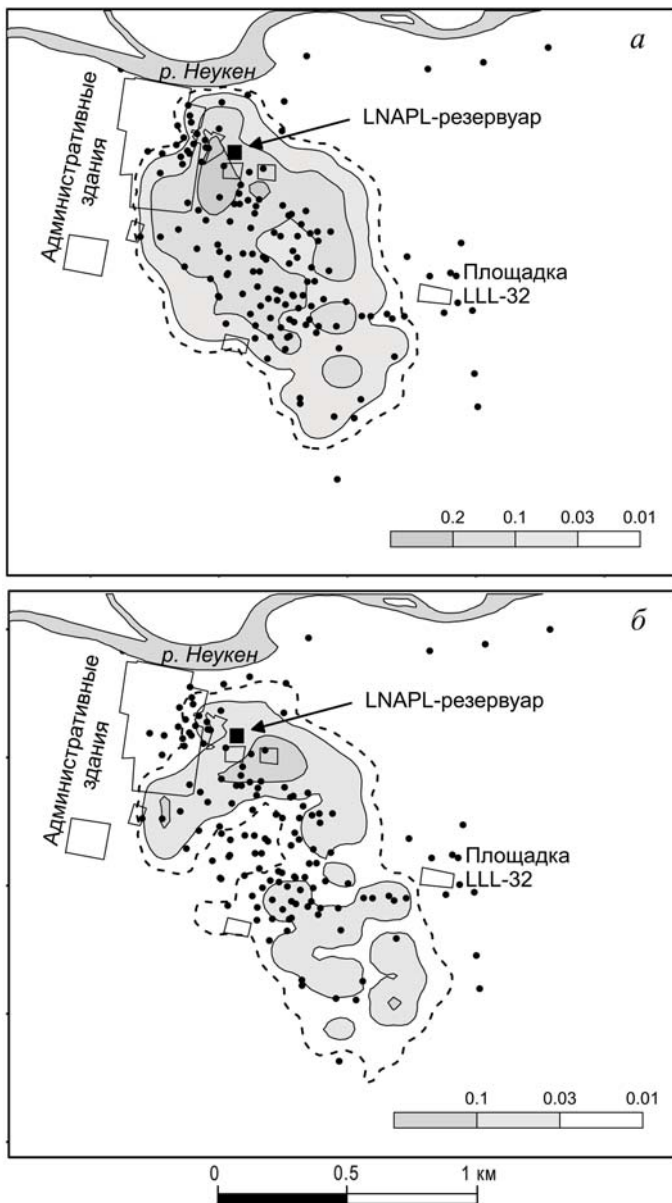


Рис. 14.11. Распределение насыщенности газаolina, 1998 (а) и 2004 (б) гг.

Цветом показано распределение насыщенности газаolina; штриховая линия — $S_n = S_{nr} = 0.01$.

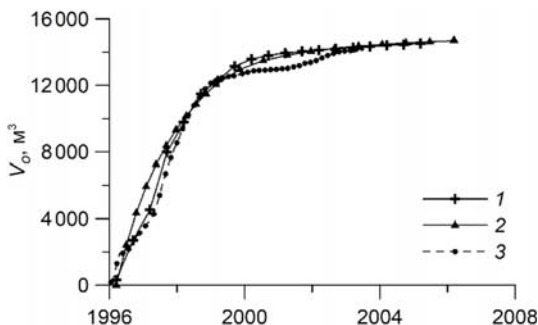


Рис. 14.12. Сопоставление расчетных и фактических данных, иллюстрирующих накопление газа в породах.

1 — TOUGH2/T2VOC, 2 — аналитическое решение, 3 — данные мониторинга.

тухание дебитов отбора углеводородов на заключительной стадии (2003—2005 гг.). Как уже отмечалось, такое поведение функции $Q_o(t)$ отвечает известным теоретическим представлениям.

Прогноз. Прогнозный период связывался с оценками распространения остаточных количеств газа в пласте на 2015—2020 гг. В этой связи параллельно просчитаны два варианта (сценария): 1) прогноз, предполагающий прекращение эксплуатации существующих скважин; 2) прогноз, предполагающий, что откачивающие скважины продолжают свое функционирование в прежнем режиме.

Сравнение прогнозных вариантов с ранее выполненными расчетами показывает, что контур предельного загрязнения по насыщенности 0.01, отвечающий величине остаточной насыщенности, слабо меняется во времени. В пределах ореола загрязнения наблюдается незначительное падение насыщенности пород газом. Это подтверждает весьма низкую эффективность существующей системы скважин, которая отмечается в настоящее время.

Главный результат выполненных расчетов заключается в том, что моделирование позволило доказать, что дальнейшее поддержание существующей системы скважин в эксплуатационном режиме весьма слабо влияет на развитие миграционного процесса в целом. Расчеты показали, что ореол загрязнения по исходному продукту (газолину), сформировавшийся к 2005—2006 гг., будет далее находиться в положении, близком к стационарному, — даже в случае отключения существующей системы дренажных скважин. Такой эффект объясняется низкой фазовой проницаемостью при степени насыщения породы газом, близкой к остаточной (S_{nr}).

Начиная с этого периода (2005—2006 гг.) основное загрязнение водоносного горизонта происходит за счет растворенной фазы. Судя по всему, сформировавшаяся линза газа с насыщенностью, близкой к остаточной насыщенности (S_{nr}), будет служить долговременным источником загрязнения подземных вод растворенными углеводородными веществами.

Таким образом, представленные результаты исследований позволили оценить существующие масштабы загрязнения подземных вод жидкими углеводородными соединениями, а также дать прогноз развития данного процесса на ближайшую перспективу.

14.3. Пример исследования загрязнения подземных вод тяжелыми хлорорганическими соединениями (участок расположения предприятия Саянхимпром, Иркутская область)

Галогенорганические соединения, поступающие в подземную гидросферу, относятся к наиболее опасным для качества подземных вод загрязнителям. По опасности воздействия на здоровье человека они находятся в одном ряду с радиоактивными веществами. В последние десятилетия загрязнение подземных вод различными галогенорганическими соединениями достигло угрожающих масштабов. Это стимулировало стремительный рост количества исследований в данной области, причем особое внимание уделяется изучению поведения в подземной гидросфере (зона аэрации и водоносные горизонты) тяжелых хлорорганических жидкостей, миграция которых формирует многофазные потоки. Главные и наиболее опасные источники такого рода загрязнения — предприятия химической промышленности, о чем свидетельствует рассматриваемый в этом разделе пример.

С 1986 г. в течение нескольких лет происходило накопление в поверхностном бассейне (так называемая Карта № 2) значительных объемов отходов производства винилхлорида (предприятие Саянхимпром, расположенное в Иркутской обл.). В середине 1990-х гг. были выявлены хлорорганические соединения в подземных водах в зоне их частичной разгрузки, приуроченной к тыловой части поймы р. Оки и ее притока р. Змеевки (рис. 14.13). Расстояние от источника загрязнения до реки составляет несколько километров. В конце 1990-х гг. процесс загрязнения подземных вод принял угрожающий характер, так как концентрации хлорорганических соединений многократно превысили предельно допустимые.

14.3.1. Гидрогеологические условия

В гидрогеологическом отношении участок (рис. 14.13) находится в пределах Иркутского артезианского бассейна второго порядка, который занимает южную часть крупного Анга-

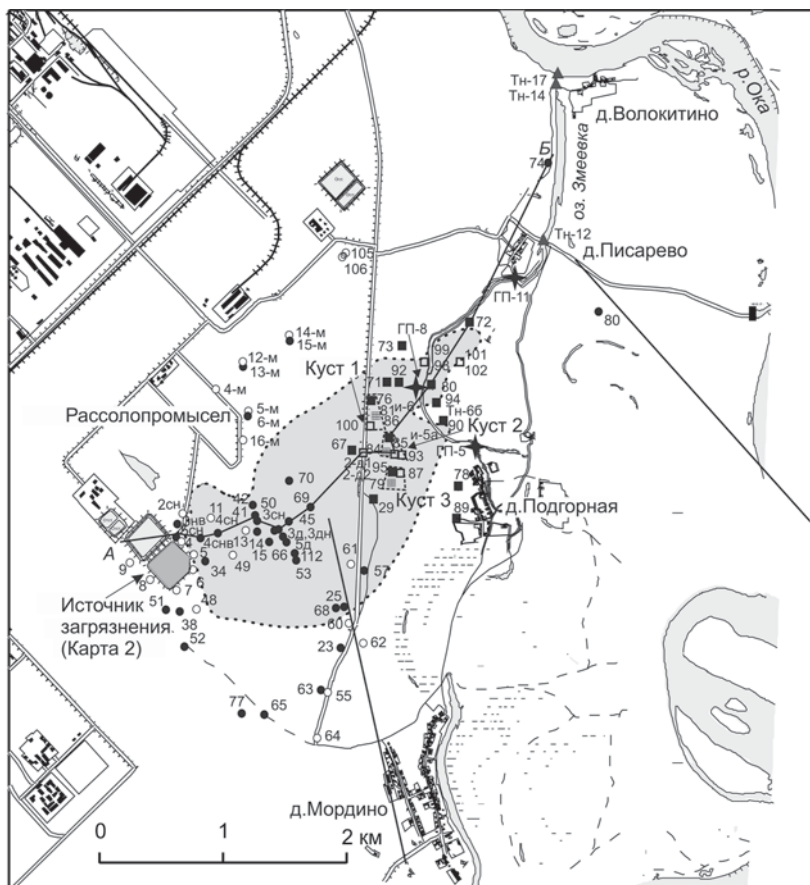


Рис. 14.13. Карта фактического материала.

1—7 — скважины: наблюдательные на четвертичный (1), верхоленский (2), ангарский (3) горизонты; откачивающие (4), нагнетательные (5), пробуренные на верхоленский (6), четвертичный (7) горизонты; 8 — источники; 9 — гидропосты; 10 — точки наблюдений; 11 — линия разреза; 12 — контур загрязнения (растворенные хлорорганические соединения).

ро-Ленского артезианского бассейна. Наибольший интерес с позиций изучения рассматриваемой проблемы представляют водоносные комплексы мезозой-кайнозойских отложений и отложений верхоленской свиты среднего и верхнего кембрия (рис. 14.14).

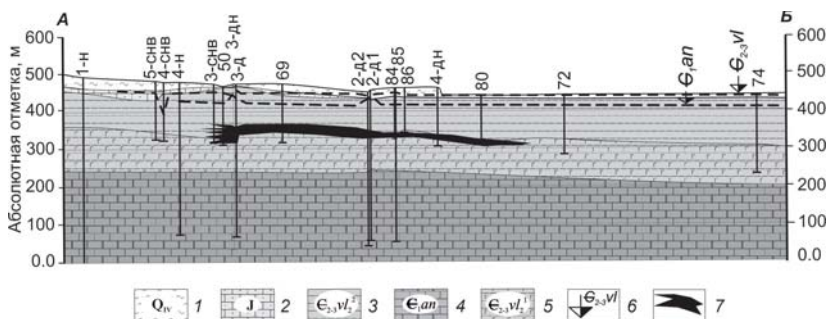


Рис. 14.14. Схематический геолого-гидрогеологический разрез.

Водоносные горизонты: 1 — четвертичный, 2 — юрский, 3 — верхненский, 4 — ангарский; 5 — водоупор (прогипсованные верхненские породы); 6 — напорная поверхность подземных вод (индексы отвечают горизонтам); 7 — зоны распространения ВХ-продукта.

Среди мезозой-кайнозойских отложений преобладают четвертичные отложения высоких надпойменных террас (песчаные, супесчаные и гравийно-галечные с невыдержанными по мощности прослоями глин, суглинков), с которыми связаны порово-пластовые безнапорные подземные воды. Нижерасположенные породы юрского возраста, имеющие спорадическое распространение, представлены трещиноватыми песчаниками и алевролитами.

Основной водоносный горизонт в отложениях верхненской свиты (E_{2-3V}) связан с верхней зоной экзогенной трещиноватости. Водовмещающими породами являются песчаники, в которых встречаются прослой аргиллита и гипса. Средняя мощность горизонта составляет около 100 м. На различных участках интенсивность затухания трещиноватости с глубиной различная, что определяет сложную гипсометрию рельефа поверхности водоупорного основания горизонта. Верхненский водоносный горизонт на большей части рассматриваемого участка напорный. С ним связаны многочисленные родники, выходящие на абсолютных отметках 435—450 м р. Оки и 470—520 м — в долинах ее притоков. Питание водоносного горизонта осуществляется в основном перетеканием из вышележащих горизонтов и за счет атмосферных осадков на площадях выхода водовмещающих пород на поверхность.

Отмечается существенная изменчивость фильтрационных свойств верхненских пород, оцененная по результатам одиночных (20) и продолжительных (до 6 месяцев) кустовых (4) откачек. Проводимость верхненских отложений варьирует в диапа-

зоне 1—40 м²/сут (среднее 26 м²/сут). Проводимость четвертичных отложений заметно выше и составляет 140—200 м²/сут. Отмечается относительная изолированность четвертичного горизонта от верхоленских пород.

14.3.2. Характер и масштаб загрязнения подземных вод

Источник загрязнения. Карта № 2 построена и сдана в эксплуатацию в 1976 г. и вначале предназначалась для хранения некондиционных хлоридно-натриевых рассолов (концентрация до 130 г/дм³). С января 1986 г. вместе с рассолами начали складировать винилхлоридные отходы (ВХ-отходы). К концу 1993 г. всего в Карту № 2 было слито по разным оценкам от 21 до 35 тыс. т ВХ-отходов в чистом виде, или около 16—27 тыс. м³. Фильтрация продолжалась 8 лет (1986—1993 гг.), т. е. средне-суточные потери ВХ-отходов составили около 9 м³/сут.

Отходы ВХ в чистом виде и продукты растворения. В исходном состоянии отходы обладают следующими свойствами: повышенная в сравнении с водой плотность, равная 1.33—1.35 г/см³; повышенная в сравнении с водой динамическая вязкость (более чем в 3 раза); в силу плохой смешиваемости с водой формируется четкая граница раздела двух фаз — хлорорганической и водной; способность к частичному растворению в водной среде, при этом в водном растворе обнаруживается более 60 хлорорганических соединений.

В ВХ-отходах содержание отдельных компонентов неравноценно, одни составляют десятки процентов, другие — лишь сотые доли процента. По данным различных вариантов газожидкостной хроматографии, типичный состав ВХ-отходов таков (в мас. %): 1,2-дихлорэтан (1,2-ДХЭ) — 10—70, 1,1,2-трихлорэтан (1,1,2-ТХЭ) — 40—70, 1,1,2,2-тетрахлорэтан — 2—5, содержание перхлорэтилена (ПХЭ) приближается к десяткам процента, остальные компоненты (примерно 40 соединений) входят в состав ВХ-отходов в количествах единиц и десятых долей процента. При миграционных построениях следует ориентироваться на 1,2-ДХЭ как на наиболее представительное (по относительному содержанию) и опасное в токсикологическом отношении соединение.

Хлорорганические соединения характеризуются относительно высокой растворимостью (1,2-ДХЭ — до 10 г/дм³), летучестью, слабой подверженностью к гидролизу, низкой окисляе-

мостью и слабой химической активностью в целом. Хлорорганические соединения в пористой матрице керна пород из ореолов загрязнения не обнаружены. Перечисленные свойства свидетельствуют об очень низкой физико-химической активности хлорорганических соединений, что позволяет классифицировать их как относительно инертную в физико-химическом отношении субстанцию.

Общие тенденции. Схематично процесс загрязнения подземных вод можно представить следующим образом. Нисходящая фильтрация тяжелых ВХ-отходов через донные отложения их накопителя привела к попаданию загрязнителя в четвертичный водоносный горизонт, подстилаемый юрскими глинистыми породами. Поэтому на начальном этапе вблизи Карты № 2 наиболее интенсивному загрязнению подвергалась именно верхняя зона водоносной системы. Субгоризонтальное перемещение отходов в четвертичных отложениях по кровле юрского водоупора в восточном направлении происходило не более чем на 300—400 м от накопителя, вероятно, до первого литологического «окна». Через это литологическое окно практически вся масса тяжелого загрязнителя перетекла в трещиноватые верхоленские породы и локализовалась на их подошве. Дальнейшая миграция отходов происходила в восточном направлении и контролировалась гидродинамикой фильтрационного потока и рельефом водоупорного основания верхоленских проницаемых пород.

Одновременно формировался ореол рассеяния растворенной части хлорорганических соединений, который унаследовал общую структуру ядра чистых ВХ-отходов, однако масштабы (размеры) «вторичного» ореола заметно превышают размеры области, занятой отходами. Дадим более детальную характеристику наблюдаемым полям загрязнения подземных вод.

Ореол «чистых» ВХ-отходов в верхоленском водоносном горизонте (рис. 14.15, а) оконтурен по данным ВЭЗ и результатам режимных наблюдений по 72 скважинам (2000 г.). Ореол приурочен к понижениям рельефа в водоупорном ложе верхоленского водоносного горизонта. Его длина составляет около 2 км. Сопоставление ориентировки продольной оси ореола тяжелых ВХ-отходов с гидроизогипсами подземного потока показывает, что эта ось практически нормальна направлению движения подземных вод. Это означает, что формирование ореола практически полностью определялось уклоном водоупора и плотностной составляющей градиента фильтрации.

Ореол растворенной хлорорганики (рис. 14.15, б) представлен такими соединениями как 1,2-дихлорэтан, 1,1-трихлорэтан,

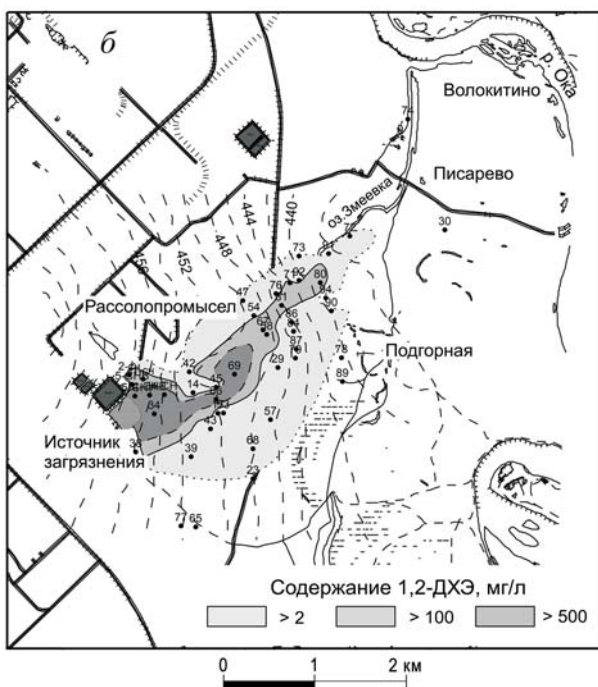
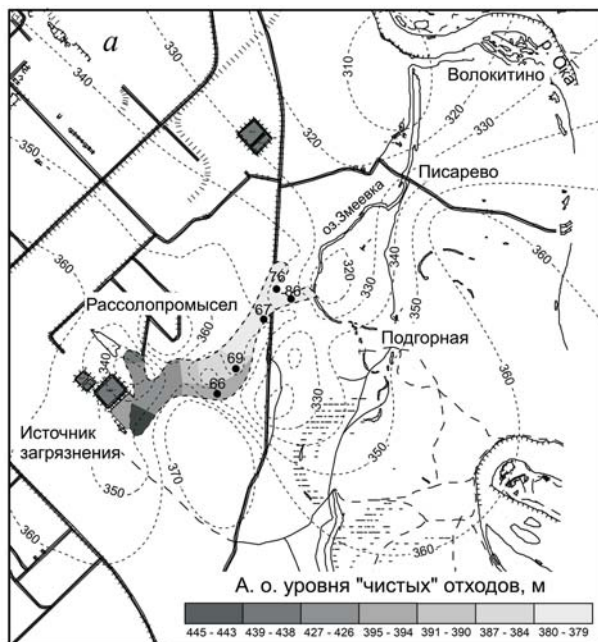


Таблица 14.1

**Среднегодовые концентрации 1,2-ДХЭ в точках наблюдения
и на гидропостах, мг/л**

Год	Номер точки наблюдения						
	5а	6	6б	7	8	11	12
1998		66.1			22.1		
1999	169.3	122.5	100.4	175.5	33.3	12.3	2.2
2000	153.4	79.3	71.1	26.7	30.4	1.9	0.3
2002	131.2	93.8	111.2	39.2	34.5	3.5	1.8

1,1- и 2,2-тетрахлорэтан. Для контроля за уровнем загрязнения используются данные о распределении в подземных водах 1,2-дихлорэтана (1,2-ДХЭ), так как его содержание в смеси обычно превышает 50 %. Ореол приурочен к зоне экзогенной трещиноватости пород верхоленской свиты. Он полностью перекрывает ореол «чистых» отходов. В северо-восточной части ореол выходит в пойму р. Оки в районе скв. 72, 80, 90 и 91 (рис. 14.15, б). Ширина ореола в его средней части равна примерно 1 км.

Растворенная хлорорганика зафиксирована в пробах воды, отобранных из родников и мочежин (табл. 14.1), разгрузка загрязненных вод зафиксирована также (в форме придонных восходящих источников) в русле оз. Змеевка. Это — область частичной разгрузки подземных вод, приуроченная к участку между д. Подгорная и Писарево (рис. 14.13). Зафиксированные здесь концентрации 1,2-ДХЭ чрезвычайно велики: при ПДК по 1,2-ДХЭ, равной 0.02 мг/дм³, в источнике 5а и 6 они составляют более 100 мг/л (максимальные концентрации 226.7 и 220.8 мг/л соответственно отмечены в январе—феврале 2002 г.). В источнике 7 среднегодовые концентрации составляют 26.7—175.5, в оз. Змеевка (точки наблюдения 6б и 8) — до 111 мг/л. Даже около д. Писарево (точки наблюдения 11, 12) были отмечены значения 3.48 мг/л, что значительно выше ПДК.

Рис. 14.15. Ореол загрязнения подземных вод водоносного комплекса верхоленских отложений (результаты опробования в марте 2000 г.).

а — распределение «чистых» ВХ-отходов (*пунктир* — изолинии подошвы верхоленской толщи); *б* — распределение продуктов растворения (1,2-ДХЭ) (*штриховые линии* — напор подземных вод).

14.3.3. Математическая модель и результаты моделирования

Модельные исследования по изучению условий загрязнения подземных вод в области влияния бассейна-накопителя хлорорганических соединений проводили в два этапа. На первом этапе разрабатывалась и калибровалась геофильтрационная модель, описывающая распределение напоров подземных вод в основных водоносных горизонтах. Второй этап — создание миграционной модели для описания собственно процесса распространения в подземных водах хлорорганических соединений.

Геофильтрационная задача решалась в трехмерной напорно-безнапорной постановке в рамках «стандартных процедур» — компьютерная программа MODFLOW (McDonald, Hurbough, 1988). Фильтрационные параметры, характеризующие фильтрацию подземных вод по напластованию пород, принимались исходя из имеющейся гидрогеологической информации (одиночные и кустовые откачки, данные опытно-эксплуатационного водоотбора из дренажных скважин) с учетом изменений и дополнений, которые были внесены в модель на этапе ее калибрования.

В качестве модельного комплекса для расчета переноса хлорорганических соединений использовался пакет прикладных программ TOUGH2/T2VOC (Pruess et al., 1999; Falta et al., 1995), позволяющий моделировать двухфазную трехмерную фильтрацию, осложненную плотностной конвекцией, с учетом процессов растворения исходного продукта и последующего преобразования растворенной фазы. Геометрия модельной области, поле распределения параметров, в частности проницаемости, и граничные условия транслировались из геофильтрационной модели, калибровка которой проводилась на первом этапе моделирования, описанном выше. На рис. 14.16 дан усредненный график утечки исходного продукта из Карты № 2, совмещенный с диаграммой водоотбора из скважин опытно-эксплуатационных кустов по годам. Этот график положен в осно-

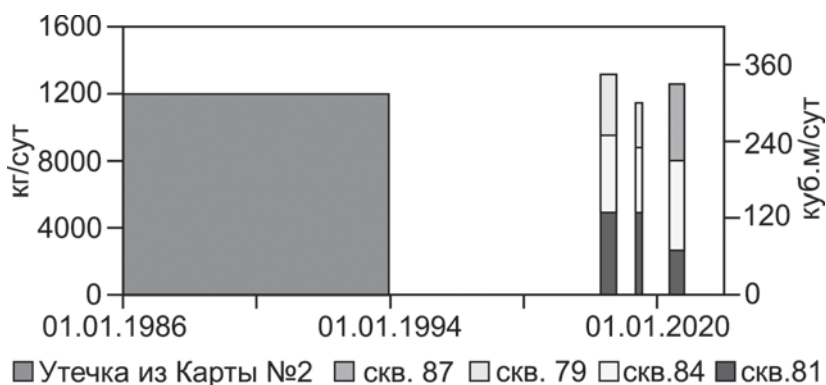


Рис. 14.16. График утечек из Карты № 2 (левая ось) и расходы кустовых откачек 2000—2002 гг. (правая ось).

ву задания на моделях интенсивности поступления вещества в водоносную толщу и отбора воды скважинами.

Плотность ВХ-отходов, принятая при моделировании, составляет 1.34 г/см^3 . Как уже отмечалось, исходный продукт (ВХ-отходы) представлен смесью целого ряда галогенизированных углеводородов, среди которых преобладают дихлорэтан (1,2-ДХЭ) и трихлорэтан (1,1-ТХЭ). Анализ базы данных, заложенных в программу TOUGH2/T2VOC (Falta et al., 1995), позволил выбрать растворимость продукта в мольных долях, $\chi = 0.000974$ при молекулярном весе изучаемого вещества 133.4 г/моль .

Коэффициент межфазового сорбционного распределения K_d , характеризующий главным образом адсорбцию—десорбцию растворенных хлороорганических соединений, рассчитывался по формуле (13.22): $K_d = 0.0152 \text{ см}^3/\text{г}$ ($K_{OC} = 1520 \text{ см}^3/\text{г}$, $f_{OC} = 0.00001$).

Остаточное водонасыщение пород в пределах зон пласта, занятых исходным продуктом, было принято равным 0.5, т. е. предполагалось, что в этих зонах остается до 50 % пластовой воды, «зашемленной» в непроточных трещинах. Остаточное насыщение по исходному продукту приравнивалось 0.01 (1 % органического вещества остается в породе при замещении его водой). Эти количества использовались при расчете функции относительной проницаемости.

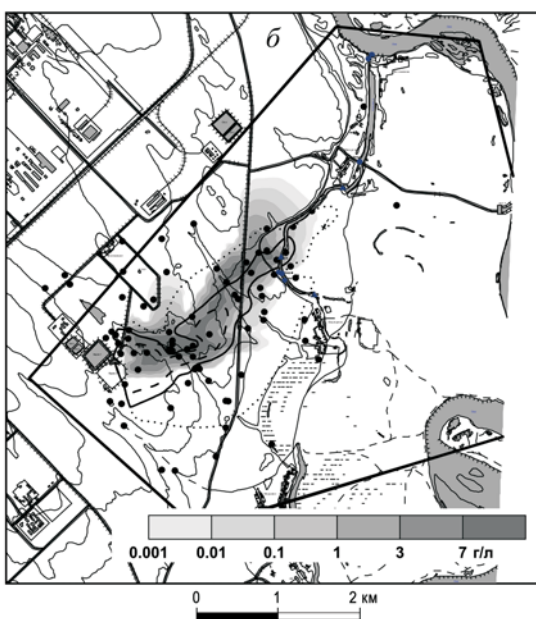
Для определения относительной проницаемости по каждому из флюидов (вода и органическое вещество) использовалась линейная зависимость между проницаемостью и насыщенностью в диапазоне от остаточного до полного насыщения (показатель степени равен единице). Капиллярные эффекты в воде и органическом веществе не учитывались, и соответственно всасывающее давление в этих фазах приравнивалось нулю. Влиянием газовой составляющей в данных расчетах пренебрегалось. Биодegradация вещества также не учитывалась.

Модельная область в плане была разбита на 3068 блоков (по оси x — 59 блоков и по оси y — 52 блока) размером $100 \times 100 \text{ м}$. Для имитации ундуляций отметок подошвы верхоленской свиты потребовалось разбить модель (по оси z) на 20 слоев, два из которых приходились на четвертичные отложения.

Анализ особенностей развития модельного процесса проводился на основе сопоставления наблюдаемых пространственных распределений в породе нерастворенной и растворенной фаз с соответствующими модельными результатами, также по двум фазам (рис. 14.17). Кроме того, сравнивались соответствующие графики временного $C = f(t)$ прослеживания изменения концентраций 1,2-ДХЭ в расчетных точках (модельных блоках), отвечающих расположению родников и эксплуатационных скважин (см. рис. 14.13).

Полученные данные о пространственном распределении хлороорганических соединений свидетельствуют о том, что модель достаточно адекватно описывает общие тенденции развития миграционного процесса, а именно:

- 1) ореол, представленный нерастворенной фазой, движется в северо-восточном направлении в сторону оз. Змеевка (рис. 14.17, а); основная масса загрязнителя растекается по подошве пласта и заполняет наиболее



пониженные его участки, которые образовали между источником загрязнения и рекой желобоподобную форму в водоупорном основании, поэтому направление движения жидких ВХ-отходов слабо контролируется гидродинамикой регионального фильтрационного потока; скорость смещения отходов составляет около 100 м/год;

2) ореол загрязнения по растворенной части хлорорганических соединений в целом наследует форму интрузии исходного продукта (рис. 14.17, б), однако масштабы загрязнения подземных вод данными соединениями заметно больше; в частности, видно, что, несмотря на сорбцию, скорость миграции растворенной хлорорганики превышает скорость движения исходного продукта; в центральной части ореола концентрации 1,2-ДХЭ достигают концентраций насыщения 6—7 г/л, на периферии ореола концентрации падают до десятых долей—первых единиц миллиграммов на литр.

В задачу модельных расчетов входило исследование поведения ореола загрязнения подземных вод на длительных этапах развития миграционного процесса. При этом считалось, что: 1) источник загрязнения прекратил свое существование, как уже отмечалось, в 1993 г.; 2) дренажные кусты скважин в течение всего прогнозного периода выполняют свои водооградительные функции (т. е. водоотбор производится с существующим дебитом). Расчетный момент времени — 30—40 лет после ликвидации поверхностного источника загрязнения.

Результаты прогнозного моделирования показывают (Румынин, 2011), что загрязнением будет охвачена значительная область фильтрационного потока по береговой линии оз. Змеевка протяженностью более 3 км. Концентрации дихлорэтана при этом изменятся от 1—10 мг/л (на периферии ореола) до нескольких сотен миллиграммов на литр (вблизи оси ореола).

В целом к представленным в данной главе результатам необходимо относиться как одной из первых попыток количественного (модельного) описания исключительно сложного миграционного процесса, обуславливающего крайне негативное (по сути дела, катастрофическое) воздействие на экологическую ситуацию целого района. Одновременно изучение наблюдаемого техногенного явления дает исключительно разнообразную информацию для дальнейшего развития и совершенствования комплекса полевых и модельных исследований геомиграционной направленности в гидрогеологии.

Рис. 14.17. Результат моделирования эпигнозной задачи (2000 г.).

а — нерастворимая часть загрязнителя; черный контур — ореол по фактическим данным на 2000 г. (*сплошная* линия очерчивает контур в верхоленском горизонте, *штриховая* — в юрских отложениях; серый фон — нерастворимая фракция в верхоленском горизонте по результатам моделирования). *б* — растворенная часть загрязнителя; черные изолинии — фактические данные по верхоленскому горизонту (см. рис. 14.15); *пунктирная* линия — концентрации больше 0.001 г/л; оттенки серого на масштабной линейке — изменения растворенной части загрязнителя по результатам моделирования.

ЧАСТЬ V

МИГРАЦИЯ ТЕХНОГЕННЫХ РАДИОНУКЛИДОВ

Среди природных радиогенных элементов, содержащихся в земной коре, известно относительно небольшое количество элементов, которые не имеют стабильных изотопов. Среди них такие «первозданные» радионуклиды, как торий (Th), уран (U), а также радионуклиды, образованные цепочками их радиоактивного распада (например, Ra, Rn, Po). Около 60 радиоактивных элементов имеют стабильные изотопы. Среди них как первозданные радионуклиды (например, ^{40}K , ^{87}Rb), так и радионуклиды, постоянно генерируемые в результате воздействия космической радиации (например, ^{14}C , ^3H , ^7Be). Суммарная активность элементов составляет около 10^{26} Бк, что примерно в 10 раз превосходит активность радионуклидов техногенного происхождения (Poinssot, Geckeis, 2012). Именно о техногенных радионуклидах пойдет речь в этой заключительной части учебника.

Природные радионуклиды, за редким исключением, диспергированы в верхней части земной коры и не представляют опасности. Техногенные радионуклиды часто образуют скопления, являющиеся радиотоксичными, опасными для здоровья людей. К числу главных источников радиоактивных веществ, представляющих интерес для гидрогеологов с точки зрения их воздействия на подземные воды и смежные природные среды (поверхностные воды, почвы), относят участки размещения радиоактивных отходов (РАО) (рисунок).

Появление первых значительных количеств радиоактивных веществ произошло в самом конце 1940-х—начале 1950-х гг. и было связано с реализацией в СССР Атомного проекта. Получение каждого грамма оружейного плутония сопровождалось образованием сотен кубических метров РАО. В настоящее время в поверхностных и подземных хранилищах предприятий ГК «Росатом» содержится более 500 млн м³ жидких РАО с суммарной актив-

А. Накопление/хранение РАО («исторические» отходы)				
Концепция	РАО	СИБ	ГС	Объекты
	НАО, САО	–	–	ПО «Маяк», СХК и др.
	НАО, САО	+	–	Система «Радонов», хранилища СФ ВМФ, Атомфлота и др.*
	НАО, САО	–	+	СХК, ГХК, Димитровград
Б. Окончательная изоляция РАО				
	НАО, САО	+	+	Вендские глины, участок Сосновоборский, северо-запад РФ**
	САО, ВАО	+	+	Ахейские гнейсы, участок «Енисейский», Красноярский край***

Рисунок. Концептуальные схемы обращения с РАО в историческом контексте (см. комментарии в тексте).

Сокращения: НАО — низкоактивные РАО; САО — среднеактивные РАО; ВАО — высокоактивные РАО; СИБ — система инженерных барьеров; ГС — геологическая среда.

Примечание. * — в настоящее время — предприятия Федерального экологического центра (РосРАО); ** — отложенный проект; *** — 2019 г. — начало строительства ПИЛ (подземной исследовательской лаборатории).

ностью около 4 млрд Ки, что примерно в 200 раз превышает активность радиоактивного вещества, высвободившегося при Чернобыльской аварии, имевшей планетарный масштаб (см. гл. 18).

К наиболее известным площадям радиоактивного загрязнения окружающей среды в РФ относятся места размещения предприятий ядерно-технологического цикла «Маяк». В первые

годы реализации Атомного проекта промышленные производства не были готовы к переработке и безопасному хранению значительных объемов радиоактивных отходов. Происходил санкционированный и несанкционированный сброс жидких РАО в гидросеть и поверхностные бассейны-накопители. Похожая ситуация сложилась в США, где участки территорий Hanford и Rocky Flats, связанные с военным комплексом, также оказались сильно загрязненными радионуклидами.

Чуть позже, в 1960-х гг., в СССР начала создаваться сеть приповерхностных хранилищ РАО, не связанных непосредственно с военным комплексом. Наиболее известна система «Радонов», где производится хранение использованных радиоактивных материалов исследовательских и медицинских центров, а также АЭС. Хранение отработанного ядерного топлива также может представлять угрозу окружающей среде.

В 1958 г. было принято первое распоряжение Правительства по вопросам глубинного захоронения жидких РАО. По сути — политическое решение, которое до сих пор вызывает острые дискуссии, выходящие на международный уровень.

Все перечисленные объекты эксплуатируются до настоящего времени. Понимая экологическую значимость проблемы, в 2011 г. была принята новая концепция обращения с радиоактивными материалами, оформленная в виде государственного закона. Согласно этой концепции должен осуществиться переход от хранения РАО к их захоронению и окончательной изоляции таким образом, чтобы не переносить бремя ответственности на последующие поколения. Для этого планируется создание двух региональных пунктов захоронения радиационных отходов (ПЗРО) — в глинистых и кристаллических породах.

На вышеприведенном рисунке концептуально (знаками «+» и «-») обозначена роль системы инженерных барьеров (СИБ) и геологической среды (ГС) в обеспечении защиты биосферы от радиоактивного загрязнения. Для исторических отходов в поверхностных бассейнах-накопителях РАО роль СИБ и ГС в обеспечении долговременной безопасности малозначима. Системы глубинного захоронения жидких РАО полностью сориентированы на защитные функции ГС. Безопасное поверхностное хранение РАО в специально оборудованных технологических помещениях основывается главным образом на СИБ. Создание ПЗРО (ПГЗРО) в равной степени учитывает СИБ и ГС (современная концепция).

Возвращаясь к потенциальным источникам техногенных радионуклидов в окружающей среде, отметим, что испытание

ядерного оружия в открытом пространстве (1948—1963), а также высвобождение продуктов деления при авариях на ядерно-энергетических установках (Чернобыль, 1986 г., Фукусима, 2011 г.), привело к изменению радиоактивного фона в пределах обширных территорий, и последствия глобальных выпадений радиоактивных веществ на поверхность сказываются до настоящего времени (см. гл. 18).

Глава 15

РАДИОАКТИВНЫЙ РАСПАД И ОСОБЕННОСТИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ РАДИОНУКЛИДОВ В ПОДЗЕМНОЙ ГИДРОСФЕРЕ

15.1. Радиоактивный распад

Решение некоторых задач конвективной дисперсии нестабильного компонента, подверженного сорбции, рассмотрено в разд. 2.5. Для экспертных оценок на стадии схематизации условий техногенного загрязнения подземных вод радиоактивными веществами часто бывает достаточно ограничиться одномерной моделью поршневого вытеснения:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = -\lambda RC, \quad (15.1)$$

где λ — константа распада, определяемая периодом полураспада ($T_{1/2}$); $\lambda = 0.693/T_{1/2}$; R — фактор сорбционной задержки (разд. 2.2.3); $u = u_x$ — действительная скорость миграции частиц воды.

Уравнению в частных производных (15.1) соответствует характеристическая система обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dt}{R} = \frac{dx}{u} = -\frac{dC}{\lambda RC}. \quad (15.2)$$

При ступенчатой исходной концентрационной функции

$$C = \begin{cases} C_0 & \text{при } x \leq 0, \\ 0 & \text{при } x > 0 \end{cases} \quad (15.3)$$

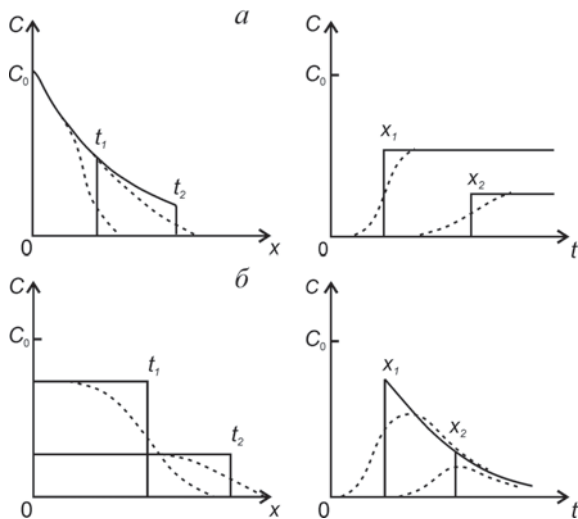


Рис. 15.1. Характерные графики распределения $C(x, t)$ компонента, подверженного распаду.

a и b отвечают различным граничным условиям: a — $C(0, t) = C_0$, b — $C(0, t) = C_0 \exp(-\lambda t)$. Сплошные и пунктирные линии отвечают расчетным схемам поршневого вытеснения и микродисперсии.

решение (15.2) имеет вид:

$$C = \begin{cases} C_0 e^{-\lambda t_0} & \text{при } t \geq t_0 = \frac{xR}{u}, \\ 0 & \text{при } t < \frac{xR}{u}. \end{cases} \quad (15.4)$$

В соответствии с этим решением за фронтом переноса концентрация остается постоянной в течение всего периода миграции. На фронте поршневого вытеснения в расчетный момент времени t значение относительной концентрации $C = C_0 e^{-\lambda t}$, откуда следует, что при $t > (2-3)/\lambda$ концентрация на фронте вытеснения близка к фоновой: наступает стационарный режим переноса, при котором границы ореола остаются стабильными весьма длительное время (при постоянной входной концентрации), — см. рис. 15.1, a . В соответствии с формулой (15.4) длина переходной зоны, в пределах которой концентрация падает от $C/C_0 = 0.99$ до $C/C_0 = 0.01$, составляет $4.6u/\lambda R$.

Иногда приходится иметь дело с так называемыми затухающими источниками радиоактивного загрязнения, в которых не

происходит накопления радионуклидов и постепенно отмечается падение их концентраций по экспоненциальному закону. В этом случае искомые решения могут быть представлены в обобщенном виде:

$$C|_{\lambda > 0} = e^{-\lambda t} C|_{\lambda = 0}, \quad (15.5)$$

т. е. они получаются путем умножения функций $C|_{\lambda = 0}$, отвечающих известным решениям задач переноса без распада, на «фактор распада» — временную функцию $e^{-\lambda t}$. Для одномерного поршневого переноса решение, подобное (15.4), имеет вид:

$$C = \begin{cases} C_0 e^{-\lambda t} & \text{при } t \geq t_0 = \frac{xR}{u}, \\ 0 & \text{при } t < \frac{xR}{u}. \end{cases} \quad (15.5a)$$

Интересно отметить, что, как следует из этого решения, концентрация вещества во всей области $x < ut/R$ имеет одинаковое значение, изменяющееся во времени в диапазоне $C = C_0 \exp(-\lambda Rx/u)$ до $C = 0$. Характер концентрационных распределений показан на рис. 15.1, б.

15.2. Влияние сорбционных процессов на миграцию радионуклидов

Сорбция растворенных веществ на поверхности минеральных агрегатов (пористые породы) или на стенках трещин и каналов (трещиноватые породы) является одним из главных факторов, сдерживающих загрязнение подземных вод. Процесс поглощения вещества породой иногда сопровождается диффузией растворенных компонентов внутрь зерен минеральных агрегатов (т. е. носит абсорбционный характер), что также замедляет массоперенос конвекцией. В этом же направлении действует абсорбция вещества внутри породных блоков трещиноватых пород с выраженной емкостью пористой матрицы, заполняющей межтрещинное пространство. С другой стороны, адсорбция на мобильных коллоидных частицах может приводить к активизации миграции веществ, традиционно относимых к хорошо адсорбируемым и соответственно малоподвижным в водоносных горизонтах (см. разд. 16.2).

15.2.1. Kd-концепция, ее достоинства и недостатки

Как уже отмечалось (разд. 2.5.1), для описания линейной сорбции растворенных веществ, в частности радионуклидов, в потоке подземных вод удобно пользоваться параметром, называемым в литературе коэффициентом (фактором) сорбционной задержки (retardation factor). Для линейной адсорбции

$$R = 1 + \frac{K_d \rho_b}{n}, \quad R = 1 + \frac{K_a S_b}{n} \quad (15.6)$$

— соответственно для пористых и трещиноватых пород; здесь K_d — коэффициент сорбционного распределения [L^3M^{-1}]; ρ_b — объемная плотность сухой породы [ML^{-3}]; K_a — коэффициент поверхностной сорбции на трещинах [L]; S_b — удельная поверхность трещин (блоков), доступная для подвижной воды (разд. 3.3.1) [L^{-1}].

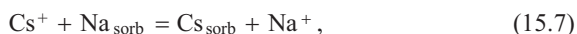
По своему физическому смыслу эта величина отвечает степени замедления скорости переноса сорбируемого вещества u^s по сравнению со скоростью движения растворителя (воды) — u : $R = u/u^s$. Подход к описанию сорбции, основанный на использовании коэффициентов сорбционного распределения (или фактора сорбционной задержки), получил название Kd-концепции.

Интенсивность сорбционных процессов, находящая отражение в соответствующих коэффициентах распределения, контролируется обширной совокупностью физико-химических параметров пород и взаимодействующих с ними растворов. При этом отмечается повышенная чувствительность опытных результатов к изменению гранулометрического и минералогического состава пород, а также к колебаниям содержаний в последних органического вещества, что объясняет, в частности, противоречивость литературных данных по сорбции одних и тех же компонентов на породах близких литологических разностей. Определенные закономерности удается установить лишь при оценке влияния на сорбцию изменения некоторых обобщенных термодинамических характеристик (таких как ионная сила, pH, макрокомпонентный состав) растворов, содержащих исследуемые радионуклиды.

Так, достаточно характерным является случай сорбции радионуклидов из растворов, ионная сила которых определяется содержаниями макрокомпонентов. В этом случае, как правило, рост ионной силы приводит к уменьшению количества сорбируемого породой компонента. Это объясняется тем, что увеличе-

ние концентрации избыточного катиона в растворе создает конкуренцию радионуклиду, занимая часть активных площадок на минеральном скелете и снижая тем самым степень его концентрирования породой. Одновременно в растворах с высокой ионной силой падает активность (действующая концентрация) этого радионуклида, обуславливая ту же направленность в изменении эффективных параметров сорбции. Приведем несколько конкретных примеров.

Пример 1. Влияние концентрации конкурирующего макрокатиона на коэффициент сорбционного распределения может быть проиллюстрировано на примере ионообменной реакции



которая характеризуется коэффициентом селективности (4.25)

$$K_{12} = \frac{[\text{Na}][\text{Cs}]_{\text{sorb}}}{[\text{Cs}][\text{Na}]_{\text{sorb}}}. \quad (15.7a)$$

С другой стороны, в сорбционной «интерпретации» реакции (15.7a) соответствует коэффициент сорбционного распределения

$$K_{12} = \frac{[\text{Cs}]_{\text{sorb}}}{[\text{Cs}]}. \quad (15.7б)$$

Полагая $[\text{Na}]_{\text{sorb}} = N_v - [\text{Cs}]_{\text{sorb}}$, перепишем последнее равенство в форме

$$K_d = \frac{N_v}{[\text{Na}]/K_{12} + [\text{Cs}]}, \quad (15.7в)$$

где N_v — ионообменная емкость. В низкоактивных радиоактивных отходах концентрация Cs-137 обычно находится в диапазоне 0.1—10 мкКю/л, что отвечает химической концентрации около 10^{-11} — 10^{-9} моль/л (Lehto, Najula, 1999). Концентрация ионов натрия почти всегда много больше концентрации цезия ($> 10^{-3}$ моль/л), так что $[\text{Na}]/K_{12} \gg [\text{Cs}]$. В этих условиях концентрация $[\text{Cs}]$ не влияет на значение коэффициента распределения, который оказывается зависящим главным образом от концентрации ионов натрия в растворе

$$K_d = \frac{K_{12}N_v}{[\text{Na}]}, \quad (15.7г)$$

т. е. форма зависимости обратно пропорциональная — при увеличении концентрации натрия в несколько раз коэффициент K_d уменьшается во столько же раз.

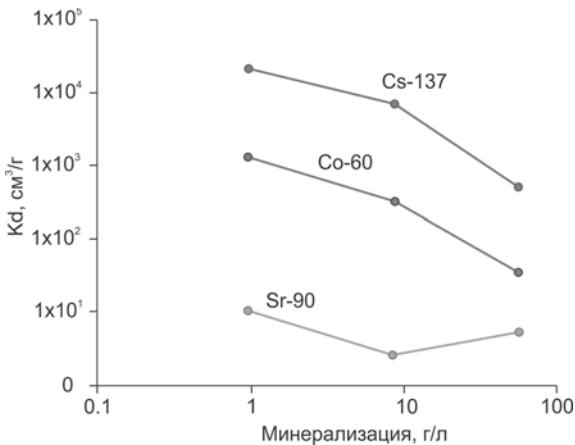
Таблица 15.1

Средние значения коэффициентов адсорбционного распределения

Радионуклид	Sr-90			Co-60			Cs-137		
	0.96	8.55	55.66	0.96	8.55	55.66	0.96	8.55	55.66
Минерализация, г/л									
	$K_d, \text{см}^3/\text{г}$								
Среднее	10.2	2.5	5.3	1310.2	322.5	36.1	21322.7	6961.1	506.9
Максимальное	20.6	4.8	7.9	2818.2	586.5	72.2	33550.3	13373	824.3
Минимальное	2.0	0.3	2.7	106.3	74.6	15.8	1853.2	287.4	42.4
Дисперсия	29.8	1.3	2.1	287012	17854	143.8	$5.5 \cdot 10^7$	$1.0 \cdot 10^7$	$5.4 \cdot 10^4$

Пример 2. Прогнозы последствий аварийных утечек радиоактивных растворов на участках размещения объектов Бушерской АЭС (Иран), расположенной на берегу Персидского залива, должны учитывать исходную неоднородность гидрохимического разреза. Она обусловлена присутствием интрузии морских вод в прибрежном водоносном горизонте (представленном мелкозернистыми песками, супесями и суглинками). В этой связи в лабораторных экспериментах изучалась способность пород сорбировать радионуклиды Sr-90, Co-60 и Cs-137 в водных растворах, представляющих собой различной степени разбавления морскую воду. Рассчитанные средние значения коэффициентов адсорбционного распределения приведены в табл. 15.1.

По степени сорбируемости исследуемые радионуклиды расположились в ряд: Sr-90 < Co-60 < Cs-137. Для всех радионуклидов наблюдается общая закономерность уменьшения коэффициента сорбционного распределения с ростом минерализации (рис. 15.2), причем эта зависимость

Рис. 15.2. Зависимость средних значений K_d от минерализации раствора.

Влияние содержания NaNO_3 на коэффициент
поверхностного распределения Sr-90

Порода	Номер скважины	Интервал, м	Номер опыта	NaNO_3 , г/л	K_d , см
Туфолава, туф	1-96	98—100	1	1.0	0.57
			2	15	0.21
			3	70	0.18
Туфолава	1-96	71	6	1.0	0.31
			7	15	0.05
			8	70	0.04
Туф	1-96	26	9	1.0	3.49
			10	15	0.27
			11	70	0.04
Лавобрекчия*	211А	—	12	1.0	0.20
			13	15	0.04
			14	70	0.03

* Обломки от базальтов до дацитов.

близка к экспонентальной: десятикратное увеличение минерализации приводит примерно к десятикратному падению коэффициента K_d , характеризующего сорбцию Co-60 и Cs-137. Исключение составляет Sr-90, где в имитате с минерализацией 55.66 г/л наблюдались повышенные значения K_d по сравнению с менее минерализованным раствором 8.55 г/л, что объяснялось выпадением сульфатов (гипса) в осадок, с которым Sr-90 образует минеральную фазу.

Анализ распределения коэффициентов адсорбции по глубине выявил отсутствие прямой связи между сорбционной способностью и типом литологической разности породы, т. е. значения K_d в первую очередь определяется минерализацией подземных вод, а литологический состав пород играет подчиненную роль.

Пример 3. Опыты выполнялись с целью изучения загрязнения подземных вод радиоактивными растворами существенно NaNO_3 состава в районе оз. Карачай (см. разд. 16.4). Керновый материал был отобран из трех различных скважин на незагрязненных участках в пределах трех интервалов глубин. Пробы представлены туфом, лавой, туфолавой и лавобрекчией. Из керна были вырезаны дискообразной формы образцы (90 мм в диаметре и 2—4 мм толщиной). Диски были помещены в стеклянные контейнеры, заполненные радиоактивными (Sr-90/Sr-85) растворами NaNO_3 : 70, 15 и 1 г/л. Такая градиация отвечает типовым зонам загрязнения подземных вод, ассоциирующимся с источником рассолов, областью транзита и передовым фронтом загрязнения.

Как видно из табл. 15.2 и рис. 15.3, рассчитанные значения K_d зависят от концентрации в растворе NaNO_3 (C_s). Чем более концентрированным является раствор, тем ниже значение K_d . Так, в рассоле ($C_s = 70$ г/л) значе-

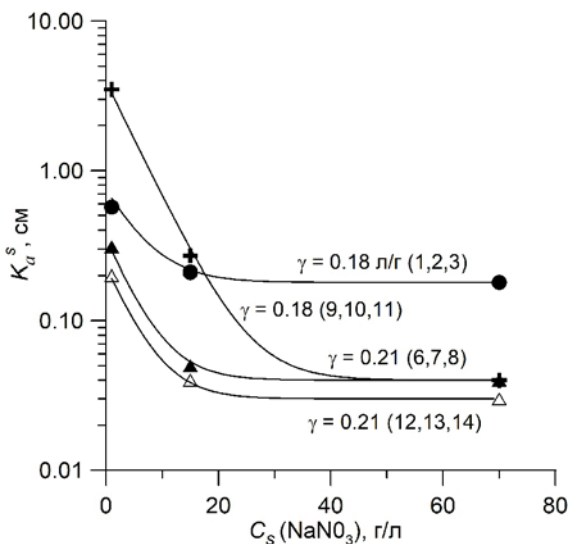


Рис. 15.3. Влияние концентрации NaNO_3 на коэффициент сорбционного распределения.

Номера опытов (цифры в скобках) отвечают табл. 15.2. Теоретические кривые рассчитаны на основе уравнения (15.8).

ния K_a были установлены в диапазоне 0.04 см. В разбавленных растворах ($C_s = 1$ г/л) значение K_a как минимум в 5—10 раз выше.

Функциональная зависимость между K_a и C_s может быть аппроксимирована приближенной формулой:

$$K_a = K_{a1}e^{-\gamma C_s} + K_{a2}, \quad (15.8)$$

где сумма K_{a1} и K_{a2} соответствует коэффициенту распределения радионуклида в разбавленном растворе; K_{a2} — коэффициент, характеризующий адсорбцию в сильно концентрированном растворе (рассоле); γ — экспоненциальный показатель; среднее значение коэффициента γ составляет 0.2 л/г (рис. 15.3).

Менее однозначно интерпретируется влияние на адсорбцию химической природы доминирующего аниона. Однако если априорно допустимо пренебречь ролью комплексообразования — как процесса, удерживающего в растворе дополнительное (по сравнению с равновесной ионной формой) количество компонента в химически связанной с анионом форме, то наиболее сильное влияние оказывает специфическая адсорбция этого аниона. Среди традиционно рассматриваемых анионов-макро-

компонентов к такой адсорбции склонны сульфат-ионы (SO_4^{2-}). Адсорбируемость SO_4^{2-} зависит от pH (в случае, когда процесс протекает по анионообменному механизму, т. е. из обменного комплекса вытесняется гидроксильная группа) и содержания в породе органического вещества. Адсорбция SO_4^{2-} может увеличить поверхностный потенциал породы и тем самым интенсифицировать адсорбцию микрокомпонентов.

Изменение кислотно-щелочной реакции среды может также повлиять на величину сорбционной емкости породы, что особенно важно учитывать для нелинейных изотерм. Так, при низких pH активные площадки на минеральной фазе породы, способные к адсорбционному осаждению компонента, часто оказываются заполненными протонами (H^+).

Достоинства и недостатки рассматриваемой здесь Kd-концепции отчетливо проявились в многочисленных работах, посвященных, в частности, исследованию сорбции радионуклидов, таких как Cs-137, Sr-90, Co-60, а также актинидов (Белицкий, Орлова, 1968; Understanding variation... 1999). Эти исследования выявили практически неограниченные диапазоны изменения характерной константы K_d — от десятых долей и первых единиц до многих тысяч кубических сантиметров на грамм. Минимальные значения соответствуют песчаным или гравелистым разностям пород, фильтрующим высокоминерализованные растворы; максимальные — глинистым разностям в условиях их диффузионного насыщения слабоминерализованными растворами. В трещиноватых породах диапазон изменения K_d составил 0.1—100 см. При этом важную роль может играть неоднородное распределение адсорбируемых веществ на стенках трещин в зависимости от представленных на них минералов.

Главное же заключается в том, что результаты этих работ свидетельствуют о неинвариантности расчетных значений константы $K_d(K_a)$, которые оказываются сильно зависящими от физико-химических (геохимических) условий миграции радионуклидов: даже небольшие изменения состава раствора и температуры, которые всегда имеют место в пластовых условиях, приводят к резким, главным образом немонотонным, изменениям $K_d(K_a)$. Зачастую оказывается невозможным подобрать среднее (единственное) значение данной константы, удовлетворительно описывающее поведение концентрационных фронтов; эти значения часто резко различны для начальной и конечной фаз загрязнения в данной точке.

Поэтому корректное использование Kd-концепции предполагает выполнение условия о неизменности физико-химических

условий в период перемещения загрязнения по пласту. Иными словами, должны отсутствовать эффекты, приводящие к концентрированию или разбавлению компонентов в пределах ореола загрязнения.

Кроме того, отметим, что даже в статических лабораторных опытах довольно часто наблюдается неинвариантность расчетного параметра K_d . Так, многими авторами отмечается, что значение K_d может зависеть от соотношения объема раствора V и массы твердой m_s (минеральной) фазы (так называемое Ж:Т отношение), принимаемого в экспериментальных сериях. Такая зависимость может быть обусловлена процессами комплексообразования изучаемого компонента в растворе. Другая вполне вероятная причина связана с тем, что с изменением отношения V/m_s меняется концентрация в растворе обменных катионов или растворенных солей, содержащихся изначально в породе, которые конкурируют за обменные площадки (адсорбционные центры) на породе с изучаемым компонентом. Поэтому очень важно при проведении различных экспериментальных серий сохранять отношение V/m_s постоянным, в противном случае даже качественное сравнение результатов оказывается некорректным.

Наконец, необходимо отметить, что рост значений K_d во времени, нередко отмечаемый в лабораторных опытах, а также в результате анализа режимных наблюдений за миграцией загрязняющих компонентов, может объясняться использованием равновесной модели для реального кинетического процесса.

С этих позиций любая экстраполяция лабораторных (или даже полевых) определений констант K_d и K_a на прогнозные условия часто оказывается малонадежной.

Сказанное определило в последнее время активную критику K_d -концепции и явилось стимулом к разработке более совершенных подходов к описанию данного класса физико-химических взаимодействий. Так, альтернативной для рассмотренной модели физической адсорбции могут служить модели ионного обмена и поверхностного комплексообразования. Однако их использование на практике также связано с серьезными трудностями.

Во-первых, выбор типа модели, подходящей для описания адсорбционного взаимодействия компонентов в составе раствора с реальной породой полиминерального состава, требует нередко анализа процесса на молекулярном и атомарном уровне с привлечением разнообразного (обычно весьма дорогостоящего) лабораторного оборудования и высококвалифицированных специалистов. Однако даже при выполнении этих условий неопре-

деленность в корректности распознавания реальных сорбционных механизмов остается весьма высокой.

Во-вторых, при взаимодействии с реальной породой, представляющей собой полиминеральную смесь, адсорбционные реакции, активизирующиеся на различных минеральных поверхностях, могут управляться разнородными механизмами и протекать по нескольким схемам, что дополнительно усложняет расшифровку опытных результатов и выбор предпочтительной модели.

В-третьих, упомянутые модели (которые с позиций строгой термодинамики также могут быть подвергнуты критике, учитывая «селективный» характер входящих в них констант), являются многопараметрическими, что затрудняет включение их в транспортные блоки гидродинамических моделей с вытекающими отсюда трудностями верификации, валидации и калибрации, а главное — их параметрического наполнения.

Судя по всему, традиционный подход, основанный на использовании упрощенных моделей с обобщенными коэффициентами линейной или нелинейной изотермической адсорбции, несмотря на очевидные недостатки, еще долго будет доминировать в практике гидрогеологических исследований. Их полное вытеснение многопараметрическими термодинамическими моделями, описывающими рассматриваемый вид физико-химических взаимодействий в более совершенном виде и интегрированными в соответствующие транспортные модели, — дело отдаленного будущего.

Одним из ограничений, накладываемых на использование традиционных подходов к описанию адсорбционных процессов, связано с нелинейным характером изотерм сорбции, а также с полной или частичной необратимостью сорбционного процесса (Румынин, 2011).

15.2.2. Нелинейные изотермы сорбции и десорбция радионуклидов

Нелинейный характер зависимости $N = f(C)$ достаточно часто отмечается в сорбционных экспериментах с радионуклидами. Во многих случаях удовлетворительные результаты дает аппроксимация экспериментальных данных изотермами Фрейндлиха (4.2) и Лэнгмюра (4.3). Рассмотрим в качестве примера опыты по сорбции Sr-90 и Cs-137 на образцах песчаных пород, отобранных на двух участках радиоактивного загрязнения подземных вод.

15.2.2.1. Сорбция на кембрийских песчаниках

Со слабо литофицированными песчаниками (ломоносовский водоносный горизонт) связан ореол загрязнения, сформировавшийся в результате утечек радиоактивных растворов (продуктов выщелачивания твердых РАО) на комбинате «Радон» (Сосновоборский район, Ленинградская обл.) (Румынин, 2011). Основная кристаллическая фаза пород на 90—95 % представлена кварцем, и только 3—5 % этой фазы занимают мусковит, полевой шпат и хлорит. Наличие гидроокислов железа и глинистых минералов не более 3—4 %. Примеси гидроокислов определяют цветовую гамму песка (см. далее разд. 15.2.3).

Особенности химических равновесий при различной направленности процесса (адсорбция или десорбция) в системе «раствор Sr-90/Cs-137 — порода» (применительно к одной из исследованных разновидностей песков) показаны на рис. 15.4.

Сорбционные ветви приведенных графиков в билогарифмических координатах имеют линейный вид. Такая форма графиков свойственна изотермам, описываемым уравнением степенного вида Фрейндлиха (4.2):

$$N^s = K_F^s C^{n^s} \quad (\ln N^s = \ln K_F^s + n^s \ln C), \quad (15.9)$$

где K_F и n^s — соответственно линейная и экспоненциальная константы сорбции.

Сорбционный процесс характеризуется выраженным гистерезисом — десорбционные точки отклоняются от сорбционных изотерм, причем в некоторых опытных сериях прослеживается тенденция приближения изотерм к «стационарным» асимптотикам: $N(C) = N^0 = \text{const}$. Это свидетельствует об удержании породой заметных количеств радионуклидов при

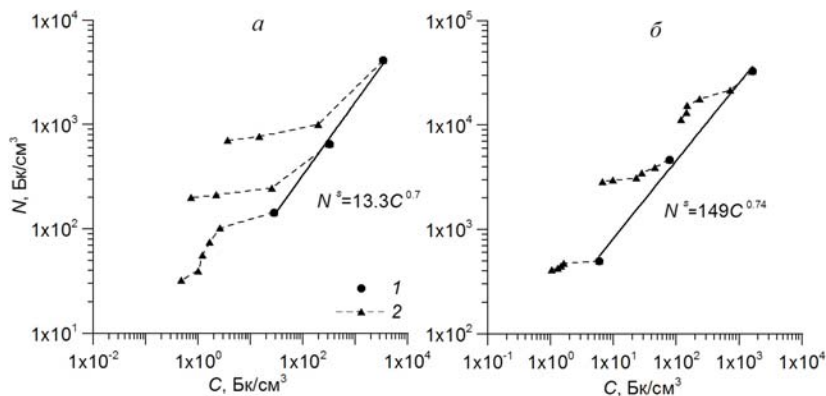


Рис. 15.4. Адсорбционно-десорбционные эксперименты с Sr-90 (а) и Cs-137 (б).

1 — сорбция (сплошные линии), 2 — десорбция (штриховые линии).

весьма низких их концентрациях в контактирующем с породой растворе. Некоторые теоретические модели, объясняющие выявленное в опыте поведение системы, рассмотрены в работе (Румынин, 2011).

15.2.2.2. Сорбция на глинистых песках верхнемелового возраста

Сорбционные эксперименты, подобные вышеописанным, проводились с породами песчаного состава, отобранными из горизонта III — пласта-коллектора для размещения жидких РАО на полигоне Сибирского химического комбината (СХК). Для опытов использовалась как пластовая пресная вода, так и кислые растворы нитрата натрия (10 г/л) (Румынин, 2011). Десорбционные шаги связывались с заменой равновесного радиоактивного раствора на пресную воду или раствор нитрата натрия.

Большинство изотерм адсорбции, представленных в билогарифмических координатах, имеют явно выраженный линейный характер η (рис. 15.5). Такая форма графиков, как отмечалось, свойственна изотермам, описываемым уравнением степенного вида Фрейндлиха (4.2).

Десорбционные изотермы N^d достаточно близки к сорбционным изотермам η (рис. 15.5), хотя видно, что при близких степенных показателях нелинейности (η) линейные коэффициенты K_F , характеризующие десорбцию, заметно выше соответствующего показателя сорбции, т. е. порода менее «охотно» десорбирует радионуклиды, чем сорбирует их. Данный эффект должен учитываться при прогнозировании реабилитации радиоактивно-загрязненных водоносных горизонтов.

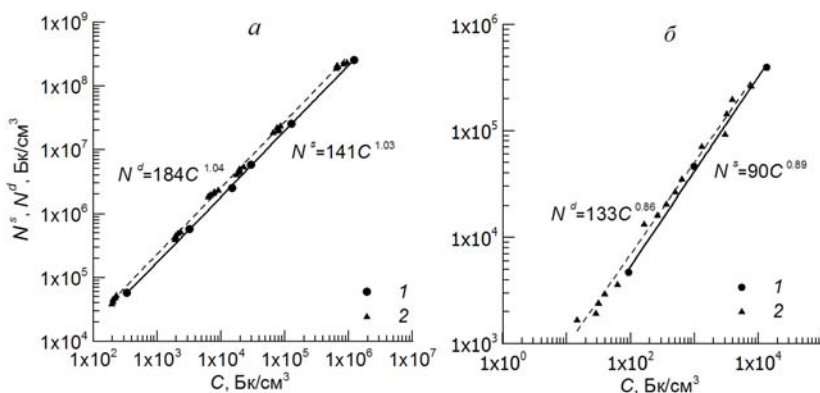


Рис. 15.5. Изотермы сорбции (1, сплошные линии)/десорбции (2, штриховые линии).

а — Sr-90 (пресная подземная вода), б — Cs-137 (раствор NaNO_3).

15.2.3. Пространственная изменчивость сорбционных параметров

15.2.3.1. Вводные замечания

Хорошо известно, что гетерогенность водоносных систем, под которой понимается в общем случае пространственная изменчивость геофильтрационных и физико-химических параметров пород как среды, в которой происходит миграция загрязняющих компонентов, играет ключевую роль в формировании ореолов загрязнения подземных вод (Neuman, 1990; Gelhar, 1993; Dagan, 2001). Для изучения массопереноса в таких системах необходимо сочетание анализа детерминированных результатов отдельных экспериментов с элементами стохастического описания системы в целом. Разработке модельных представлений о комбинированном влиянии на массоперенос двух уровней гетерогенности уделяется достаточно большое внимание в гидрогеологической литературе.

Подавляющее число публикаций посвящено исследованию изменчивости проницаемости (коэффициента фильтрации k) пород. Пространственные вариации физико-химических характеристик пород исследованы на крайне ограниченном количестве участков, причем с ориентировкой главным образом на изучение вариаций коэффициента адсорбционного распределения K_d применительно к отдельным типам загрязняющих компонентов. При этом в публикациях, как правило, речь идет о пористых породах, для которых характерна обратная корреляционная связь характеристик K_d и k , что обусловлено определяющим влиянием глинистой фракции, повышенные содержания которой способствуют уменьшению проницаемости пород, с одной стороны, и увеличению их сорбционной способности — с другой. В то же время важно отметить, что в трещиноватых породах зоны с повышенной проницаемостью, наоборот, характеризуются и повышенной сорбционной емкостью. Это объясняется тем обстоятельством, что эти зоны обычно наиболее трещиноваты, а следовательно, породы обладают большей удельной поверхностью, что и находит отражение в росте значений расчетного коэффициента сорбционного распределения.

Вариации коэффициента K_d и, очевидно, других физико-химических параметров связаны с минералогической неоднородностью пород, случайным или закономерным распределением в породе продуктов выветривания первичных минералов, формирующих вторичные глинистые минералы или оксидные (гидро-

оксидные) пленки металлов на поверхностях минеральных зерен, причем оксиды и гидроксиды могут образовывать и самостоятельные фазы в виде включений. Присутствие глинистой компоненты находит отражение в процентном распределении частиц по размеру, а также в удельной поверхности репрезентативного объема породы.

В целом анализ опубликованных материалов свидетельствует о том, что корреляционные связи между сорбционными параметрами (в частности, K_d), с одной стороны, и минералогическими, литологическими, физико-химическими и другими свойствами пород — с другой, не всегда столь очевидны и выявление этих связей требует приложения немалых экспериментальных усилий. Чаще всего коэффициенты корреляции невысоки, а экспериментальные данные указывают на возможность влияния на вариации численных значений K_d сразу нескольких факторов (Viswanathan et al., 2003).

15.2.3.2. Иллюстративный пример

Фактический материал, положенный в основу настоящего раздела, был получен в процессе изучения сорбционных свойств кембрийских песчаников и связанного с ними ломоносовского водоносного горизонта на участке его радиоактивного загрязнения (см. разд. 15.2.2.1).

Пробы, отобранные вблизи участка загрязнения из различных скважин и откоса котлована, различаются по цвету. В первом приближении можно ориентироваться на две цветовые градации: серые (светлых и темных оттенков) и пестроцветные (в диапазоне цветовой гаммы от желтого до оранжево-рыжего) песчаники. Темно-серые песчаники — породы с повышенной влажностью. Из описания песчаных отложений в откосе котлована видно, что пестроцветные песчаники располагаются преимущественно в верхней (примерно 50—70 см) части разреза и, по-видимому, их окраска связана с присутствием повышенных количеств окислов и гидроксидов металлов. Это — зона первичного взаимодействия инфильтрационных и поровых вод, в пределах которой активно протекают окислительно-восстановительные процессы (своего рода гидрохимический барьер). Окрашенные разности песчаников встречаются также в виде отдельных прослоев в нижней части разреза («ожелезненные корки»). Как известно, окислы и гидроокислы металлов являются хорошими сорбентами. В составе серых песчаников, подстилающих окрашенные в желтые и коричневые цвета разности пород, также встречаются тонкие прослои тонкодисперсного материала.

В лабораторных условиях изучалась сорбция Co-60, Cs-137 и Sr-90. Отношение V/m_s во всех опытах выдерживалось постоянным 10 ($V = 40$ мл; $m_s = 4$ г). Начальные концентрации радионуклидов около 2000 Бк/л. Погрешность определения активности радионуклида не превы-

Статистика распределений $\ln K_d$ ломоносовских песков по результатам анализа обобщенных (без подразделения на цвета) статистических выборок

Радионуклид	min	max	μ_Y	σ_Y^2	W_Y	N
Co-60	3.13	6.87	5.03	0.82	0.18	100
Cs-137	0.94	7.83	4.90	1.62	0.26	100
Sr-90	-1.72	1.92	0.73	0.37	0.83	100

Примечание. Здесь и далее: $Y = \ln K_d$; μ_Y — среднее; σ_Y^2 — дисперсия; W_Y — коэффициент вариации; N — количество проб (образцов).

пшала 10 %. В качестве адсорбента использовались пробы песчаника (песка) с различных глубин, отобранные из скважин (примерно расположенных по регулярной сетке 3×3 м), а также из котлована. Количество расчетных равновесных точек $N-C$, полученных в опытах с различными радионуклидами, равно 100, что дает основу для полноценного статистического анализа.

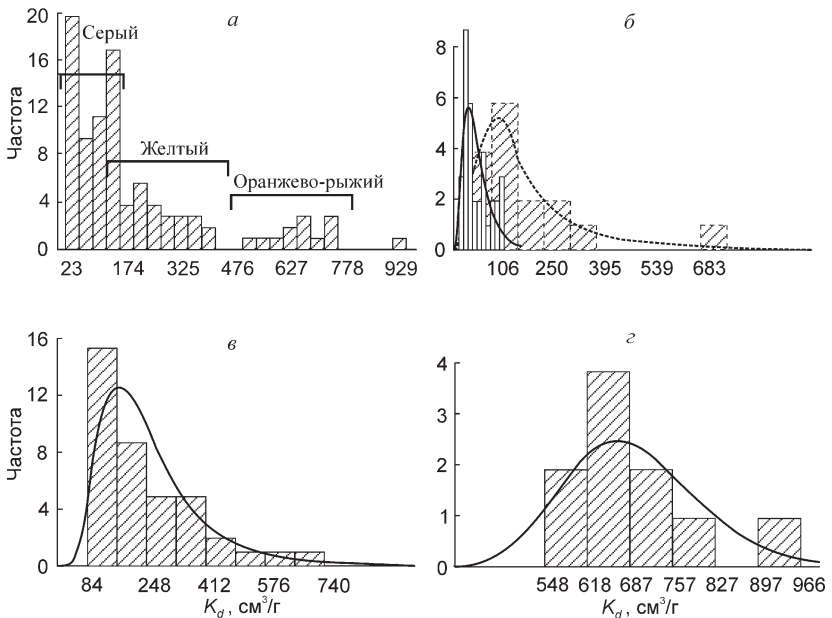


Рис. 15.6. Частотные графики распределений (гистограммы) K_d для Co-60. *а* — обобщенные данные; *б* — серый песчаник (сплошная линия — сухой, пунктирная — влажный); *в* — желтый песчаник; *г* — оранжево-рыжий песчаник. Исключены точки с $K_d > 1000$ $\text{см}^3/\text{г}$.

**Статистика распределений $\ln K_d$ ломоносовских песков
по результатам анализа статистических выборок для Со-60**

Цвет	min	max	μ_Y	σ_Y^2	W_Y	N
Желтый	4.43	6.61	5.4	0.25	0.09	40
Оранжево-рыжий	6.31	6.87	6.5	0.02	0.02	10
Серый	3.13	5.01	4.2	0.26	0.12	34
Темно-серый*	3.51	6.63	5	0.61	0.16	16

* Песчаник с повышенной влажностью (вблизи уровня подземных вод).

Для выявления статистических закономерностей строились гистограммы распределений для коэффициента K_d как для полных статистических выборок (табл. 15.3), так и для частных выборок, относящихся к одному из выделенных цветов. Сразу же отметим, что все исследованные выборки не противоречат логнормальному закону распределения (рис. 15.6). Кроме того, изучалась связь коэффициентов распределения с содержанием окисленных металлов в пробах.

Достаточно чувствительным к цветовой шкале оказался коэффициент K_d , характеризующий адсорбцию Со-60 (см. рис. 15.3, табл. 15.4). Из представленных расчетных данных следует, что ярко окрашенные разновидности песчаников более активно сорбируют данный радионуклид, причем чем в более темные цвета окрашена порода, тем выше K_d . Поэтому можно предположить, что существует определенная связь степени сорбируемости радионуклида породой с содержанием в ней оксидов и гидрооксидов металлов, присутствие которых придает и окраску породе.

В этой связи представляют интерес результаты опытов по растворению минеральной фазы породы последовательно в соляной, азотной и плавиковой кислотах, позволившие определить суммарное содержание ряда металлов (Fe, Mn, Al, Na, K, Cs, Ca, Mg, Sr, Co, Cu, Pb, Cr, Ni, Zn, Ti) в отдельных породных пробах, исследованных в сорбционном отношении. Как видно из рис. 15.7, отмечается удовлетворительная линейная корреляция коэффициента сорбционного распределения K_d с содержанием в породе суммарного железа и марганца. Точки на графике рис. 15.7, отвечающие повышенным концентрациям металлов и значениям коэффициента K_d , соответствуют наиболее темным разновидностям песчаников. Корреляция K_d ионов кобальта с содержанием в породе оксидов и гидрооксидов железа и марганца хорошо согласуется с исследованиями других авторов (Anderson, Christensen, 1988), приходивших к тем же выводам.

Для радиоактивных изотопов цезия и стронция не удалось выявить сколько-нибудь значимой связи статистических распределений с цветовой гаммой, а также с концентрацией окисленных форм металлов. На слабое влияние оксидных пленок на адсорбцию Cs-137 указывают и другие исследования (Сабодина, 2008). Поэтому вариации K_d описываются обоб-

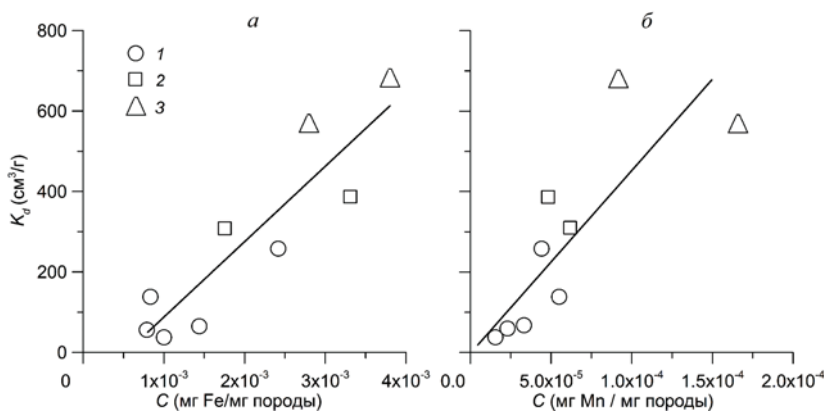


Рис. 15.7. Зависимость K_d от содержания железа (а) и марганца (б) в про-
бе.

Песчаник: 1 — серый, 2 — желтый, 3 — оранжево-рыжий.

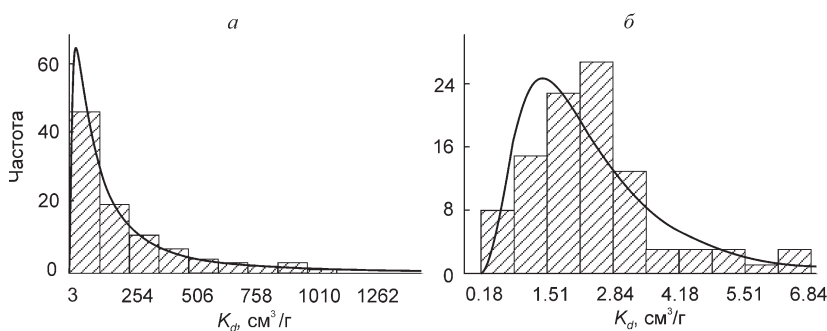


Рис. 15.8. Обобщенные гистограммы K_d .

а — Cs-137; б — Sr-90.

ценными гистограммами (рис. 15.8), характеристики которых отражены в табл. 15.3.

Сопоставление полученных результатов (табл. 15.3 и 15.4) показывает, что по степени сорбируемости породой радионуклиды располагаются в ряд (в порядке убывания средних значений K_d): Co-60, Cs-137, Sr-90. При этом можно отметить более высокие значения коэффициентов вариации W_Y двух последних членов этой последовательности по сравнению с первым.

15.2.4. Пример определения эффективного фактора сорбционной задержки радионуклида для зоны тектонической (сдвиговой) деформации

В реальных массивах трещиноватых пород часть трещинного пространства представлена линейными зонами сдвиговых (хрупких или пластичных) деформаций (ЗСД), обладающими повышенной проницаемостью. Часто эти зоны являются единственными проводниками подземных вод, связывающих источник загрязнения с защищаемыми объектами. Описание кернового материала скважин и современные методы их исследования позволяют определить протяженность и пространственную ориентацию этих зон, которые в фильтрационных моделях могут рассматриваться в качестве детерминированных структур — в идеальном случае высокой детальности гидрогеологической изученности массива. Между этими зонами трещиноватая порода, подверженная рассеянному тектоническим напряжениям, представлена менее упорядоченными трещинами и трещинными системами, описание которых возможно в рамках геостатистики. Эти «фоновые» трещины, наряду с точками контакта ЗСД между собой, обеспечивают ту или иную степень перколяции (в данном контексте — протекания жидкости) массива в целом.

Центральная часть — ядро ЗСД — представлена продуктами дислокационного метаморфизма: катаклазитами и/или милонитами. Периферийная область ЗСД — вмещающая порода, характеризующаяся повышенным в сравнении с массивом модулем трещиноватости (рис. 15.9). Катаклазиты (от брекчий до глинки трения) относятся к категории пород, не подвергавшимся процессам перекристаллизации, т. е. отсутствуют новые минеральные образования, не характерные для исходного массива (часто — это реликты первичной структуры). Милониты — породы, образующиеся при преобладании пластических деформаций, — характеризуются рекристаллизацией первичной матрицы пород. В некоторых структурах — это тонкодисперсный хорошо литофицированный материал, напоминающее глинистого сланца, в других — он напоминает рассланцованные конгломераты.

Стенки трещин периферийной зоны ЗСД, как правило, имеют следы химического выветривания, так что часть трещинного пространства представляет собой пористые образования, покрывающие поверхность породной матрицы.

Таким образом, горная порода в ЗСД проявляет «дуалистические» свойства. Являясь частью трещиноватой среды, она по свойствам может приближаться к пористым материалам. Это следует из повышенной способности дисперсного материала и выветрелой поверхности трещин сорбировать радионуклиды.

Рассмотрим миграцию радионуклидов в пределах единичной ЗСД, профильное сечение которой представлено двумя характерными литолого-структурными единицами — зонами (рис. 15.9): 1) центральной зоной дезинтеграции исходного трещиноватого массива до состояния дисперсного (пористого) материала (b_2 , b_2) и 2) зоной обрамляющих тектонических трещин (b_1 , b_1). Здесь буквенный символ n отвечает пористости (ин-

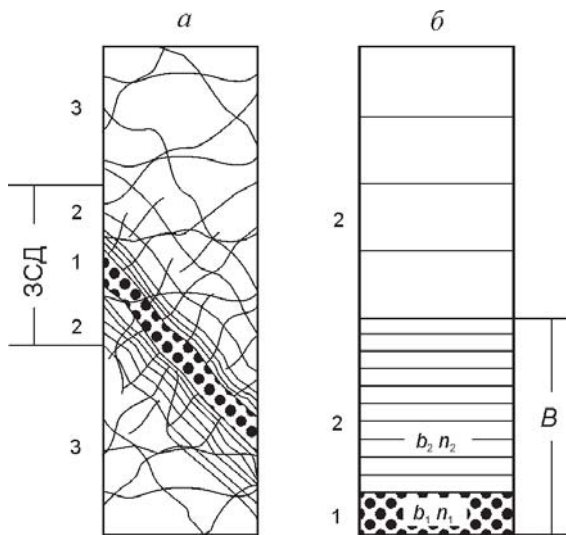


Рис. 15.9. Схематичное представление проницаемого интервала трещиноватых пород, представленного зоной сдвиговой деформации (а) (1 — дисперсное ядро, 2 — зона периферийных трещин, 3 — ненарушенный массив); концепция «двухкомпонентной» модели ЗСД (б).

дексы 2) или трещиноватости (зона 3), а $b_{2,1}$ — мощности, причем $b_1 + b_2 = B$ — интервал тектонического дробления, образовавшийся в результате развития сдвиговых (тектонических) деформаций в скальном трещиноватом массиве (рис. 15.9).

Оценим влияние сорбции в такой «двухкомпонентной» системе на скорость миграции радионуклидов, переносимых подземными водами, полагая, что две выделенные зоны, имея различную проницаемость (коэффициент фильтрации, k_i), гидравлически взаимосвязаны между собой, а их сорбционная емкость определяется сорбцией в пористом материале и на поверхности трещин. При этом решение задачи рассматривается в асимптотической постановке, предполагающей, что ЗСД ведет себя в этом случае подобно квазиоднородной среде с эффективными параметрами (Мироненко, Румынин, 1998): поперечный диффузионно-дисперсионный обмен веществом между двумя зонами с течением времени формируется единый концентрационный фронт, скорость перемещения которого определяется средней скоростью Дарси

$$v = -k_e \nabla H \quad (15.10)$$

и эффективной пористостью/трещиноватостью, n_e , учитывающей в обобщенном виде сорбционные взаимодействия, так что действительная скорость миграции (dx/dt) единого фронта в эквивалентной среде в направлении вектора x средней скорости фильтрации будет

$$\frac{dx}{dt} = u^s = \frac{v}{n_e}. \quad (15.11)$$

Эффективный коэффициент фильтрации, k_e , определяется суммарной проводимостью ЗСД (T):

$$k_e = \frac{T}{\sum b} = \frac{k_1 b_1 + k_2 b_2}{b_1 + b_2}. \quad (15.12)$$

Введем парциальный коэффициент, ξ , определяющий долю дисперсного материала в общем объеме зоны сдвиговой деформации породы

$$\xi = \frac{b_1}{b_1 + b_2}. \quad (15.13)$$

Тогда преобразование формулы (15.12) дает соотношение для эффективного коэффициента фильтрации

$$k_e = (1 - \xi)k_1 + \xi k_2. \quad (15.14)$$

Составим уравнение баланса для единичной трубки тока, ось которой совпадает с направлением x потока подземных вод, а сечение — средняя мощность ЗСД. Пусть за время dt происходит смещение фронта поршневого вытеснения радионуклида, сорбция которого описывается линейной изотермой, на величину dx . Тогда балансовое уравнение для случая нулевой начальной концентрации радионуклида в трещиноватой среде, содержащей и пористый материал, принимает вид:

$$\begin{aligned} QC_0 dt = (b_1 n_1 + b_2 n_2) C_0 dx + \\ + [K_d b_1 (1 - n_1) \rho_b + \omega_f b_2 K_a] C_0 dx, \end{aligned} \quad (15.15)$$

где $Q = vB$ — удельный расход (v — скорость Дарси); K_d и K_a — коэффициенты сорбционного распределения (объемный и поверхностный); ω_f — удельная поверхность трещин; ρ_b — плотность дисперсного материала. Здесь в левой части тождества — масса (активность) радионуклида, поступившего в расчетный элемент через сечение B за время dt . Правая часть тождества — распределение этой массы в объеме среды Bdx , которое складывается: а) из содержания радионуклида в жидкой фазе, заполняющей поры и трещины; б) из массы радионуклидов в твердой фазе (в адсорбированном состоянии) — в пористом материале и на поверхности трещин.

Уравнение (15.15) преобразуется к виду

$$\frac{dx}{dt} = \frac{v}{\xi n_1 R_1 + (1 - \xi) n_2 R_2}, \quad (15.16)$$

определяющему перемещение сорбционного фронта вытеснения во времени, где R_1 и R_2 — факторы сорбционной задержки, традиционно определяемые выражениями

$$R_1 = 1 + K_d(1 - n_1)\rho_b/n_1, \quad R_2 = 1 + \omega_f K_d/n_2 \quad (15.17)$$

и характеризующими сорбцию в порах и на трещинах.

Из сравнения (15.16) и (15.17) видно, что эффективная трещиноватость, n_e , является параметром, «структурно» подобным эффективному коэффициенту фильтрации (15.14):

$$n_e = \xi n_1 R_1 + (1 - \xi) n_2 R_2. \quad (15.18)$$

Наконец, если предположить, что миграция химически инертного (несорбируемого) компонента определяется средневзвешенным значением трещинной пустотности (с учетом поровой компоненты)

$$n_e^{n/s} = \frac{n_1 b_1 + n_2 b_2}{b_1 + b_2}, \quad \text{или} \quad n_e^{n/s} = \xi n_1 + (1 - \xi) n_2, \quad (15.19)$$

то эффективный фактор сорбционной задержки будет определяться выражением:

$$R = \frac{u^{n/s}}{u^s} = \frac{\xi n_1 R_1 + (1 - \xi) n_2 R_2}{\xi n_1 + (1 - \xi) n_2}. \quad (15.20)$$

Дополнительная сорбционная емкость пород, обусловленная сорбцией в пористой матрице тектонически нарушенного (в пределах ЗСД) массива, насыщение которой радионуклидами происходит под влиянием молекулярной диффузии, может быть учтена подобным образом. То же можно сказать и о сорбции в пределах матричного объема, представленного продуктами химического выветривания.

Глава 16

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ, ОБУСЛОВЛИВАЮЩИЕ ПОВЫШЕННУЮ ПОДВИЖНОСТЬ СОРБИРУЮЩИХСЯ РАДИОНУКЛИДОВ В ВОДОНОСНЫХ ГОРИЗОНТАХ

Ряд исследований, появившихся в последнее время, посвящен анализу механизмов, обеспечивающих *быстрый* (со скоростью движения воды) транспорт химических компонентов, традиционно рассматриваемых в гидрогеохимии в качестве хорошо адсорбируемых. Наибольшее внимание привлечено к категории высокотоксичных мигрантов, к которой относятся в первую

очередь радионуклиды. Быстрый транспорт компонентов, помимо структурных особенностей породы (обуславливающих формирование превалирующих путей миграции), может быть обусловлен рядом физико-химических факторов: комплексообразование, адсорбция на коллоидных частицах, формирование ионообменных волн и волн растворения (в растворах с высокой ионной силой), наведенных собственно фильтрационным потоком, присутствием в подземной воде и контактирующей с ней породой кларковых концентраций стабильного изотопа рассматриваемого элемента, а также растворением порообразующих минералов.

16.1. Влияние комплексообразования ионов в растворе

Основные закономерности переноса неконсервативного компонента (под которым будем понимать прежде всего радионуклид), участвующего в образовании растворенных комплексных соединений (см. разд. 4.5.1), вытекают из анализа следующих модельных ситуаций.

Пример 1. Пусть ион металла (радионуклид) M_1 (суммарная моляльная концентрация C_1^T) мигрирует в составе раствора, содержащего лиганд L_2 (суммарная моляльная концентрация C_2^T), а единственной геохимически значимой является комплексная форма M_1L_2 , образующаяся в результате реакции (4.65):



причем далее будем полагать, что L_2 и M_1L_2 — инертные ионы; константа устойчивости комплекса K_{121} . Примером такой химической реакции является реакция взаимодействия иона двухвалентного металла с хлор-ионом:



Очевидно, что сорбционное удаление из раствора иона M_1 приводит к нарушению химического равновесия на фронте поршневого вытеснения. Происходящее при этом разрушение комплекса M_1L_2 способствует восполнению запасов ионов M_1 в растворе, что предопределяет ускорение фронтального их перемещения (по сравнению с соответствующей величиной, определяемой для ионов M_1 в отсутствии комплексообразователя). Поскольку распад комплексов дает дополнительное количество лигандов L_2 (переносимых со скоростью движения частиц воды), то их концентрация за зоной осаждения ионов M_1 возрастает (рис. 16.1).

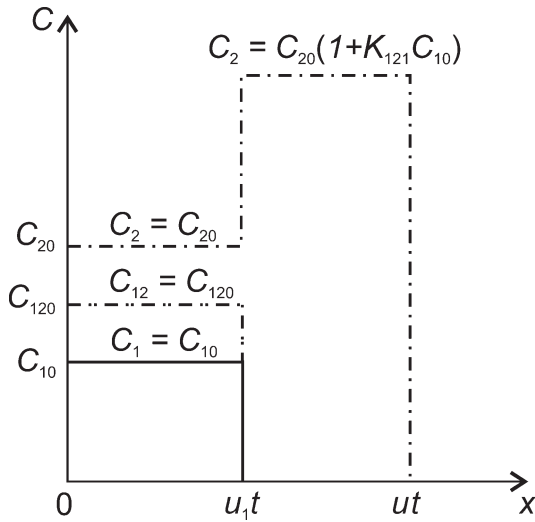


Рис. 16.1. График распределения концентраций ионов металла C_1 , лиганда C_2 и лигандного комплекса C_{12} (C_{10} , C_{20} и C_{120} — граничные концентрации).

Для определения скорости продвижения фронта загрязнения u_1 (модель поршневого вытеснения; рис. 16.1) составим уравнение баланса массы компонента M_1 :

$$vC_{10}^T dt = (nC_{10}^T + N_{10})dl, \quad (16.2)$$

где C_{10}^T — граничная суммарная концентрация (все ионные формы) в растворе; N_{10} — концентрация иона M_1 на породе, отвечающая равновесной концентрации M_1 в растворе. Отсюда находим

$$\frac{dl}{dt} = u_1 = \frac{u}{R}, \quad (16.3)$$

$$R = 1 + \frac{N_{10}}{nC_{10}^T} = 1 + \frac{K_d \rho b}{n(1 + K_{121}C_{20})}, \quad (16.4)$$

где u — действительная скорость фильтрации (скорость миграции частиц воды); R — фактор сорбционной задержки перемещения концентрационного фронта с учетом реакции комплексообразования.

Окончательно для линейной изотермы Генри (4.1) получаем:

$$R = \frac{R_1 + K_{121}C_{20}}{1 + K_{121}C_{20}}, \quad (16.5)$$

где K_{121} — константа устойчивости комплекса M_1L_2 (см. разд. 4.5.1); R_1 — фактор задержки без учета комплексообразования.

К сходному выражению приходим при участии в комплексообразовании нескольких лигандных комплексов $M_1(L_2)_k$ (см. 4.65 при $j = 2$; $k = 1, \dots, k_1$)

$$R = \frac{R_1 + \sum_k K_{12k} C_{20}^k}{1 + \sum_k K_{12k} C_{20}^k}, \quad (16.6)$$

а также любого числа соединений с другими (несорбируемыми) лигандами ($j = 2, 3 \dots$)

$$R = \frac{R_1 + \sum_j \sum_k K_{1jk} C_{j0}^k}{1 + \sum_j \sum_k K_{1jk} C_{j0}^k}. \quad (16.7)$$

Пример 2. Рассмотрим теперь, к каким погрешностям приводят расчеты в рамках модели поршневого вытеснения, пренебрегающей дисперсионными эффектами. Для этого обратимся к численному примеру из гл. 4 (см. разд. 4.5.2.2), где рассматривалась миграция линейно сорбируемого катиона M_1 в присутствии двух лигандов-комплексообразователей L_2 и L_3 . Действительная скорость фильтрации $u = 1.106$ фут/сут, пористость $n = 0.2$. Коэффициенты химических реакций (4.71): $K = \rho_b K_d = 1.1$, $K_{121} = 1.0$. Граничные условия: $C_{10} = 2$, $C_{20} = 1$, $C_{30} = 1$. В соответствии с (4.73) $C_{10}^T = 5$, $C_{20}^T = 2$, $C_{30}^T = 3$. Концентрации компонентов даны в [моль/л]. Расчетное время $t = 3285$ сут (9 лет).

Фактор сорбционной задержки катиона M_1 : $R_1 = 1 + K/n = 6.5$. В присутствии комплексообразователей L_2 и L_3 , в соответствии с (16.7),

$$R = \frac{R_1 + K_{121}C_{20} + K_{131}C_{30}}{1 + K_{121}C_{20} + K_{131}C_{30}} = \frac{6.5 + 1.5}{1 + 1.5} = 3.2.$$

Таким образом, скорость миграции фронта составит $u^s = u/R = 0.346$ фут/сут. За расчетное время t фронт переместится на расстояние 1137 фут. Фронт несорбируемых лигандов — на расстояние 3633 фут.

Полученные координатные точки на оси x (1137 и 3633 фут) близки к модельным расчетам (рис. 16.2) координат положения концентрационных точек $C_{i\max}/2$ на кривых $C(t)$ для компонент M_1 , L_2 и L_3 , где $C_{1\max} = 2$ моль/л (граничная концентрация ионов металла), $C_{2\max} \approx 1.8$ моль/л и $C_{3\max} \approx 2.6$ моль/л (максимальные/пиковые) значения концентраций лигандов.

В то же время видно, что дисперсия может способствовать ускоренному продвижению компонентов в низких концентрациях и занижению концентраций на заднем фронте концентрационных волн.

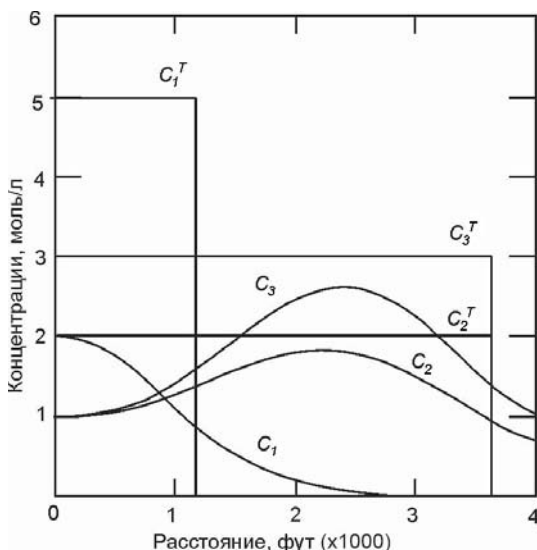


Рис. 16.2. Графики поршневого вытеснения C_i^T (суммарные концентрации компонентов — аналитический расчет) и кривые для ионных концентраций C_i как результат решения задачи численным методом — код SATRA-CHEM (Lewis et al., 1986).

Пример 3. Существуют экспериментальные подтверждения возможности сорбции на породе не только ионов металлов, но и их комплексных соединений, например хлоридных, нитратных соединений, а также гидроксидных ионов, $M_1(\text{OH})^+$ (см. разд. 4.5.1). Допустим, реакция комплексообразования в жидкой фазе протекает по схеме (4.65 при координационном числе $k = 1$, т. е. допускается присоединение к иону металла одного иона-лиганда),



а ее продукты (M_1L_j) равновесно и линейно сорбируются породой — каждый со своим коэффициентом распределения, $K_{1j} = \rho_b K_{d1j}$. Составим балансовое уравнение, подобное (16.2), в виде:

$$vC_1^T dt = (nC_1^T + N_1 + N_{12} + N_{13} + \dots N_{1j}) dl \quad (16.9)$$

(«нулевые» начальные условия); здесь $N_1, N_{12}, N_{13}, N_{1j}$ — концентрации ионов $M_1, M_1L_2, M_1L_3, \dots, M_1L_j$ на породе, причем

$$N_1 = \bar{K}_1 C_1, \quad N_{12} = \bar{K}_{12} C_{12}, \quad N_{13} = \bar{K}_{13} C_{13}, \dots, \\ N_{1j} = \bar{K}_{1j} C_{1j} \quad (16.9a)$$

(для иона гидроксила $N_1^{\text{OH}} = \bar{K}_1^{\text{OH}}[\text{OH}]$). После несложных преобразований приходим к эффективному фактору сорбционной задержки для такой системы:

$$R = \frac{R_1 + \sum_j R_{1j} K_{1j1} C_{j0}^1}{1 + \sum_j K_{1j1} C_{j0}^1}, \quad (16.10)$$

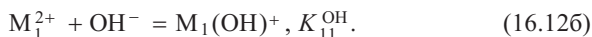
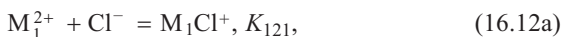
где $R_1 = 1 + \rho_b K_{d1}/n$, $R_{1j} = 1 + \rho_b K_{d1j}/n$ — парциальные коэффициенты (факторы) сорбционной задержки для иона и комплексных частиц. Если сорбируется только ион металла, то $R_{1j} = 1$, то мы приходим к формуле (16.6).

Аналогично можно получить решение задачи и для более общего случая, учитывающего формирование в растворе и сорбцию комплексов с большим координационным числом ($k > 1$):

$$R = \frac{R_1 + \sum_j \sum_k R_{1jk} K_{1jk} C_{j0}^k}{1 + \sum_j \sum_k K_{1jk} C_{j0}^k}. \quad (16.11)$$

Как видно, эффективный параметр R во всех этих случаях определяется константами равновесия сразу нескольких химических реакций. Расчетное значение R всегда ниже значения R_1 , характеризующего миграцию ионной формы компонента, т. е., как уже отмечалось, комплексообразование способствует увеличению потенциала массопереноса неконсервативных компонентов, радионуклидов в частности.

В работе (Тютюнова, 1987) приводятся значения коэффициентов сорбционного распределения K_d хлоридных $M_1\text{Cl}^+$ и гидроксидных $M_1(\text{OH})^+$ комплексов тяжелых металлов (M_1^{2+} : Pb^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Ni^{2+} , Mn^{2+} , Co^{2+} , Pb^{2+} , Cd^{2+} , Fe^{2+}), полученные в опытах на песчаных и супесчаных грунтах. Химические реакции в растворе можно представить в виде



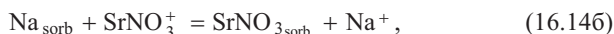
Тогда миграция иона металла контролируется, как следует из (16.10), коэффициентом

$$R = \frac{R_1 + R_{12} K_{121} [\text{Cl}^-]_0 + R_1^{\text{OH}} K_{11}^{\text{OH}} [\text{OH}]_0}{1 + K_{121} [\text{Cl}^-]_0 + K_{11}^{\text{OH}} [\text{OH}]_0}, \quad (16.13)$$

который, как видно, определяется несколькими константами равновесия и зависит от pH раствора; $[\text{Cl}^-]_0$ и $[\text{OH}]_0$ — концентрация хлорида и гидроксил-иона в граничном растворе.

Пример 4. Представленные выше идеалистические модели справедливы для описания линейных сорбционных процессов в пресных водах с весьма низкой ионной силой, когда моляльные концентрации ионов примерно отвечают активностям, а конкуренция за сорбционные позиции между сорбируемыми частицами в минеральном комплексе породы отсутствует. Покажем теперь, каким образом данный подход может получить развитие при описании миграции соленых вод, содержащих радионуклиды, например Sr-90. Данный пример имеет отношение к условиям загрязнения подземных вод в районе оз. Карачай.

Известно, что значимыми для сорбции стронция из раствора нитрата натрия, наряду с ионной формой Sr^{2+} , является комплекс SrNO_3^+ (Миرونенко, 2005). Процесс протекает по ионообменной схеме, предполагающей, что все обменные позиции заполнены натрием:

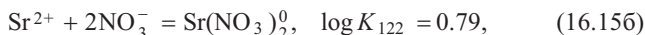


Этим реакциям соответствуют константы равновесия

$$K_1 = \frac{X_{\text{Sr}^{2+}} a_{\text{Na}^+}^2}{a_{\text{Sr}^{2+}}}, \quad K_2 = \frac{X_{\text{SrNO}_3^+} a_{\text{Na}^+}}{a_{\text{SrNO}_3^+}}, \quad (16.14в)$$

где X — концентрации сорбированных катионов, a — активности.

Запишем основные реакции комплексообразования (4.65) в растворе:



Тогда суммарное содержание стронция является суммой моляльностей (m) Sr^{2+} , SrNO_3^+ , $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2^0$, $\text{Sr}(\text{NO}_3)_3^-$ (Миرونенко, 2005):

$$\sum m_{\text{Sr}^{2+}} = m_{\text{Sr}^{2+}} + m_{\text{SrNO}_3^+} + m_{\text{Sr}(\text{NO}_3)_2^0} + m_{\text{Sr}(\text{NO}_3)_3^-} = a_{\text{Sr}^{2+}} A, \quad (16.16)$$

$$A = \left(\frac{1}{\gamma_{\text{Sr}^{2+}}} + \frac{K_{121} a_{\text{NO}_3^-}}{\gamma_{\text{SrNO}_3^+}} + \frac{K_{122} a_{\text{NO}_3^-}^2}{\gamma_{\text{Sr}(\text{NO}_3)_2^0}} + \frac{K_{123} a_{\text{NO}_3^-}^3}{\gamma_{\text{Sr}(\text{NO}_3)_3^-}} \right),$$

γ — коэффициенты активности ионов и ионных комплексов. Суммарный коэффициент распределения (в безразмерной форме):

$$\begin{aligned} \rho_b K_d &= \frac{X_{\text{Sr}^{2+}} + X_{\text{SrNO}_3^+}}{\sum m_{\text{Sr}^{2+}}} = \frac{1}{A} \left[\frac{K_1}{a_{\text{Na}^+}^2} + K_2 K_{121} \frac{a_{\text{NO}_3^-}}{a_{\text{Na}^+}} \right] \approx \\ &\approx \frac{1}{A} \left[\frac{K_1}{a_{\text{Na}^+}^2} + K_2 K_{121} \right]. \end{aligned} \quad (16.17)$$

Отсюда, как легко показать, следует, что сорбционная задержка $R = 1 + \rho_b K_d / n$ является величиной, определяемой как константами равновесий, так и активностью ионов натрия в растворе, т. е. $R = R(a_{\text{Na}^+})$. Высокие содержания ионов натрия делают Sr-90 весьма подвижным в растворе, что отмечалось в экспериментах и при проведении мониторинга радиоактивного загрязнения подземных вод (см. разд. 15.2 и 16.4.3).

Таким образом, на ряде примеров мы убедились, что независимые термодинамические оценки форм существования комплексов в подземных водах являются необходимым элементом анализа миграционных процессов. Полученные результаты указывают на значительные колебания эффективной емкости пород (расчетных значений фактора сорбционной задержки) — в зависимости от состава, минерализации и рН-Eh техногенных растворов. Однако ясно, что обособленное рассмотрение гидродинамической и гидрогеохимической частей миграционной задачи оказывается допустимым лишь для ограниченного круга задач, главным образом для предварительных экспертных оценок. Современные вычислительные коды, учитывающие широкий спектр физико-химических взаимодействий и преобразований, позволяют решать самые разнообразные задачи многокомпонентного переноса, связанные, в частности, с прогнозированием радиоактивного загрязнения подземных вод.

16.2. Коллоидный транспорт радионуклидов в водоносных горизонтах

Начиная с середины 80-х гг. прошлого века появилось исключительно большое число публикаций, обобщающих разноплановые исследования влияния коллоидов на миграционную способность загрязняющих растворенных веществ, в первую очередь радионуклидов. Основное внимание уделяется анализу физико-химических процессов, приводящих к формированию так называемых *псевдоколлоидов* — подвижных форм, представленных минеральным или органическим носителем и адсорбированным на его поверхности компонентом-загрязнителем. О данной форме массопереноса в подземных водах и пойдет речь в последующих разделах книги. Полученные результаты свидетельствуют, как правило, о том, что коллоиды играют роль активных транспортеров (носителей) загрязнений, традиционно относящихся к классу хорошо сорбируемых, обеспечивая их перенос со скоростями, близкими к скоростям движения частиц

воды. Таким образом, проявление данного механизма повышает опасность загрязнения подземных вод. Менее определенной является роль *истинных коллоидов* — полимерных образований, формируемых в растворах самими растворенными компонентами.

Значимость коллоидного транспорта возрастает в условиях: 1) присутствия в источнике загрязнения весьма токсичных веществ (компонентов) с низкими ПДК (например, актиноидов), так что перенос этих веществ в водоносных горизонтах в ультранизких концентрациях оказывается значимым с позиций воздействия на радиоэкологическое состояние вод; 2) достаточной мобильности коллоидных частиц; 3) образования сильных физико-химических связей между коллоидами и растворенным веществом (при низких скоростях кинетики десорбции). В связи с последним возникает довольно парадоксальная ситуация (характерная, например, для растворов, содержащих актиноиды): чем выше адсорбционные показатели, тем больше потенциальная опасность масштабного загрязнения водоносных горизонтов и тем менее благоприятными оказываются оценки воздействия на подземные воды.

Проблема коллоидного транспорта имеет несколько аспектов: 1) природа (происхождение) коллоидных частиц, их состав и свойства; 2) миграционная способность коллоидных частиц; 3) формирование химических связей, обеспечивающих удержание коллоидами компонентов на своей поверхности; 4) миграция растворов, содержащих коллоиды, в различных типах коллекторов подземных вод с учетом возможных изменений физико-химической обстановки в пространстве и во времени.

16.2.1. Общие представления о коллоидах и их генезисе

К коллоидам относятся частицы с диаметром, изменяющимся от 1 до 1000 нм. Коллоиды представляют собой диспергированную фазу между раствором, в котором растворенные частицы имеют размер порядка ангстрем, и частицами более 1 мкм, способными к физической адсорбции и осаждению за счет гравитационных сил. Иными словами, они представляют собой «третью фазу», которая является и не жидкой, и не твердой. Появление большинства коллоидов связывается с химическим выветриванием пород при их взаимодействии с подземной водой, а также с присутствием растворенного органического вещества.

Химический состав, структура и размер коллоидов могут изменяться в широком диапазоне значений в зависимости от гидро-геохимических условий в подземных водах.

Коллоиды могут иметь: 1) естественное происхождение, т. е. присутствовать в подземных водах в «фоновых» концентрациях как результат природных процессов физико-химического выветривания пород (in situ мобилизационные процессы — основной источник коллоидов); 2) искусственное происхождение, обусловленное а) деструкцией цементного (глинистого) материала — инженерных барьеров, изолирующих хранилища радиоактивных отходов от геологической среды и биосферы, б) генерацией коллоидов за счет взаимодействия мигрирующих растворов с горной породой, в) генерацией в жидкой фазе при ее пересыщении какой-либо растворимой солью.

Наиболее характерными представителями *природных коллоидов* являются высокомолекулярные органические соединения (кислоты), алюмосиликаты, окислы и гидроокислы железа и алюминия, метастабильные феррогидраты. Коллоиды могут формироваться окислами и гидроокислами актиноидов, такими как U, Np и Am. Существуют и «биоколлоиды», представленные микроорганизмами (бактериями и вирусами) — также потенциальными носителями загрязняющих компонентов.

В пресных подземных водах средние концентрации коллоидов, как правило, < 1 мг/л, хотя встречаются природные растворы с содержанием коллоидных частиц до десятков миллиграмм на литр. Число коллоидных частиц на литр меняется в диапазоне от 10^8 до 10^{17} (Kim, 1990). Средний диапазон изменения содержаний коллоидов в пресных подземных водах 0.5—10 мг/л.

Повышенные концентрации коллоидов характерны для водоносных горизонтов с повышенным содержанием растворенных органических веществ. Действительно, природные коллоидные системы часто ассоциируются с присутствующим в подземной воде растворенным органическим веществом (РОВ), концентрация которого измеряется в мг С/л. Суммарная концентрация РОВ в водах неглубоких водоносных горизонтов обычно не превышает первых десятков данной размерности. Преобладающие размеры органических коллоидов 1—2 нм. Увеличение содержания растворенных солей может приводить к агрегированию органических коллоидов, и их размер увеличивается до $N \cdot 10$ — $N \cdot 100$ нм.

РОВ — это смесь различных органических молекул с молекулярным весом от 200 до $> 10^5$ г/моль. Структура и состав каж-

дой из органических компонент смеси меняются в широком диапазоне. Поэтому ясно, что при одинаковой суммарной концентрации РОВ свойства природных растворов с точки зрения их участия в физико-химических взаимодействиях могут быть различными.

Искусственные (техногенные) коллоиды появляются в подземных водах при разрушении цементных материалов, предназначенных для изоляции подземных хранилищ РАО. Обычно это — бентониты.

Выщелачивание цементных гидратов, предназначенных для изоляции РАО, коррозия материалов контейнеров, предназначенных для хранения РАО, также способствует появлению в подземных водах коллоидов главным образом Fe(II/III) состава.

Активное коллоидообразование протекает при вытеснении из породы пресной воды рассолами. Как следствие миграционного процесса, коллоиды могут формироваться, когда загрязненные подземные воды с пониженным редокс-потенциалом смешиваются и взаимодействуют с кислородсодержащими водами. Так, например, это имеет место при окислении двухвалентного железа, приводящего к формированию железистых оксигидроксидов — диспергированных коллоидов. Смена гидрохимической обстановки в горизонте от окислительной к восстановительной обычно приводит к растворению железистых оксигидроксидов, входящих в цементный материал пористой матрицы. Этот материал разрушается, и дополнительное количество глинистых частиц попадает в поровую воду, что увеличивает подвижность мигрирующего растворенного вещества (например, радионуклидов).

16.2.2. Скорость миграции коллоидов и их аккумуляция в фильтрующих средах

В пористой (трещиноватой) среде коллоиды способны мигрировать со скоростью, приближающейся к максимально возможной скорости движения частиц воды. Это происходит за счет *эффекта исключения*, который проявляется в том, что коллоиды движутся по более прямолинейным траекториям по сравнению с растворителем (водой) и частицами растворенного вещества (формируются превалирующие пути миграции). Молекулы и ионы, способные проникать в мелкие поры (трещины) и застойные зоны, куда не проникают коллоидные частицы из-за

их размеров, движутся с меньшей скоростью. Таким образом, коллоиды достигают расчетной точки быстрее, чем растворенное вещество.

Пренебрегая кинетикой осаждения коллоидов в поровом (трещинном) пространстве, запишем равновесную реакцию в форме сорбционного уравнения:

$$A_2 + \overline{S_R} = \overline{A_2 S_R}, \overline{K_2}, \quad (16.18)$$

где A_2 и $\overline{S_R}$ символизируют коллоид и активные центры породы, способные аккумулировать коллоиды; $\overline{A_2 S_R}$ — коллоид в адсорбированном состоянии.

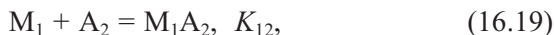
16.2.3. Адсорбция компонентов на коллоидах (статические представления)

Из-за весьма малого своего размера коллоиды имеют очень высокую поверхностную энергию и большую удельную (на единицу массы) площадь поверхности. Высокая поверхностная энергия обуславливает повышенную активность коллоидов в адсорбционных процессах, обеспечивающих концентрирование на их поверхности ионов из окружающего раствора. Иными словами, количество адсорбционных площадей на коллоидах на единицу массы гораздо выше по сравнению с аналогичной характеристикой пористой матрицы. Аккумулируя вещество на своей поверхности, коллоиды способны переносить его на большие расстояния.

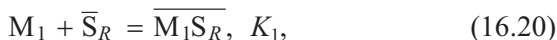
Для описания адсорбционного взаимодействия коллоидных частиц и растворенных веществ в присутствии пористой матрицы могут использоваться элементы физико-химической термодинамики и кинетики. Наибольшее распространение получили модели кинетической сорбции, позволяющие учесть степень обратимости процесса, контролирующей возможность «сброса» коллоидной частицей ранее адсорбированных компонентов при изменении физико-химического состояния системы (Luhmann et al., 1998; Van de Weerd et al., 1998). С анализом особенностей протекания реакций в кинетической области можно ознакомиться, например, в работе (Румынин, 2011). В ней, в частности, рассматриваются эффекты «быстрого» транспорта радионуклидов, связанные с гистерезисом сорбции на коллоидах.

Рассмотрим далее равновесное состояние системы, характеризующееся равновесными константами K_m :

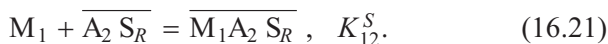
1) сорбция растворенного компонента (M_1) коллоидной частицей (A_2), приводящая к образованию подвижного соединения M_1A_2 :



2) сорбция компонента (M_1) на минеральной фазе $\overline{S_R}$, приводящая к образованию неподвижной формы M_1S_R :



3) сорбция компонента (M_1) на осажденных коллоидах ($A_2 S_R$):



В соответствии с законом действующих масс реакциям (16.19)—(16.21) соответствуют следующие изотермические уравнения, связывающие концентрации компонента, находящегося в различных фазах:

$$C_{12} = \overline{K}_{12} C_1 C_2, \quad (16.22)$$

$$S_1 = \overline{K}_1 C_1, \quad (16.23)$$

$$S_{12} = \overline{K}_{12}^S \overline{K}_2 C_1 C_2, \quad (16.24)$$

Эти равновесия должны рассматриваться совместно с реакцией (16.18) осаждения (адсорбции) коллоидных частиц:

$$S_2 = \overline{K}_2 C_2; \quad (16.25)$$

здесь приняты следующие обозначения для действующих концентраций: C_1 и C_2 — концентрации компонента и коллоида в жидкой фазе $[ML^{-3}]$; S_1 и S_2 — то же на минеральном скелете (породе) $[ML^{-3}]$; C_{12} — концентрация компонента на коллоидах $[ML^{-3}]$; \overline{K}_{12} , \overline{K}_1 , \overline{K}_{12}^S , \overline{K}_2 — коэффициенты равновесия в реакциях (16.22)—(16.24) и (16.18).

16.2.4. Влияние сорбции радионуклидов на коллоидах на конвективный перенос

Процесс одномерной (без дисперсии) миграции радионуклида M_1 в присутствии коллоидных частиц A_2 может быть описан уравнением

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(nC_1^T + S_1^T \right) + v \frac{\partial C_1^T}{\partial x} = 0, \quad (16.26)$$

где для суммарных концентраций справедливы выражения:

$$C_1^T = C_1 + C_{12}, \quad (16.276)$$

$$S_1^T = S_1 + S_{12}. \quad (16.27a)$$

При линейной адсорбции, с учетом (16.22)—(16.24),

$$C_1^T = C_1(1 + \bar{K}_{12}C_2), \quad (16.28a)$$

$$S_1^T = C_1(\bar{K}_1 + \bar{K}_2\bar{K}_{12}^S C_2). \quad (16.286)$$

В равновесной линейной постановке перенос и взаимодействие коллоидов с минеральным скелетом породы получает обобщение

$$(n + \bar{K}_2) \frac{\partial C_2}{\partial t} + v \frac{\partial C_2}{\partial x} = 0. \quad (16.29)$$

Упрощенные оценки могут быть получены, если полагать, что в пределах зоны загрязнения концентрация коллоидов остается постоянной ($C_2 = C_{20} = \text{const}$). В этом случае

$$S_1^T = \frac{\bar{K}_1 + \bar{K}_2\bar{K}_{12}^S C_{20}}{1 + \bar{K}_{12}C_{20}} C_1^T \quad (16.30)$$

и уравнение (16.26) преобразуется к виду

$$R \frac{\partial C_1^T}{\partial t} + u \frac{\partial C_1^T}{\partial x} = 0, \quad (16.31)$$

где фактор сорбционной задержки определяется зависимостью

$$R = 1 + \frac{\bar{K}_1 + \bar{K}_2\bar{K}_{12}^S C_{20}}{n(1 + \bar{K}_{12}C_{20})}. \quad (16.32)$$

Если адсорбция коллоидов отсутствует ($\bar{K}_2 = 0$), то

$$R = 1 + \frac{\bar{K}_1}{(1 + \bar{K}_{12} C_{20})} \equiv 1 + \frac{K_d \rho_b}{n(1 + K_d^c C_{20})}, \quad (16.33)$$

откуда хорошо видно, что присутствие коллоидов, уменьшая величину эффективной пористости по сравнению с предельным случаем ($R = 1 + \bar{K}_1/n$), увеличивает потенциал массопереноса. Если коэффициенты сорбционного распределения радионуклида, сорбирующегося на активных и пассивных (осажденных) коллоидах, одинаковы ($\bar{K}_{12} = \bar{K}_{12}^S$), а также равны коэффициенты \bar{K}_1 и \bar{K}_2 ($\bar{K}_1 = \bar{K}_2 = \bar{K}$), то величина $R = 1 + \bar{K}_1/n$ (случай отсутствия коллоидов в растворе).

Физически понятно, что при движении раствора в гомогенной пористой (трещиноватой) среде вынос частиц M_1A_2 за границу фронта сорбции ионов M_1 приводит к нарушению равновесия и распаду соединения M_1A_2 (коллоид теряет ион). Образовавшаяся порция ионов M_1 идет на насыщение сорбционной емкости породы, что вынуждает единый фронт двигаться с повышенной скоростью, зависящей от устойчивости соединения M_1A_2 и концентрации в растворе формирующих его частиц.

Оценим характер распределения вещества в коллоидной системе, считая адсорбцию коллоидов на минеральной фазе незначительной ($\bar{K}_2 = 0$). Нетрудно заметить, что процесс адсорбции радионуклида на коллоидах и минеральном скелете контролируется двумя «весовыми» коэффициентами адсорбционного распределения — $K_d^c \equiv \bar{K}_{12}$ и $K_d \equiv \bar{K}_1/\rho_b$ (ρ_b — плотность породы), определяемыми независимо в лабораторных условиях. Коэффициенты K_d^c и K_d могут быть нормированы относительно эффективной площади (A , см²/г) двух рассматриваемых фаз — коллоидной A_c и породной A_R :

$$K_d^c = K_a^c A_c \quad \text{и} \quad K_d = K_a A_R, \quad (16.34)$$

где K_a [см] — коэффициент поверхностной адсорбции.

При равенстве коэффициентов K_d^c и K_a получаем:

$$K_d^c = F K_d, \quad (16.35)$$

где $F = A^c/A_R$ — коэффициент «адсорбционного усиления» (Vilks et al., 1998).

Из соотношения (16.33), переписанного в форме

$$R = 1 + \frac{K_d \rho_b}{n(1 + K_d F C_2)}, \quad (16.36)$$

в частности, видно, что коллоидный транспорт становится значимым процессом при $K_d F C_2 > 0.2—0.5$. Величина $K_d F C_2$ может достигать $N \cdot 10^4 \text{ см}^3/\text{г}$ (Vilks, Dequelare, 1991), т. е. коллоидный перенос играет заметную роль в транспорте радионуклидов лишь при довольно высоких содержаниях коллоидных частиц в подземных водах ($C_2 > 10 \text{ мг/л}$).

Исследования способности к миграции некоторых радионуклидов (Am(III), Np(V), Pu(IV), Th(IV) и U(VI)) применительно к гидрогеохимическим условиям водоносных горизонтов в районе хранилища Юкка Маунтин (Yucca Mountain, USA) позволили получить достаточно устойчивое значение $F = 590$ (Contardi et al., 2001). Очевидно, что введение «фактора» F в расчетную схему справедливо только в том случае, когда источником коллоидов являются процессы природного химического выветривания коллектора, в котором мигрируют растворы.

Для оценки степени участия коллоидов в удержании вещества в растворе можно воспользоваться формулой:

$$\frac{C_{12}}{C_1^T} = \frac{\bar{K}_{12} C_2}{1 + \bar{K}_{12} C_2} \equiv \frac{F K_d C_2}{1 + F K_d C_2}. \quad (16.37)$$

Например, при $F = 500$, $K_d = 1000 \text{ см}^3/\text{г}$ и $C_2 = 1 \text{ мг/л} = 10^{-6} \text{ г/см}^3$ получаем $C_{12}/C_1^T = 0.33$, т. е. 1/3 компонентов удерживается в растворе за счет коллоидных комплексов.

16.3. Пример определения коллоидных форм миграции радионуклидов на полигоне захоронения РАО Сибирского химического комбината

Адсорбция радионуклидов изучалась в лабораторных условиях посредством мембранной фильтрации модельных радиоактивных растворов, содержащих глинистые частицы, а также подземных вод, отобранных из наблюдательных скважин на полигоне глубинного захоронения РАО Сибирского химического комбината (Захарова и др., 2007). В течение длительного времени на этом полигоне жидкие радиоактивные отходы по нагнетательным скважинам инжестируются в глубинные проницаемые водонасыщенные песчано-глинистые пласты-коллекторы, изолированные от выше- и нижележащих горизонтов глинистыми водоупорами (Рыбальченко и др., 1994). Проявление высоких поглощающих свойств песчано-глинистых пород, которые дополнительно возрастают в результате техногенных преобразований в процессе эксплуатации полигона (Зубков и др., 2007; Румынин, 2011), обеспечивает высокую эффективность самоочищения подземных вод. В результате уровень активности в межпоровом пространстве пород снижается на несколько по-

рядков уже на небольшом отдалении от нагнетательной скважины и не превышает единиц Беккерелей в литре, уменьшаясь по мере удаления от нагнетательной скважины до десятых и сотых долей Беккереля. Такая тенденция проявляется для различных по химическим свойствам радионуклидов и, что очень важно, для наиболее экологически опасных трансурановых элементов. До сих пор, однако, оставалась не ясной роль коллоидного переноса этих элементов, которые формируют ореолы загрязнения подземных вод, характеризующихся ультранизкими значениями концентраций. В настоящем разделе приводятся результаты исследования модельных растворов и проб подземных вод, направленные на оценку способности некоторых актинидов к формированию истинных коллоидов и псевдоколлоидных форм.

16.3.1. Изучение адсорбции плутония на коллоидах из модельных растворов

В экспериментах исследована адсорбция плутония Pu(IV) на глинистых частицах (размером 0.001 мм) из модельных растворов. Глинистая составляющая выделена из образца породы проницаемой зоны пласта-коллектора, отобранного при бурении скважины на полигоне захоронения жидких РАО СХК (рис. 16.3).

Минералогический состав и количественное содержание глинистых минералов определены с помощью рентгенофазового анализа. Фракция < 0.001 мм представлена в основном каолинитом и хлоритами (87.1—91.7 %); иллит (6.4—9.3 %) и монтмориллонит (1.8—2.2 %) встречаются в подчиненных количествах. В реальных условиях глинистые частицы такого размера находятся в межпоровом пространстве пород. Их образование может являться результатом техногенного воздействия.

Предварительно проведена мембранная микро- и ультрафильтрация растворов, содержащих только глинистые частицы (фракция < 0.001 мм). Количество частиц разного размера, задерживаемых мембранами с различным диаметром пор (Φ_i), определялось весовым методом. Это позволило оценить значения концентраций глинистых частиц. В частности, полученные значения показывают, что содержание частиц глины с размером более 400 нм составляет 65—70 %.

Модельные растворы содержат азотнокислый натрий (50 мг/л), характеризуются двумя диапазонами рН (6.4—6.9 и 4.6—5.0) и имеют исходные концентрации плутония (в Бк/л): 10^6 , 10^5 и 10^4 . Количество нитрата натрия соответствует его содержанию в техногенных подземных водах. Диапазон концентраций плутония позволяет оценить его поведение в зависимости от содержания в растворе и выбран с учетом максимального сокращения времени проведения радиоспектрометрических измерений.

При проведении мембранной фильтрации растворов, не содержащих глинистой составляющей, установлено снижение суммарной активности

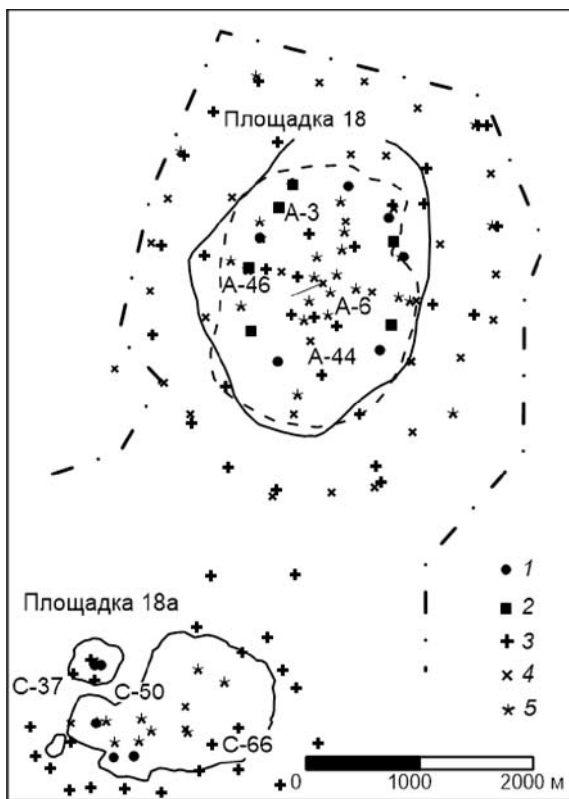


Рис. 16.3. Схема расположения скважин в пределах участков глубинного захоронения РАО.

1 и 2 — нагнетательные скважины на II и III горизонты; 3, 4 и 5 — наблюдательные скважины на II, III и IV горизонты (номерами отмечены скважины, из которых проводился отбор проб для изучения коллоидного транспорта радионуклидов). Сплошные линии оконтуривают область, занятую техногенными растворами во II горизонте; пунктирные линии — то же в III горизонте (данные по состоянию на 2004 г.). Штрих-пунктирный контур — условная граница полигона.

Ри после каждого из i -х фильтрационных шагов, что свидетельствует о присутствии в растворах его истинных коллоидов, также представленных несколькими фракциями. При этом выявляются некоторые общие для всех изученных концентраций закономерности: количество крупных частиц (> 400 нм) в среднем составляет $40 \pm 5\%$, а мелких (< 5 нм) — $15 \pm 5\%$. В то же время не обнаружено влияния рН в исследованном интервале на распределение частиц плутония.

При проведении фильтрации радиоактивных растворов, содержащих 15 и 30 мг/л глинистых частиц (< 0.001 мм), установлено, что концентра-

ция плутония в пробах после фильтрации отличается от значений, определенных на тех же шагах в опытах с растворами, не содержащими глинистых частиц. Это свидетельствует о сорбции плутония на таких частицах. В системах, содержащих 15 мг/л глинистой фракции, значительно увеличивается количество *частиц-носителей* Pu, имеющих размер более 400 нм, и уменьшается концентрация такого рода частиц, имеющих размеры менее 100 нм. Такая закономерность наблюдается для всех изученных концентраций плутония и для обоих интервалов pH. Можно предположить, что поскольку содержание частиц глины с характерным размером менее 100 нм незначительно, то весь плутоний с размером частиц менее 100 нм находится, вероятно, в виде собственных коллоидов.

Обработка опытных результатов (Румынин, 2011) позволила получить численные значения коэффициента сорбционного распределения для трех различных минерально-коллоидных фракций: $(0.3—4.7) \cdot 10^5 \text{ см}^3/\text{г}$ — при использовании растворов с $\text{pH} = 6.4—6.9$ и $(0.4—14) \cdot 10^5 \text{ см}^3/\text{г}$ — при использовании растворов с $\text{pH} = 4.6—5.0$. Полученные парциальные значения K_d отвечают известным представлениям о сорбируемости Pu(IV) на глинистых минералах.

16.3.2. Изучение коллоидных форм миграции радионуклидов на участке загрязнения природных вод

В качестве исходной информации использовались результаты мембранной фильтрации проб подземных вод, отобранных из скв. А-3, А-6, А-44 и А-46 в пределах зоны влияния закачки низко активных отходов (НАО, площадка 18), а также проб из скважин (№ С-66, С-50 и С-37) в пределах зоны влияния захоронения среднеактивных отходов (САО, площадка 18а) (рис. 16.3). В первом случае использовалась четырехшаговая фильтрация (мембраны $\Phi_i = 450, 200, 50$ и 5 нм), а во втором — трехшаговая экспериментальная схема (мембраны с диаметром пор 400, 50 и 5 нм). Перечень радионуклидов представлен в табл. 16.1.

После прохождения пробы воды через одну из мембран происходит задержка коллоидной фракции, включающей частицы с диаметром, большим чем диаметр пор данной мембраны. В отличие от ранее рассмотренных опытов с искусственно приготовленными радиоактивными растворами, влиянием процесса формирования истинных коллоидов здесь можно пренебречь ввиду низких концентраций радионуклидов в природных водах.

Анализ полученных данных позволяет сделать следующие выводы: 1) среди актинидов наибольшей сорбционной способностью в данной системе обладает уран, среднее значение коэффициента сорбционного распределения около $3 \cdot 10^6 \text{ см}^3/\text{г}$; 2) плутоний нептуний и америций характеризуются более низкими значениями коэффициента сорбционного распределения $(0.4—1.0) \cdot 10^6 \text{ см}^3/\text{г}$; 3) отмечается некоторая общая тенденция роста интенсивности адсорбции на более мелких частичках; 4) стронций сорбируется менее интенсивно. Процентное содержание ра-

Таблица 16.1

Содержание радионуклидов, мигрирующих в коллоидной форме

Инъекция низкоактивных отходов								
№ скв.	U		Np		Pu		Am	
	%	Бк/л	%	Бк/л	%	Бк/л	%	Бк/л
A-46	99.9	0.98	96.4	0.034	89.5	0.519	83.0	0.274
A-44	89.1	0.012	77.5	0.078	69.6	0.181	77.6	0.0038
A-3	87.3	0.0043	77.5	0.039	55.3	0.021	76.8	0.0169
A-6	89.3	0.0074	86.3	0.087	89.6	0.0206	89.7	0.085

Инъекция среднеактивных отходов								
	U		Eu		La		⁹⁰ Sr	
	%	Бк/л	%	Бк/л	%	Бк/л	%	Бк/л
C-66	91.6	0.575	89.6	$6.5 \cdot 10^{-4}$	72.7	56	25.2	25.5
C-50	77.1	0.023	н/д		н/д		46.6	27.0
C-37	84.5	0.046	73.9	$6.5 \cdot 10^{-4}$	н/д		72.4	1.6

Примечание. н/д — нет данных.

дионуклидов, мигрирующих в коллоидной форме, за исключением ⁹⁰Sr, в большинстве случаев превышает 70—80 % общего их количества в пробах воды (табл. 16.1).

16.4. Быстрый транспорт радионуклидов в составе нитратных рассолов (участок радиоактивного загрязнения подземных вод «оз. Карачай», Челябинская область)

В настоящей работе уже отмечалось, что высокая ионная сила радиоактивного раствора, обусловленная повышенным содержанием водорастворимых солей-электролитов, создает предпосылки для подавления сорбции радионуклидов на минеральной фазе породы, способствуя их активной миграции в водоносных толщах. Характерным примером может служить миграция радиоактивных растворов в зоне влияния накопителя жидких РАО «оз. Карачай» на предприятии по производству радиоактивных материалов для военных и гражданских нужд «Маяк» (Челябинская область). Здесь мы остановимся главным образом на анализе физико-химических преобразований, сопровождаю-

щих транспорт радионуклидов, имея в виду, что гидродинамика потока переменной плотности рассматривалась в предшествующих публикациях (Водоем-9... 2007; Румынин, 2011).

16.4.1. Общие представления об условиях радиоактивного загрязнения подземных вод

Озеро Карачай (бывшее бессточное верховое болото) начиная с ноября 1951 г. являлось местом сброса жидких промышленных отходов (относящихся к категории среднеактивных) с высоким содержанием нитратных солей (рис. 16.4). Площадь поверхности водоема в разные годы менялась от 36 до 52 га при глубине 2—3 м. К 2004 г. в оз. Карачай было сброшено по разным оценкам от 4 до 5 млн м³ жидких РАО с суммарной активностью около 550 млн Ки (Иванов, 2004). Соответствующая оценка на 1995 г. — 3.5 млн м³ (Drozhko et al., 1997; Солодов и др., 2005). Общая активность растворов, профильтровавшихся в подземные воды, оценивается значением около 600 тыс. Ки. В 1986 г. начались реабилитационные работы — заполнение озера полыми цементными блоками, предназначенными вобрать в себя радиоактивные осадки и уменьшить опасность ветрового разноса радиоактивной пыли в период осушения озера. К 2004 г. площадь зеркала водоема сократилась примерно до 11 га при объеме заполняющих его стоков около 400 тыс. м³ (Иванов, 2004). В настоящее время источник загрязнения как поверхностный технический водоем прекратил свое существование, что, однако, лишь снизило остроту проблемы, но не способствовало пока ее полному решению, поскольку значительные объемы жидких РАО по-прежнему находятся в подземной гидросфере.

Утечки радиоактивных отходов из водоема (превращенного, по сути, в поверхностное хранилище жидких РАО) привели к формированию обширного ореола загрязнения подземных вод (рис. 16.4 и 16.5), приуроченных к породам вулканогенно-осадочного происхождения. Радиоактивные растворы сконцентрированы в верхней зоне пород коры выветривания, представленных преимущественно лавами и туфолавами андезито-базальтовых порфиритов среднего силура и нижнего девона (S₂—D₁). Данные породы относятся к низкощелочным и умеренным по щелочности разновидностям пород основного состава.

Пути фильтрации подземных природных и техногенных вод связаны с трещинами экзогенного и тектонического происхож-

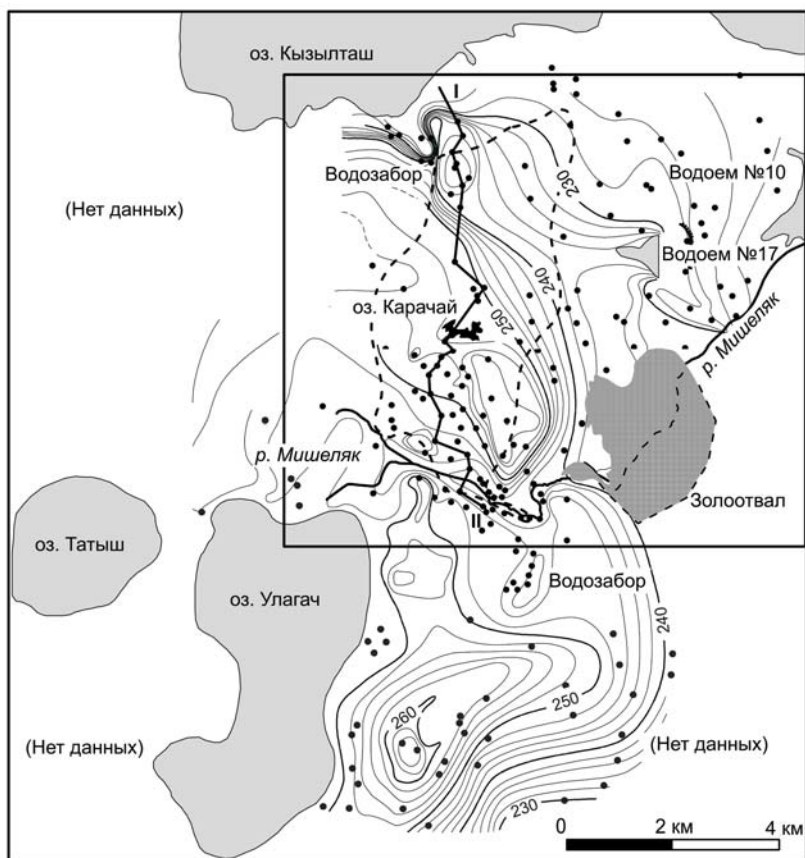
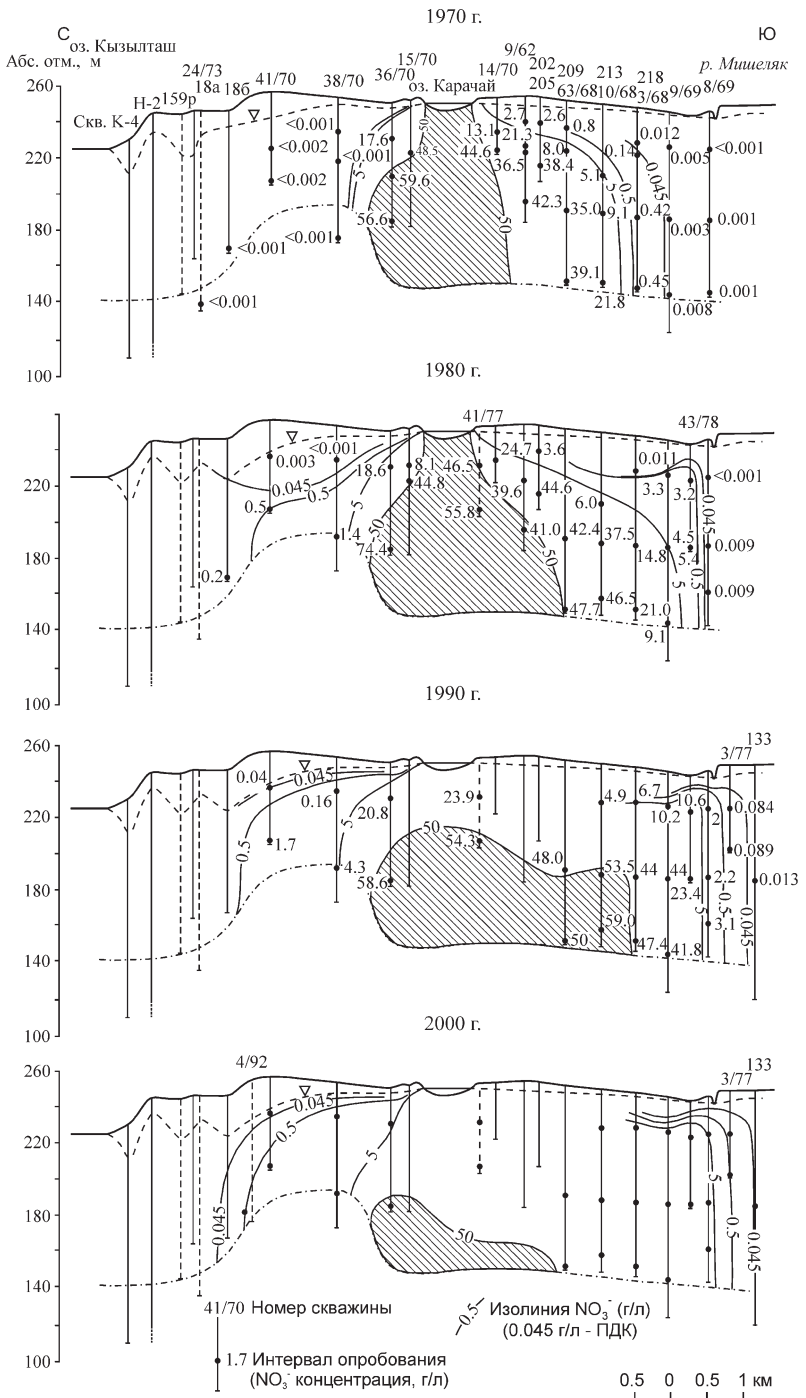


Рис. 16.4. Региональная гидрогеологическая схема.

Точки — наблюдательные скважины; сплошные линии — гидроизогипсы (м, август 1994 г.) (Дрожко и др., 1995); штрихами околнурена область загрязнения по нитратам (45 мг/л, 1994 г.). I—II — линия разреза (рис. 16.5).

дения, причем последние (линейные зоны тектонитов в области разрывных нарушений) формируют пути преобладающей фильтрации вод (Солодов и др., 2005).

Основной поток загрязненных вод из бассейна, находящегося в пределах водораздельной области междуречья рек Течи и Зюзелги, попадает в безнапорный горизонт, представленный туфогенно-осадочными породами разной степени выветрелости (см. рис. 16.4). Проницаемость водоносных отложений формируется за счет экзогенной и тектонической трещиноватости.



Главная вертикальная система трещин совпадает с основным направлением тектонических структур в районе Урала — север—юг. Системы тектонической трещиноватости дополняются трещинами выветривания, что делает, по крайней мере на локальном уровне, водовмещающую среду хаотически трещиноватой до глубины порядка 100 м.

В пределах изучаемой территории опытные геофильтрационные опробования скважин проводились в течение всего периода эксплуатации объекта; различными организациями выполнено более 300 опробований. В целом пространственная изменчивость проводимости T обводненного массива весьма высокая. Параметр T меняется в среднем от > 1 до 800 м²/сут. На рассматриваемой площади с максимальной частотой встречаются блоки пород, проводимость которых находится в диапазоне 20—500 м²/сут. Дисперсия логарифма проводимости по данным откачек очень высокая (Поздняков, 1996). Трещиноватость затухает с глубиной по экспоненциальному закону, меняясь от 1.5—2 % в верхней части разреза до 0.1—0.4 % на глубинах свыше 50 м. Принято считать, что на глубинах порядка 100 м толща становится практически непроницаемой, и только в зонах тектонических нарушений проницаемые зоны могут встречаться на больших глубинах (Солодов и др., 2005).

Молекулярная диффузия контролирует обмен веществом между трещинами и пористой матрицей. Его интенсивность характеризуется коэффициентом эффективной диффузии D_m , имеющим порядок 10⁻⁸ м²/сут (Белкин, Петров, 1993; Румынин, 2011) при пористости блоков, оцененной весовым методом, порядка 0.15—0.5 % (среднее значение 0.3 %).

16.4.2. Структура потока загрязненных вод

Наблюдения за ореолом (см. рис. 16.4—16.7) позволяют сделать вывод о достижении передовым фронтом соленых растворов ближайших к водоему контуров естественного (долина р. Мишеляк) и техногенного (водозаборы технического назначения вблизи Течинского каскада) дренирования подземных вод. Имеющие место сорбционные взаимодействия обуславливают отставание фронта загрязнения по радиоактивным компонентам. Наибольшую опасность представляет поток некондиционных вод

Рис. 16.5. Динамика солевого загрязнения подземных вод по данным о распределении нитратов в разрезе в период 1970—1990 гг. (Samsonova, Drozhko, 1996 г. с дополнениями) и в 2000 г. (Водоем-9... 2007).

в южном направлении — в сторону долины р. Мишеляк, поскольку под угрозой загрязнения оказываются чистая речная вода и пойменные отложения.

Вследствие особенностей технологии, использовавшейся в 1950—1960-е гг., отходы, сбрасывавшиеся в оз. Карачай, содержали большие количества солей. Это привело к тому, что к началу 1970-х гг. суммарная концентрация солей (C_s) в водоеме достигала 100—145 г/л, в том числе нитрат-ионов (доминирующий компонент) — 69—78 г/л. Этим значениям отвечала плотность раствора 1.06—1.095 г/см³. В 1971 г. в связи с изменением технологии переработки ядерного топлива началось уменьшение содержания солей в сбрасываемых жидких отходах. В конце 1990-х гг. содержание неорганических солей в озере не превышает 20 г/л, плотность раствора 1.01—1.02 г/см³. Накапливаемые растворы являются щелочными: рН = 7.9—9.3.

В ореоле загрязнения выделяется интрузия, представленная высокоплотными растворами (рис. 16.5). Она располагается асимметрично относительно бассейна: ее южная граница в средней плоскости горизонта смещена на 1.5—2.0 км в сторону долины р. Мишеляк, северная граница находится вблизи береговой линии бассейна. Миграция рассолов сопровождается такими процессами, как плотностная (под влиянием разности плотности техногенных и природных вод) и естественная (под влиянием градиентов естественного фильтрационного поля — на периферии ореола) конвекция в трещинах, продольная и поперечная гидродисперсия, молекулярная диффузия во внутриблочном пространстве.

Скорость миграции нитрат-иона оценивается значениями от 80 до 100 м/год (Drozhko, Glagolenko, 1997), радионуклиды мигрируют с заметно более низкими скоростями. Предпочтительное направление движения загрязненных вод находится в противоречии с характером карты гидродинамических напоров (рис. 16.4): вблизи озера максимальные градиенты гидравлического напора наблюдаются на востоке от озера, в то время как загрязненные растворы движутся, как отмечено, преимущественно в южном и северном направлениях. Несоответствие плановой структуры ореола гидродинамической сетке движения подземных вод свидетельствует о наличии в массиве структурных элементов, управляющих растеканием рассолов в нижней, относительно менее проницаемой, части водоносного комплекса, но сравнительно слабо влияющих на гидродинамику регионального потока. Данное обстоятельство обуславливает высокую степень неопределенности при прогнозировании поведения ореола рассолов в трещиноватом массиве (Румынин, 2011).

16.4.3. Основные гидрогеохимические процессы

Главными компонентами-индикаторами, по которым до середины 1990-х гг. оценивалась интенсивность процессов загрязнения подземных вод, наряду с нитрат-ионом (рис. 16.6, *а*) являлись: тритий, стронций-90, рутений-106, кобальт-60 (рис. 16.6, *б*), а также ацетат-ион. По данным опробования скважин в 1993—1994 гг., концентрации таких радионукли-

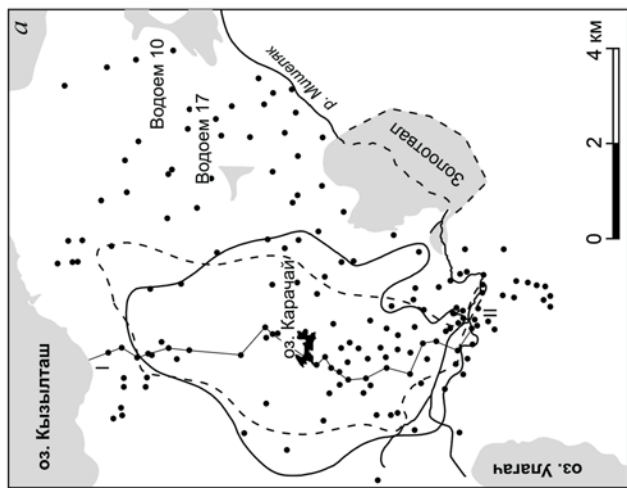
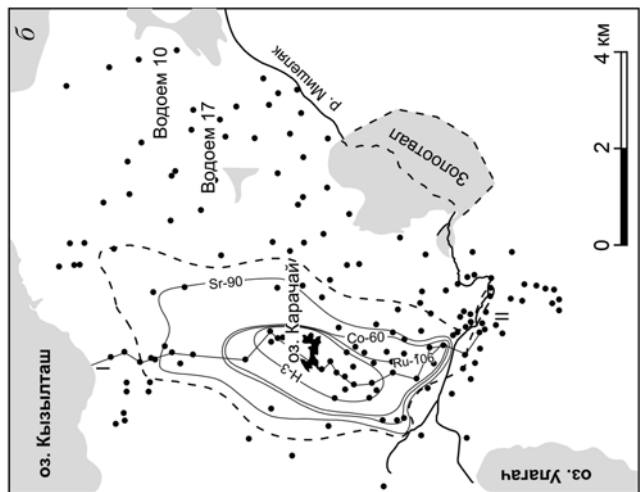


Рис. 16.6. Характер загрязнения подземных вод в районе оз. Карачай (Иванов и др., 2005).

a — динамика развития солевого (нитратного) загрязнения подземных вод (*штрихи* — положение изолинии концентрации $\text{NO}_3^- = 45$ мг/л по состоянию на 1994 г.; *сплошная линия* — то же на 2005 г.); *б* — ореол загрязнения подземных вод радионуклидами (*изолинии* концентраций — содержание радионуклидов, регламентированном УВ/НРБ-99). *Точки* — наблюдаемые скважины, I—II — линия разреза.

Таблица 16.2

Концентрация радионуклидов (Бк/л) в загрязненных подземных водах южной ветви потока (рис. 16.4) по данным опробования 1994—1995 гг. (Новиков и др., 1998)

	В-9	Номер скважины						
		41/77	63/68	64/68	65/68	3/68	8/69	176
Расстояние, м	0	50	1100	1460	1770	1900	2400	2500
Глубина, м	0	45	20	100	100	100	80	27
Cs-137	4×10^6	14×10^4	490	290	80	Н. о.	Н. о.	Н. о.
Sr-90	9.5×10^6	78×10^4	31×10^4	18×10^4	57×10^4	1×10^5	90	1400
Co-60	Н. о.	15×10^3	3300	1300	890	5300	14	118

Примечание. В-9 — оз. Карачай, Н. о. — не опробован.

дов, как Sr-90, Cs-137, Co-60, Ru-106, вблизи бассейна многократно (до трех-пяти порядков) превышали допустимые значения (табл. 16.2). В 2001—2003 гг. был выполнен дополнительный комплекс работ мониторингового характера, позволивший детализировать миграционный процесс, выделив дополнительные «маркеры» радиоактивного загрязнения подземных вод, такие как уран и трансурановые (актиниды) элементы (рис. 16.7). В 2007 г. впервые получены данные (Ровный и др., 2007) о наличии значимых концентраций технеция (Tc-99) в подземных водах района расположения промышленных водоемов (рис. 16.7).

Радиогеохимические исследования были направлены на изучение распределения урана и актинидов в различных средах: жидкой фазе техногенных вод, накапливаемых в бассейне, в донных осадках в его основании, в подземных водах, а также в породах, их вмещающих.

Результаты данного комплексного исследования и их сопоставление с данными ранее выполненных опробований показали (Дрожко и др., 2003; Иванов и др., 2005; Алексахин, 2007; Водоем-9... 2007), что объемная активность суммы альфа-излучающих нуклидов в воде водоема была всегда примерно на четыре порядка ниже удельной бета-активности. Концентрация U колебалась от 7 до 215 мл/л (объемная альфа-активность $2.7 \cdot 10^3$ — $6.3 \cdot 10^5$ Бк/л). Среди актинидов преобладают америций (Am-241) и кюрий (Cm-244), причем основная часть актинидов (60—90 %) в жидкой фазе связана с взвешенными частицами; вклад адсорбции Sr-90 и Cs-137 на взвешенных частицах не превысил 3—5 %. Лабораторные опыты показали весьма низкую степень десорбируемости радионуклидов из техногенных илов. Несмотря на это, при многолетней фильтрации воды через илы значительная часть этих радионуклидов попадает в водоносный горизонт.

Повышенной миграционной способностью обладает Tc-99, который находится в подземных водах в подвижной анионной форме TcO_4^- .

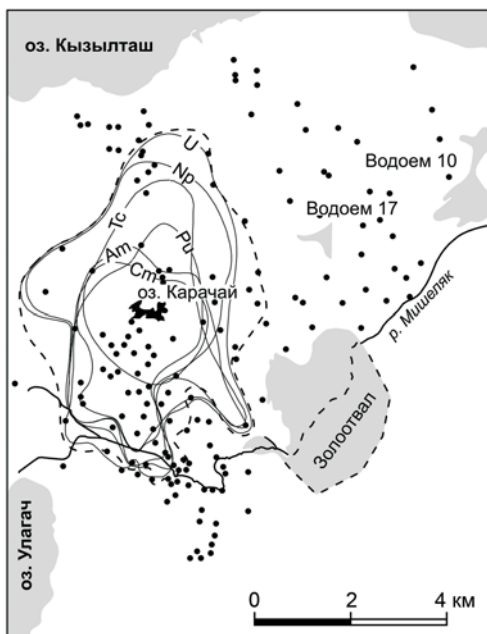


Рис. 16.7. Схема распространения урана, актинидов и технеция (в плоскости максимальных концентраций) в подземных водах по результатам опробования 2001—2007 гг. (Иванов, 2004; Иванов и др., 2005; Ровный и др., 2007).

Ореолы оконтурены по концентрациям, отвечающим значениям уровня вмешательства (по НРБ-99): U — 75 мг/л; Np-237 — 1.3; Pu-239,240 — 0.56; Am-241 — 0.69; Cm-244 — 1.2; Tc-99 — 220 Бк/л.

В целом анализ полученных данных позволяет сделать следующие выводы.

1) Донные отложения бассейна являются своего рода мощным сорбционным барьером для актинидов на пути их поступления в водоносный горизонт.

2) В свою очередь изотопы урана относительно слабо задерживаются этими отложениями.

3) В результате уран попадает в подземные воды практически в исходных концентрациях (десятки миллиграммов на литр), определяя (на 90 % и более) уровень их альфа-активности.

4) Техногенный уран формирует в подземных водах весьма контрастный ореол, его максимальные концентрации превышают в сотни раз значение УВ по НРБ-99; эти концентрации связаны с областью неразбавленных растворов в нижних зонах

разреза и соответствуют ретроспективным концентрациям урана в оз. Карачай; доминирующими ионными формами являются $UO_2(CO_3)_2^{2-}$ (вблизи источника загрязнения) и $UO_2(CO_3)_3^{4-}$ (на удалении от источника загрязнения) (Novikov et al., 2006).

5) Среденные (по данным 40—45-летних наблюдений за загрязнением подземных вод) скорости миграции изотопов урана, Np-237, Am-241 и Sr-90 в южном и северном направлениях, которые могут быть оценены по соответствующим смещениям изолиний концентраций, отвечающим значениям УВ (по НРБ-99), приближаются к скоростям миграции нитрат-иона (50—60 м/год). Несколько ниже (в среднем 30—50 м/год) скорости миграции Cs-137, Cm-244 и Pu-239,240; по мере приближения к зонам потенциальной разгрузки в речную сеть скорости смещения рассматриваемых изолиний в данных направлениях уменьшается, не превышая 15—20 м/год (по данным на 2003—2005 гг.).

6) Передовой фронт загрязнения по ряду радионуклидов и нитрат-иону достиг долины р. Мишеляк.

7) Дополнительные термодинамические расчеты и лабораторные исследования (ультрафильтрация через мембранные фильтры) позволили установить, что повышенная подвижность в подземных водах урана и нептуния обусловлена частичным нахождением этих радионуклидов в составе отрицательно заряженных и нейтральных анионных (слабосорбируемых породой) комплексов, а плутония и америция — также адсорбцией на высокомолекулярных коллоидных (главным образом неорганических) частицах. Коллоидные формы плутония были выявлены в количестве, достигающем до 70—90 % валовой его концентрации в подземной воде (Новиков и др., 1998; Novikov et al., 2006); уран (в виде уранила) и большинство актиноидов (за исключением нептуния) формируют в рассматриваемых условиях устойчивые карбонатные комплексы.

8) Установлена достаточно тесная линейная связь концентраций урана, актиноидов (Pu-239,240 и Np-237) и Tc-99 с содержанием в подземной воде нитрат-иона; наличие такой связи служит дополнительным подтверждением повышенной миграционной способности данных радионуклидов, поведение которых в подземных водах как и инертного нитрат-иона контролируется в большей степени конвективно-гидродисперсионными механизмами, нежели межфазовыми взаимодействиями.

Главный вывод цитируемых здесь результатов заключается в том, что актиноиды и изотопы U, находясь в высокоподвижных

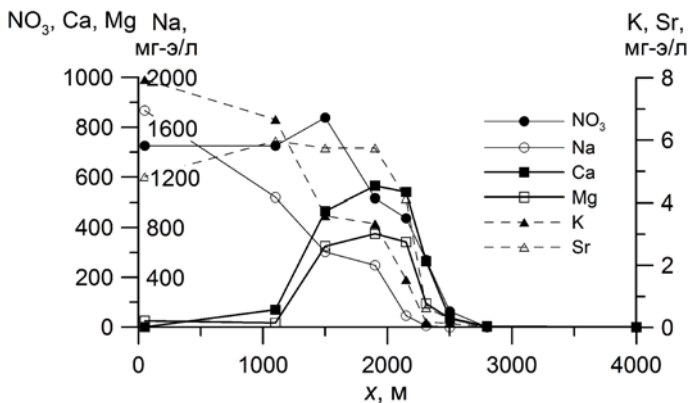


Рис. 16.8. Изменение состава загрязненных вод (основные катионы и нитрат-ион). Данные опробования скважин, расположенных по профилю «оз. Карачай—р. Мишеляк», в сентябре 1993 г. (Солодов и др., 2005).

миграционных формах, создают потенциальную угрозу качеству природных вод региона.

В целом миграция радиоактивных растворов на рассматриваемом участке сопровождается разнообразными гидрогеохимическими внутрифазовыми и межфазовыми взаимодействиями.

Внутрипластовое движение высокоминерализованных растворов приводит к выщелачиванию из пород щелочноземельных элементов, калия и стабильного стронция (рис. 16.8). Концентрации этих элементов в загрязненных водах, в передовой зоне «волны выщелачивания», достигает аномально высоких значений (мг/л): Ca — до 10 800, Mg — 4500, Sr — 260 и K — 310. Данные значения многократно (до трех десятичных порядков) превышают концентрации этих компонентов в исходных техногенных растворах и природных подземных водах. Подобная направленность процессов должна наблюдаться и в результате реакции ионного обмена, когда натрий, доминирующий в составе техногенного раствора, вытесняет из обменного комплекса породы катионы Ca, Mg, Sr и K. Подтверждение тому — заметное отставание концентрационной волны натрия от передового фронта концентрационных волн Ca, Mg и нитрат-иона (рис. 16.8). Накопление в мигрирующем растворе в высоких концентрациях катионов щелочноземельных металлов препятствует адсорбции Sr-90. Этим объясняются относительно высокие скорости миграции данного радионуклида.

Детальный количественный анализ упомянутых выше гидрогеохимических процессов выходит за рамки настоящей работы. Здесь лишь подчеркнем, что эти процессы оказываются во многом «спровоцированными» гидродинамикой фильтрационного процесса, особенности моделирования которого были рассмотрены ранее (Водоем-9... 2007; Румынин, 2011).

16.5. Влияние на сорбируемость радионуклидов конкурирующих ионов — продуктов растворения минеральной фазы породы

Данный эффект наблюдался в лабораторных экспериментах в процессе изучения сорбции Sr-90 и Cs-137 на глинистых песках, отобранных на полигоне глубинного захоронения жидких РАО на Сибирском химическом комбинате (см. разд. 16.3). Эксперименты выполнялись в условиях, приближенных к природным: при повышенной температуре ($T = 70\text{ }^{\circ}\text{C}$) и давлении, отвечающем глубине залегания горизонта-коллектора (3 Мпа). Нагрев пласта обусловлен распадом короткоживущих изотопов, присутствующих в составе РАО. Кинетические кривые $C = f(t)$, полученные на сорбционной стадии опытов, имеют четко выраженный немонотонный характер (рис. 16.9). В течение первых суток с момента начала опытов наблюдается падение концентрации радионуклидов в растворе NaNO_3 . Затем, однако, данная тенденция меняется на противоположную: отмечается закономерный рост содержания радионуклидов в растворе.

Особенно рельефно данный эффект проявляется для Sr-90, содержание которого за время сорбционного эксперимента (14 сут) достигает исходных значений (рис. 16.9, $a—e$). Это значит, что к концу сорбционного эксперимента Sr-90, в первые моменты поглощенный породой в весьма существенных количествах, полностью десорбировался в раствор (концентрация почти точно отвечает исходному значению), так что порода «очистилась» от загрязнения (расчетный коэффициент адсорбционного распределения равен нулю). Выход из породы Cs-137 после его активного сорбционного поглощения также вполне ощутим: он достигает 15—20 % первоначально (в первые сутки) сорбированного количества (рис. 16.9, $z—e$).

Экспериментально установленный феномен может быть объяснен, если принять во внимание, что адсорбционное равновесие контролируется кинетикой процессов растворения (или преобразования/трансформации) минералов в твердой фазе,

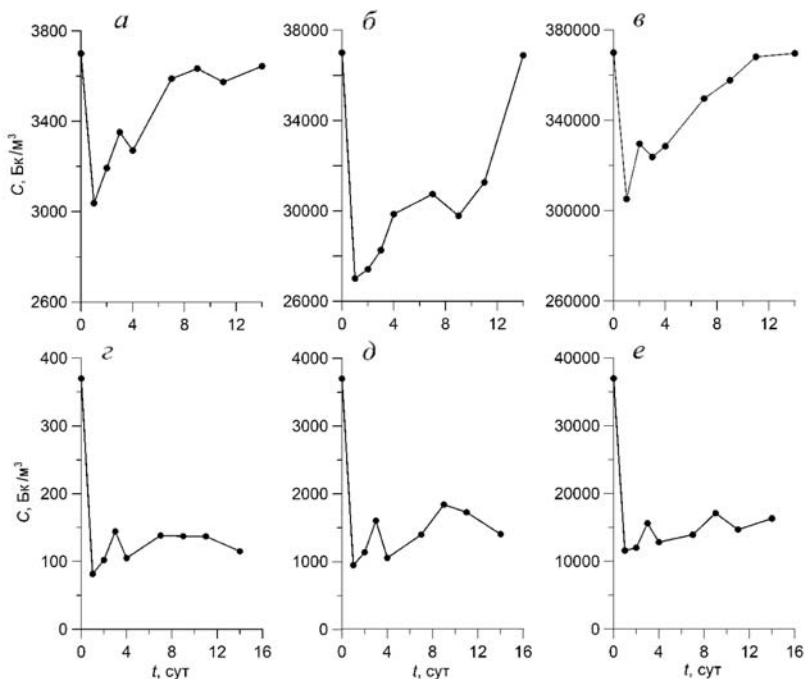


Рис. 16.9. Кинетические кривые сорбции радионуклидов.

a, б, в — сорбция Sr-90: *a* — $C_i = 3700$, *б* — $37\,000$, *в* — $370\,000$ Бк·см⁻³; *г, д, е* — сорбция Cs-137: *г* — $C_i = 370$, *д* — 3700 , *е* — $37\,000$ Бк·см⁻³. C_i — начальная активность.

скорость которого возрастает с ростом температуры. При этом степень насыщения раствора компонентами растворяющегося вещества также возрастает с увеличением температуры. Если иметь в виду карбонатную систему, то контролирующим параметром следует считать парциальное давление в растворе углекислого газа, которое увеличивается с ростом внешнего давления (напомним, что раствор находился в контакте с воздушной фазой). Действительно, сорбция (десорбция) — достаточно быстрый процесс в сравнении с другими кинетически выраженными гетерогенными реакциями. Поэтому можно предположить, что в случае с Sr-90 в первые моменты времени происходит активное сорбционное поглощение породой этого радионуклида при довольно низких концентрациях в растворе конкурирующих (потенциалзадающих) двухвалентных катионов (прежде всего ионов кальция). Далее, однако, происходит активное растворение карбонатов, так что концентрация катионов постепен-

но увеличивается, что приводит к вытеснению из обменного комплекса породы Sr-90 (рис. 16.9, *a—e*). При этом необходимо иметь в виду, что степень насыщения раствора ионами кальция пропорциональна содержанию (парциальному давлению) углекислого газа, растворимость которого возрастает с ростом давления. Поэтому при высоких давлениях концентрация ионов кальция может достигать столь значимых величин, что практически весь Sr-90 оказывается вытесненным из породы.

При повышенной температуре и давлении кислый раствор NaNO_3 может также растворять и некоторые силикатные минералы, например гидрослюда. В этом случае раствор должен постепенно обогащаться ионами калия, конкурирующими с Cs-137 за обменные позиции на породе. Поэтому можно предположить, что накопление ионов калия приводит к наблюдаемому в опыте частичному высвобождению ранее адсорбированного Cs-137 (рис. 16.9, *z—e*).

Таким образом, экспериментально был установлен важный для последующих миграционных построений факт: повышение температуры и давления в системе, при которых происходит трансформация минеральной фазы породы, ведет к ее насыщению компонентами, концентрации которых столь велики, что происходит существенное подавление адсорбционного процесса. Так, Sr-90, оказавшись в этих условиях, начинает вести себя подобно химически инертному компоненту, т. е. скорость его внутрипластовой миграции многократно возрастает в сравнении с условиями изотермической миграции при нормальных условиях.

В целом проведенный в настоящей главе анализ показывает, что в системах с высоким содержанием неорганических солей подвижность радионуклидов, традиционно относящихся к категории хорошо сорбируемых, становится весьма высокой, что резко повышает опасность радиационного воздействия на окружающую среду. Прогнозирование поведения радионуклидов в составе концентрированных солевых растворов относится к задаче повышенной сложности, решение которой предполагает комплексацию гидродинамических и физико-химических методов численного моделирования.

Глава 17

ОПЫТ ИЗУЧЕНИЯ ГЛИНИСТЫХ ТОЛЩ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАССИВОВ КАК ГЕОЛОГИЧЕСКИХ СРЕД ДЛЯ ОКОНЧАТЕЛЬНОЙ ИЗОЛЯЦИИ РАО

17.1. О новой концепции обращения с РАО, зарубежный и отечественный опыт обращения с РАО на современном этапе

Большие экономические затраты и рост экологических рисков, связанных с хранением «исторических» РАО и их накоплением в современных ядерно-технологических и энергетических производствах, послужили основанием для принятия в 2011 г. новой концепции обращения с РАО, оформленной в виде федерального закона. Согласно этой концепции должен осуществиться переход от хранения РАО к их захоронению — окончательной изоляции. Для средне- и низко активных отходов 3 и 4 классов в большинстве случаев экономически выгодным является строительство пунктов захоронения (ПЗРО) приповерхностного типа. Для отходов высокой и средней активности (1 и 2 классы) наиболее перспективным и безопасным в настоящее время считается создание пунктов окончательной изоляции РАО в глинистых и кристаллических породах, залегающих на относительно больших глубинах от поверхности, что согласуется с общемировым трендом.

Так, национальные исследовательские программы обращения с радиоактивными отходами Бельгии, Франции и Швейцарии ориентированы во многом на изучение комплексов глинистых пород (Rupelian Boom Clay, Callovo-Oxfordian clayey siltstone/silty clay и Opalinus Clay), в которых планируется создание хранилищ РАО (табл. 17.1). Как видно, глинистые формации представлены уплотненными или переуплотненными (до аргиллитов) глинами, в которых перспективными для захоронения являются интервалы глубин в несколько сотен метров. Эти интервалы вскрыты подземными горными выработками, в которых созданы подземные исследовательские лаборатории (ПИЛ) (Arnould, 2006; Bock et al., 2006; Delay et al., 2014). В табл. 17.1 представлена также общая геологическая информация о вендских (котлинских) глинах, широко распространенных на Северо-Западе РФ. Их комплексное изучение выполнялось в период 2007—2014 гг. с использованием буровых скважин.

Таблица 17.1


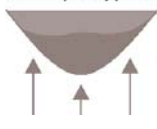



Геологическая характеристика участков захоронения РАО и ПИЛ в глинистых формациях

Страна	Бельгия	Франция	Швейцария	Россия*
Название формации	Boom Clay (BC)	Callovo—Oxfordian (COx)	Opalinus Clay, Mont Terri (OPA)	Котлинские глины (Vkt)
Расположение	NRC Mol/Dessel	Meuse/Haute-Marne	Western Switzerland	Сосновый Бор, Северо-Запад РФ
Тип РАО	CAO, BAO, HAO	BAO	BAO, HAO	HAO, CAO
Глубина, м	> 200	450—500	400—800	70—100
Концепция: ПИЛ (URL), скважины	URL HADES, с 1984 г. (-223 м)	URL Bure, с 2004 г. (-490 м)	URL Mont Terri с 1996 г.	Скважины, с 2007 г.
Возраст, млн лет	29—33	152—158	180	530—650
Геологический период	Нижний олигоцен (Rupelian)	Средний келловей—нижний оксфорд	Нижний и средний аален	Венд
Литологическое описание	Уплотненные серые глины	Уплотненные аргиллиты	Переуплотненные глины, аргиллиты	Глины, аргиллиты

* Стадия ОБИН, выполнение проекта отложено.

Таблица 17.2

**Геологическая характеристика участков захоронения РАО и ПИЛ
в кристаллических массивах**

Участок/ лаборатория	Вмещающая порода	Возраст пород	Глубина, м	Назначе- ние участка	Гидродина- мическая зона
Forsmark, Швеция	Метаморфизо- ванные биоти- товые граниты	1.8—1.9 млрд лет	500	ВАО, ОЯТ	зона разгрузки 
Äspö, Швеция	Гранитоиды, мелкокристал- лические грани- ты	1.6—1.7 млрд лет	200—460	только ПИЛ	зона разгрузки 
Olkiluoto, Финляндия	Мигматизиро- ванные гнейсы, пегматитовые граниты	1.8—1.9 млрд лет	450	ПИЛ, ВАО, ОЯТ	зона разгрузки 
Grimsel Test Site, Швейцария	Граниты, секу- щиеся дайками аплитов и лам- профиров	300 млн лет	450	только ПИЛ	зона питания 
Участок «Енисей- ский», Россия	Гнейсы, секу- щиеся дайками долеритов	1.8—2.5 млрд лет	400—500	ПИЛ, ВАО, САО	зона питания 

Наиболее значимые результаты достигнуты при изучении кристаллических гранитогнейсовых массивов на территории Швеции (Stripa Mine, Äspö Hard Rock Laboratory), Финляндии (Olkiluoto Research Tunnel) и Швейцарии (Grimsel Test Site), где, так же как и в упомянутых выше глинистых толщах, на участках предполагаемого размещения объектов долговременной изоляции РАО и ОЯТ созданы ПИЛ (табл. 17.2) (СКВ, 2006; POSIVA, 2010; Delay et al., 2014; СКВ, 2017). Эти объекты размещены в основном вблизи зоны разгрузки подземных вод в морские акватории. Основные защитные функции в этом случае

выполняют инженерные барьеры, а горная порода — лишь среда размещения; разбавление загрязняющих веществ в объеме морских вод служит дополнительной гарантией экологической безопасности.

В качестве российского аналога западноевропейских проектов, связанных с использованием подземного пространства, может рассматриваться проект создания пункта глубинного захоронения РАО (ПГЗРО) в Нижнеканском гнейсовом массиве (Красноярский край, табл. 17.2). Размещение объекта на водораздельном участке дает определенное преимущество в связи с тем, что наряду с инженерным барьером защитную функцию, сдерживающую загрязнение, будет выполнять породный массив, о чем будет сказано далее.

Одним из ключевых направлений при создании такого рода объектов является обоснование их долговременной безопасности (ОДБ), которая во многом определяется геомиграционными процессами в подземной гидросфере. Поэтому построению гидрогеологических моделей в мировой практике уделяется особое внимание. В свою очередь, надежность модельных прогнозов определяется полнотой и качеством исходной информации: структурой фильтрационного потока, распределением в пространстве и характером тектонических нарушений сплошности массива, фильтрационными и миграционными (по отношению к радиоактивным растворам и газовой фазе) свойствами пород и др.

Реализация концепции обращения с РАО, принятая в РФ в 2011 г., учитывает современные тенденции более того, можно говорить об определенных успехах, достигнутых в плане изучения глинистых и кристаллических формаций, а также в развитии и апробации теоретических и экспериментальных подходов для ОДБ такого рода инженерных объектов. Данный вывод вытекает из анализа опыта изыскательских, проектных и научно-исследовательских работ в Северо-Западном регионе РФ, где широко распространены вендские и кембрийские глины, а также в Красноярском крае, на юге которого обнажаются архейские и протерозойские гранитогнейсовые породы.

17.2. ПЗРО в вендских глинах (Сосновоборский район Ленинградской области)

На северо-западе Русской платформы широкое распространение имеют глинистые породы высокой степени литификации. К ним относятся котлинские глины (V_2kt) вендской системы, со-

гласно перекрывающиеся синими нижнекембрийские глинами ($\epsilon_1 \ln$). Глины картируются вблизи поверхности в пределах полосы к югу от Финского залива и на Карельском перешейке, а также в районе Санкт-Петербурга и его окрестностях. В частности, глины служат основанием таких инженерных объектов, как ЛАЭС и ЛАЭС-2, а также поверхностного хранилища ТРО РосРАО в районе г. Сосновый Бор (рис. 17.1).

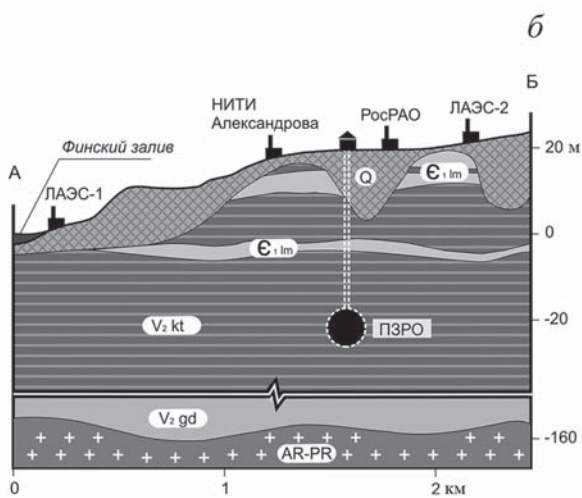
На предпроектной стадии при обосновании возможности строительства приповерхностного (до 100 м) ПЗРО в этом районе, в процессе изыскательских работ изучались свойства пород, которые можно условно подразделить на две группы: 1) свойства, определяющие геотехнические условия строительства и эксплуатации хранилища; 2) свойства, контролирующие безопасность хранилища с точки зрения радиационного воздействия на подземные воды и сопредельные среды. Основной объем информации был получен в ходе бурения глубоких (до 180 м) скважин (рис. 17.1, *а*). Дополнительно проводились геофизические исследования, направленные, в частности, для выделения погребенных доли (рис. 17.1, *б*). Большой объем исследований выполнен в лабораторных условиях.

17.2.1. Водно-физические и физико-механические свойства

Анализ результатов лабораторного исследования керна позволил установить четкую закономерность в пространственном распределении физических и механических свойств изучаемой глинистой толщи (Румынин, Никуленков, 2012). Как следует из графиков на рис. 17.2, *а*, верхняя зона (I) разреза (до глубин 40—50 м) представлена относительно влажными и разуплотненными породами. Нижняя зона (II) представлена более плотными и менее влажными породами.

Анализ данных стабилOMETрических испытаний выявил явную тенденцию увеличения крепости пород с глубиной (рис. 17.2, *б*). С глубиной меняются также деформационные свойства пород. Так, рост модуля общей деформации (рис. 17.2, *в*) говорит о снижении степени сжимаемости пород на больших глубинах (зона II) по сравнению с приповерхностной зоной (I). Эти данные подтверждают ранее выявленные тенденции (Дашко, 2006).

Выявленная пространственная изменчивость параметров позволила выбрать оптимальные глубины заложения подземных горных выработок.



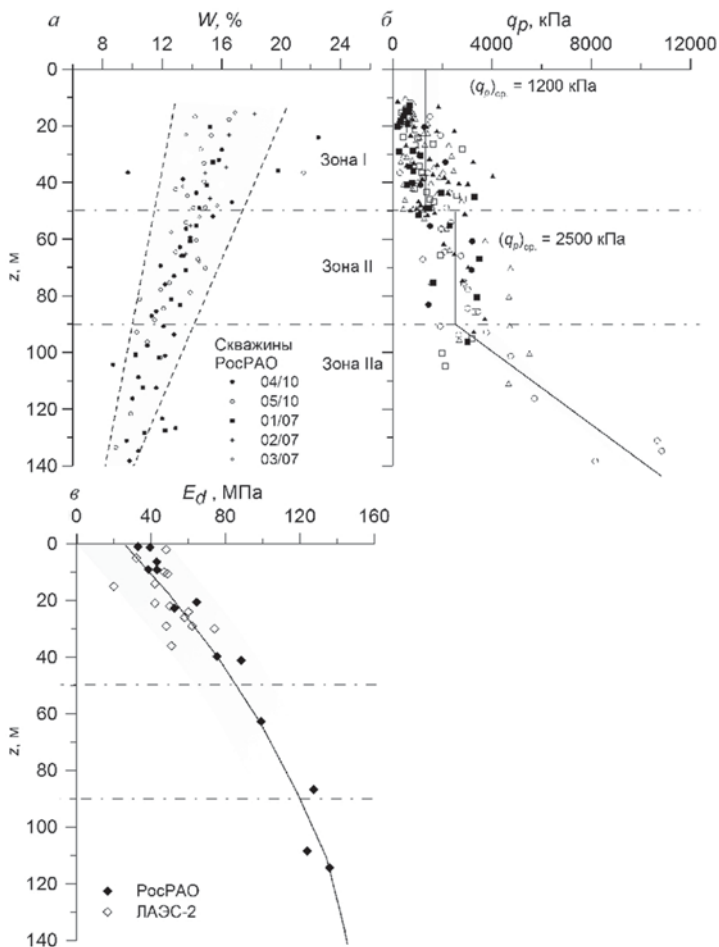


Рис. 17.2. Изменение влажности (а), девиаторного напряжения (б) и модуля общей деформации (в) в зависимости от глубины отбора образцов пород.

Рис. 17.1. Расположение глубоких инженерно-геологических скважин на участках РосРАО и ЛАЭС-2 (а). Схематический геологический разрез по линии А—Б (б).

1 — скважина и ее номер; 2 — трасса подземных горных выработок; 3 — гидроизогипса верхнего водоносного комплекса; 4 — палеодолина.

17.2.2. Фильтрационные и геомиграционные свойства глин

Коэффициенты фильтрации котлинских глин изучались в приборах трехосного сжатия на монолитах, ориентированных по двум взаимно перпендикулярным направлениям. В результате проведенных поинтервальных исследований (табл. 17.3) удалось установить, что котлинские глины обладают относительно низкими фильтрационными свойствами. Так, коэффициент фильтрации в направлении, перпендикулярном напластованию, лежит в диапазоне от $5 \cdot 10^{-7}$ до $2 \cdot 10^{-5}$ м/сут, а значения по напластованию — от $4 \cdot 10^{-6}$ до $2 \cdot 10^{-4}$ м/сут. Таким образом, выявлена сильная анизотропия параметра (до 16), которая объясняется тонкой слоистостью глинистых отложений.

Проведенные диффузионные эксперименты с радионуклидами в трех различных постановках (однокамерные, двухкамерные, 3D) позволили выявить диапазоны вариации коэффициентов молекулярной диффузии в котлинских глинах (табл. 17.4) на площадке предполагаемого строительства ПЗРО. Установленные значения в целом хорошо коррелируют с материалами зарубежных исследований на объектах-аналогах (Huysmans, Dassargues, 2006).

Также экспериментально установлена анизотропия диффузионных свойств среды. Поток вещества в среднем диффундирует в 2—6 раз быстрее вдоль напластования, нежели поперек, что объясняется микрослойистой структурой котлинских глин. Полученные эффективные коэффициенты молекулярной диффузии (D_e) для различных радионуклидов располагаются в ряд по убыванию: тритий > Sr-90 > Cs-137 > Co-60. Соответствующие значения D_m : $3.6 \cdot 10^{-10}$ > $2.3 \cdot 10^{-10}$ > $6.6 \cdot 10^{-11}$ > $3.0 \cdot 10^{-11}$ м²/с.

Отобранные с различных интервалов пробы глин использовались в экспериментах по изучению сорбции таких радионуклидов, как Sr-90, Cs-137, Am-241, Pu-239, 240 (Rumynin, Nikulenkov, 2016). Полученные диапазоны изменения коэффициента сорбционного распределения, K_d , для различных радионуклидов существенно различаются (рис. 17.3). Кроме того, отчетливо видно, что значения K_d , полученные для нижней зоны

Таблица 17.3

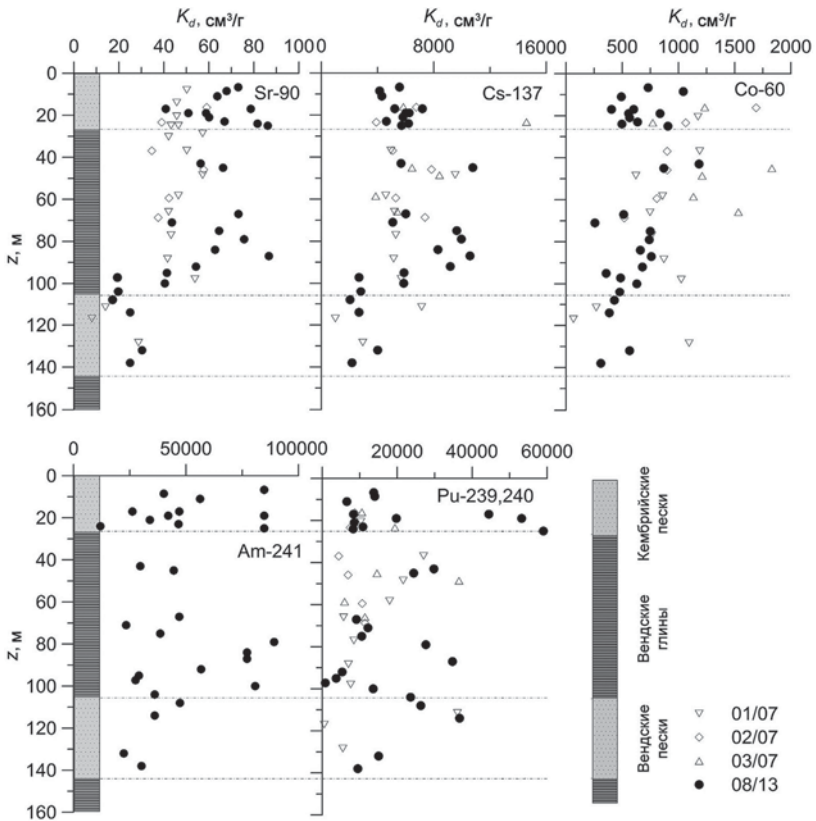
Сводная таблица коэффициентов фильтрации котлинских глин

№	№ скв.	Глубина, м	k_{\parallel} , м/сут	k_{\perp} , м/сут	Анизотропия
1	5/10	48.6—49.0	$6.0 \cdot 10^{-6}$	$1.3 \cdot 10^{-6}$	4.6
2	4/10	51.8—52.1	$4.0 \cdot 10^{-6}$	$6.0 \cdot 10^{-7}$	6.7
3	1/07	55.0—55.25	—	$5.0 \cdot 10^{-7}$	—
4	1/07	65.0—65.25	—	$5.0 \cdot 10^{-7}$	—
5	4/10	69.2—69.5	$1.9 \cdot 10^{-5}$	$1.4 \cdot 10^{-6}$	13.6
6	7/11	70.3—70.6	$2.2 \cdot 10^{-5}$	$1.3 \cdot 10^{-6}$	16.7
7	7/11	94.0—94.25	$2.2 \cdot 10^{-4}$	$1.9 \cdot 10^{-5}$	11.0

Таблица 17.4

Средние эффективные коэффициенты
молекулярной диффузии (D_m), м²/с

Тип эксперимента	3D эксперимент	Однокамерная ячейка	Двухкамерная ячейка
Cl-36	$5.9 \cdot 10^{-10}$	—	$1.4 \cdot 10^{-10}$
H-3	—	$3.1 \cdot 10^{-10}$	—
Sr-90	$4.5 \cdot 10^{-10}$	$1.5 \cdot 10^{-10}$	—
Co-60	$4.6 \cdot 10^{-11}$	$3.7 \cdot 10^{-11}$	—
Cs-137	—	$6.6 \cdot 10^{-11}$	—

Рис. 17.3. Вариации коэффициента K_d (см³/г) по мощности (z , м) глинистой толщи.

Пунктир — зона опесчаненных глин.

разреза (глубже 100 м), представленной вендскими песчаниками, заметно ниже. Наименее сорбируемым является Sr-90, наиболее — Am-241 и Pu-239, 240; Cs-137 занимает промежуточное положение.

Выполненные работы дают параметрическую основу для создания комплекса математических моделей. Моделирование миграционных процессов в рамках ОДБ позволило оценить пространственно-временные масштабы диффузии в глинистой толще в постэксплуатационный период (штатный режим функционирования ПЗРО), а также оконтурить поля радиоактивного загрязнения вендского горизонта (аварийный сценарий, связанный с нарушением целостности массива пород). И в том и другом случае воздействие не выходит за допустимые пределы.

17.2.3. Сравнение вендских глин (Vkt) с глинистыми формациями в Западной Европе (BC, COx и OPA)

Исследования, выполненные рядом организаций в странах Западной Европы, а также комплекс работ в Сосновоборском регионе позволяют отнести изученные толщи (табл. 17.1) к средам, обладающим свойствами, благоприятными для захоронения радиоактивных отходов:

- низкие коэффициенты фильтрации;
- отсутствие потока воды вокруг отходов обуславливает малую скорость выщелачивания;
- преобладающим механизмом переноса радионуклидов является молекулярная диффузия;
- благоприятные физико-химические условия иммобилизации радионуклидов (малая растворимость);
- высокая сорбционная/удерживающая способность;
- способность к самозапечиванию, т. е. закрытию трещин и пустот (набухание глинистых минералов).

По результатам экспериментальных работ и сравнительного анализа опубликованных материалов для четырех формаций Vkt, BC, COx и OPA обнаруживаются следующие общие свойства:

- близкий минералогический состав;
- высокая сорбционная способность и обменная емкость;
- химическая среда от нейтральной до слабо щелочной;
- преобладающий вид переноса — диффузионный.

Физико-химические и сорбционные свойства глин благоприятны для удержания радионуклидов. Для глин характерна медленная миграция радионуклидов в биосферу в течение длительного периода времени.

По результатам экспериментальных работ и сравнительного анализа между четырьмя формациями Vkt, BC, COx и OPA обнаруживаются следующие различия:

- пористость и влажность глин уменьшаются в зависимости от плотности в ряду — Vkt \gg BC \gg OPA > COx;
- содержание карбонатов уменьшается в ряду COx > OPA \gg BC, Vkt;

— общее солесодержание снижается в ряду $ОРА > СОх > Vkt > ВС$;
— геомеханические свойства (твердость и сопротивление) $СОх$ (затвердевшая) $> ОРА >>> ВС$ (пластичная) $= Vkt$ (затвердевшая, непластичная). Прочность Vkt ниже, чем у $СОх$ и $ОРА$;

— низкий коэффициент фильтрации (в скобках — десятичный порядок, м/с): $Vkt-BC (-12)$ $ОРА (-13)$ $СОх (-14)$.

Таким образом, можно с уверенностью утверждать, что по основным параметрам котлинские глины отвечают «стандарту» глинистых пород, рассматриваемых в западной части Европы в качестве сред, вполне приемлемых для захоронения РАО.

17.3. ПГЗРО в гнейсовом массиве (участок «Енисейский», Красноярский край)

Нижнеканский гранитоидный массив уже в начале 1990-х гг. стал рассматриваться как достаточно перспективный с позиций его «изолирующих» свойств. Этот массив находится на сочленении двух крупных азиатских геологических структур — Западно-Сибирской и Восточно-Сибирской плит. В период с 1992 по 2005 г. были выполнены различные геологические работы на нескольких участках. Перспективным для дальнейшего изучения был признан участок «Енисейский» (Озерский, Караулов, 2012). Общий объем бурения скважин глубиной 600—700 м превысил 7.5 тыс. погонных метров; из гидрогеологических скважин произведены поинтервальные откачки (через 50 м) — более 180 опытов; бурение скважин сопровождалось полным комплексом скважинного каротажа, включая расходомерию и резистивиметрию. Площадные (наземные) геофизические работы включали магнитную съемку, электроразведку методом ВЭЗ, а также сейсморазведочные работы.

В геоморфологическом отношении участок расположен на водоразделе двух рек: Енисей и Кан. ПГЗРО размещается на глубинах 400—450 м от поверхности (а. о. +5... -70 м) в пределах Нижнеканского гидрогеологического массива трещинных и трещинно-жильных вод (рис. 17.4), в котором выделяются два типа фильтрационных потоков (рис. 17.5): региональный поток подземных вод, контролируемый разгрузкой в региональные дрены — реки Енисей и Кан; локальные потоки подземных вод, контролируемые локальными формами рельефа и разгружающиеся в реки второго и третьего порядка. Доказательство разделения потоков в верхней и нижней зонах водоносной толщи — одна из задач модельного анализа в рамках ОДБ.

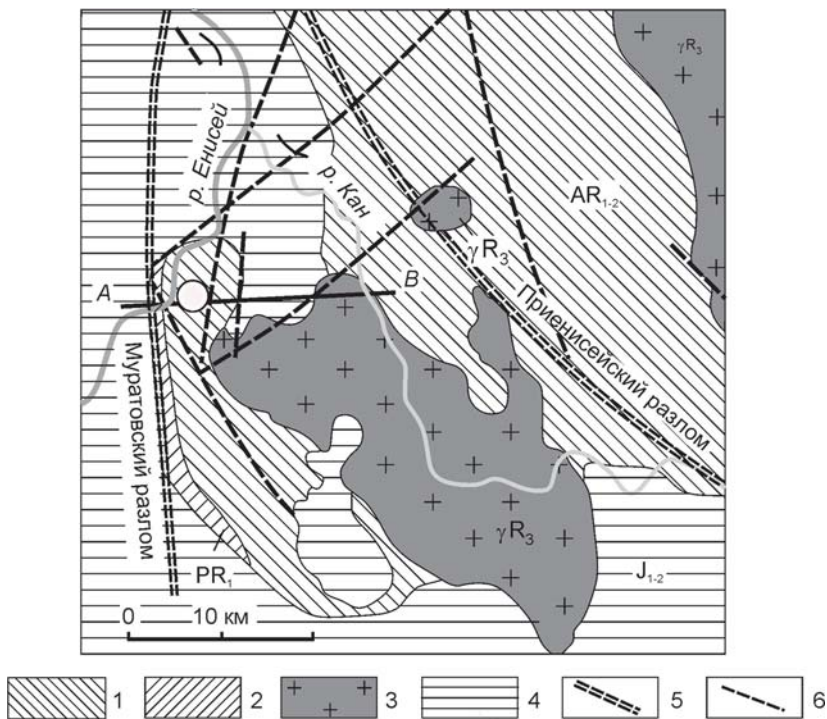


Рис. 17.4. Геологическая схема района размещения участка «Енисейский» (фрагмент Ангаро-Канского выступа).

1 — гнейсы и кристалло-сланцы канского метаморфического комплекса архея; 2 — гнейсы сланцы амфиболиты с прослоями мраморов енисейского метаморфического комплекса; 3 — рифейские и раннепротерозойские граниты; 4 — осадочные образования структур обрамления Енисейского кряжа; 5 — региональные зоны тектонической деформации 1-го порядка; 6 — зоны тектонической деформации 2-го порядка. Кругом обозначено положение участка «Енисейский». Линия А—Б — линия геолого-гидрогеологического разреза (рис. 17.5).

С другой стороны, приемлемость создания ПЗРО определяется проницаемостью массива. Интерпретация поинтервальных гидрогеологических опробований указывает, что коэффициент фильтрации убывает с глубиной (Озерский, Караулов, 2012). На глубинах 0—100 м наиболее часто отмечаются коэффициенты фильтрации $5 \cdot 10^{-3}$ м/сут, а в интервале 100—200 м средние значения уже в 5 раз меньше. Глубже 200 м происходит постепенная стабилизация значений коэффициента фильтрации в пределах $1 \cdot 10^{-4}$ — $5 \cdot 10^{-4}$ м/сут.

Данные гидрогеологической разведки послужили основой для создания 3D математической модели объекта.

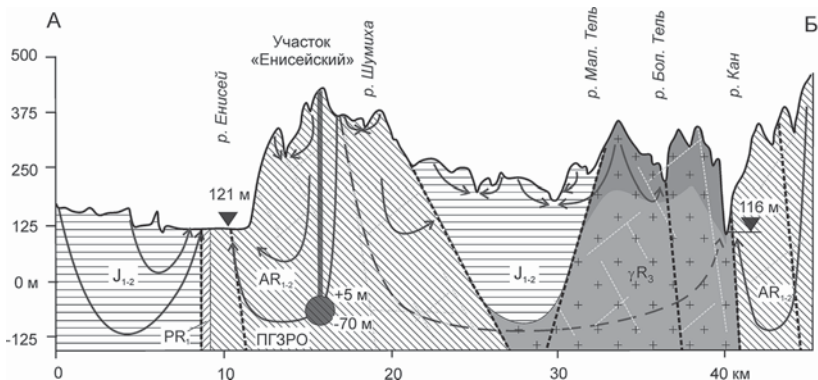


Рис. 17.5. Схематический геологический профиль (З—В) через участок «Енисейский» (ПГЗРО).

Стрелки — линии тока (схематично) в зоне активного и замедленного водообмена.

Моделирование показало, что р. Шумиха, а также ручьи Безымянный и Студеный оказывают дренирующее влияние на водоносные породы только в верхней части разреза (рис. 17.6, а). На более низких абсолютных отметках, в частности совпадающих с проектными отметками заложения инженерного объекта (ПГЗРО), такое влияние отсутствует: подземные воды транзитом проходят этот участок и разгружаются в р. Енисей (рис. 17.6, б).

В ПГЗРО планируется размещение отходов 1-го класса (тепловыделяющие РАО) и 2-го класса. Перечень радионуклидов, потенциально участвующих в загрязнении подземных вод в пост-эксплуатационный период, довольно широк (I-129, Sr-90, H-3, Tc-99, Se-79, U-238, Cs-137, Cs-135, Am-243, Pu-239). Наряду с тепловыделением возможна газогенерация за счет коррозии материалов.

Для изучения сорбционного взаимодействия растворенных радионуклидов и породного материала было выполнено два типа экспериментов: 1) сорбция радионуклидов на дисперсном материале, заполняющем межтрещинное пространство (определение K_d , см³/г); 2) сорбция радионуклидов на поверхностях трещин (монолитных фрагментах пород) коэффициента распределения (K_d , см) (рис. 17.7).

Как показало моделирование, сорбция и радиоактивный распад являются факторами, сдерживающими радиоактивное загрязнение подземных вод (рис. 17.8). Так, за счет малого периода полураспада и заметной сорбции Cs-137 остается практически в границах горной выработки. Большой период полураспада Pu-239, несмотря на его высокую сорбируемость, имеет довольно выраженный ореол. В свете сказанного наиболее опасными являются слабосорбируемые и долгоживущие радионуклиды, такие как I-129, Se-79 и Tc-99, о чем свидетельствуют примеры расчета ореола Se-79 на рис. 17.8.

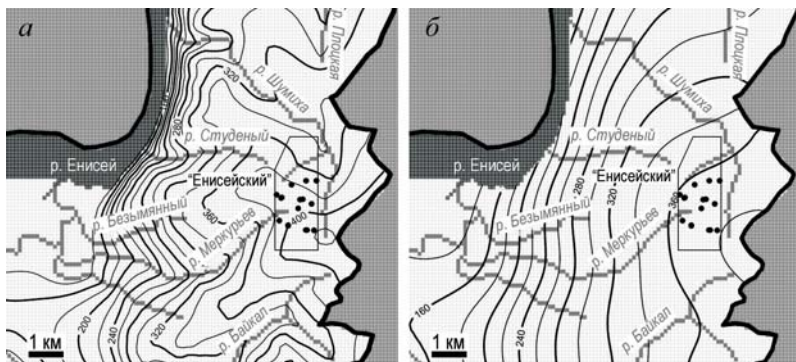


Рис. 17.6. Распределение модельных напоров (изолинии, абс. отм.) в верхней (а) и нижней (б) зонах гидрогеологического разреза.

Таким образом, предварительный анализ указывает на отсутствие факторов, являющихся неблагоприятными с позиций ОДБ двух рассмотренных объектов. Повышению достоверности данного вывода может послужить дальнейшее изучение геолого-гидрогеологических условий, механизмов и параметров, контролирующих перенос радионуклидов в массиве горных пород, а также развитие математического аппарата.

При обосновании строительства ПЗРО на относительно небольших глубинах в глинистых толщах (условия Сосновоборского района) актуальным является геомеханическое моделирование подработки водоносных горизонтов, залегающих в кровле

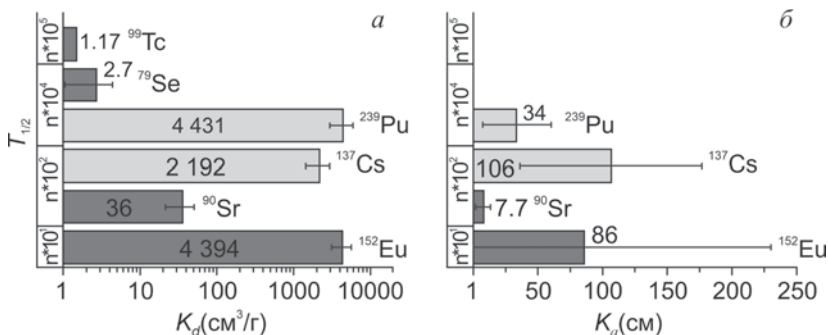


Рис. 17.7. Коэффициенты сорбционного распределения изотопов ¹³⁷Cs, ⁹⁰Sr, ⁷⁹Se, ⁹⁹Tc, ¹⁵²Eu, ²³⁹Pu, определенные экспериментально (Rozov et al., 2018): а — на измельченном материале-заполнителе трещин во вмещающих породах; б — на поверхностях трещин монолитных образцов вмещающих пород.

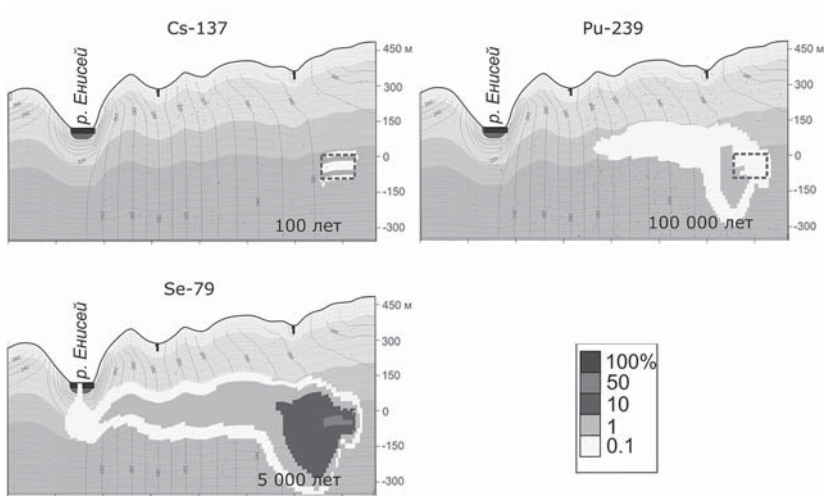


Рис. 17.8. Конфигурация ореолов загрязнения подземных вод радионуклидами в относительных концентрациях.

Время указано с момента выхода за пределы системы инженерных барьеров.

глин, для прогнозирования развития техногенной трещиноватости над горными выработками.

Для ПГЗРО в Нижнеканском гранитогнейсовом массиве представляется целесообразным развитие сети режимных скважин за пределами размещения объекта для изучения общей структуры фильтрационных потоков, а также водного баланса территории. Принципиальным является использование и разработка моделей нового поколения, учитывающих невыполнение принципа континуума («дискретный/каналовый» характер течения жидкости и газа в трещиноватой среде).

Так, для обоснования всех проектных решений необходима интеграция локальных моделей процессов в инженерном объекте (ближняя зона) и мелкомасштабной региональной модели (дальняя зона), а также калибровка моделей с использованием дополнительной информации (изотопы, гидрология, ДДЗ), сопровождающаяся анализом чувствительности. Особое значение имеет учет физико-химических преобразований, многокомпонентности раствора, в частности коллоидных форм.

Глава 18

ВОЗДЕЙСТВИЕ ВЫБРОСОВ С АЭС НА РАДИОАКТИВНОСТЬ ПОЧВ, ПОВЕРХНОСТНЫХ И ПОДЗЕМНЫХ ВОД

18.1. Общие представления об радиозологических последствиях эксплуатации АЭС

В районе расположения АЭС источником радионуклидов в окружающей среде является газоаэрозольный выброс продуктов деления (ПД) в атмосферу. При *нормальной эксплуатации* (НЭ) энергоблока выброс формируется за счет удаления вытяжного воздуха систем вентиляции зоны контролируемого доступа и технологических сдувок с оборудования из систем спецгазоочистки. Дополнительными источниками возможного поступления ПД в атмосферу из зоны свободного доступа является вытяжной воздух здания турбины и отвод паровоздушной смеси из конденсаторов турбины. Вентиляционный выброс из здания турбины организован выше кровли.

В условиях НЭ АЭС дозовая нагрузка для критических групп населения от всех факторов радиационного воздействия газоаэрозольных выбросов энергоблоков АЭС за пределами промплощадки составляет менее 1 % от основного предела годовой эффективной дозы облучения населения (1 мЗв/год), установленного в проектах российских АЭС для газоаэрозольных выбросов. В этих условиях нет необходимости выполнять дополнительные оценки воздействия на почвы и водные объекты (в том числе, подземные воды) в зоне потенциального воздействия АЭС. Справедливость такого заключения будет проверена на примере, представленном в заключении этой главы.

Однако в проектах АЭС рассматривается также спектр режимов с нарушениями нормальной эксплуатации, отвечающих *проектным* (ПА) и *запроектным* (ЗПА) авариям. Особую категорию составляют *тяжелые* запроектные аварии (ТЗПА). Такие события сопряжены с потенциальной опасностью загрязнения окружающей среды радиоактивными веществами, в частности почв и природных (поверхностных и подземных) вод. Несмотря на то что при проектировании АЭС в максимально возможной степени предусматриваются необходимые меры безопасности, полностью исключить аварии невозможно.

18.1.1. Краткая история аварийных событий

Тяжелые аварии, произошедшие на атомных электростанциях в США (Три-Майл-Айленд, 1979 г.), СССР (Чернобыль, 1986 г.) и Японии (Фукусима-1, 2011 г.), во многом изменили мнение о безопасности АЭС (табл. 18.1), вплоть до отказа некоторыми странами от программ развития ядерной энергетики. В табл. 18.1 также представлены данные по Кыштымской аварии 1957 г., не связанной с эксплуатацией АЭС (см. далее).

В аварийном режиме на станции Три-Майл-Айленд произошло частичное плавление ядерного топлива, однако образовавшийся расплав не прожег корпус реактора, так что радиоактивные вещества в основном остались внутри. В атмосферу были выброшены главным образом радиоактивные благородные газы, выброс опасных нуклидов, таких как йод-131 и других продуктов деления, был незначительным. Территория станции лишь на локальных участках была загрязнена радиоактивной водой, вытекшей из первого контура. Суммарный выброс оценивается в $4.8 \cdot 10^{17}$ Бк.

Последствием аварии на Чернобыльской АЭС было расплавление активной зоны, сопровождавшееся выходом топлива за пределы корпуса реактора, повреждением защитной оболочки и выбросом продуктов деления ядер в окружающую среду (табл. 18.2). Основное радиоактивное загрязнение вызвано осаджением на земной поверхности Cs-137 (суммарный выброс которого составил 2.06 МКи) и, в меньшей степени, — Sr-90. В начальный кратковременный период радиоактивное воздействие определяется выбросом I-131. Загрязнение водных объектов (реки, естественные и искусственные водоемы) обусловлено главным образом смывом ра-

Таблица 18.1

Характеристика радиационных аварий и плотность осаднения главных (за исключением I-131) радионуклидов

Радиационная авария	Три-Майл-Айленд	Чернобыль	Фукусима	ВУРС (Кыштым)		
Общие сведения						
Год	1979	1986	2011	1957		
Суммарный выброс, ТБк	$4.8 \cdot 10^5$	$1.4 \cdot 10^7$	$7.7 \cdot 10^5$	$7.4 \cdot 10^5$		
Площадь, тыс. км ²	—	208 ^б	13 ^в	23		
Радиоактивные выпадения						
Радионуклид	—	Cs-137	Sr-90	Cs-134, 137	Cs-137	Sr-90
Плотность осаднения ^а , Бк·м ⁻²	—	10^5 — 10^6	10^4 — 10^5	(1—3) 10^6	10^4	10^5 — 10^7

Примечание. ^а — среднемаксимальные значения; ^б — область, околтуренная изолинией $3.7 \cdot 10^4$ Бк·л⁻¹ (для Cs-137); ^в — островная часть (суша).

Таблица 18.2

**Характеристики выброса Чернобыльской аварии
(The Release, dispersion and deposition of radionuclides... 2002)**

Нуклид (ПД)	Период полураспада	Процент от содержания	Активность, ПБк*
I-131	8.0 сут	50—60	~1760
Cs-134	2.1 год	20—40	~54
Cs-137	30.2 год	20—40	~85
Sr-90	28.8 год	4—6	~10
Pu-238	86 год	3.5	0.035
Pu-239	24 400 год	3.5	0.030
Pu-240	6580 год	3.5	0.042
Pu-241	13.2 год	3.5	~6

* ПБк (Пектабекерели) = 10^{15} Бк.

диоактивных веществ с поверхности в периоды выпадения дождевых осадков и при снеготаянии.

Изотоп Cs-137 был выбран, чтобы охарактеризовать величину радиоактивного загрязнения поверхности: а) его легко измерить и б) он был основным источником дозовой нагрузки, полученной населением после того, как распался короткоживущий изотоп I-131. Среди основных географических областей загрязнения выделяются: Центральный регион, Брянско-Белорусская и Калужско-Тульско-Орловская области. Центральное пятно сформировалось во время начальной, активной стадии выброса в преимущественном направлении на запад и северо-запад. Ореолы Cs-137 с плотностью более 40 кБк/м² охватывали большие территории северной части Украины и южной части Белоруссии. Наиболее сильно загрязненной была 30-километровая зона, окружающая реактор, где плотность осаждения Cs-137 превышала 1500 кБк/м² (рис. 18.1, а).

Похожая, но в меньшем масштабе, авария, сопровождавшаяся неконтролируемым высвобождением радиоактивных веществ, произошла на атомной электростанции Фукусима-1 в результате сильнейшего землетрясения в Японии. Землетрясение и удар цунами вывели из строя внешние средства электроснабжения и резервные дизельные генераторы, что явилось причиной неработоспособности всех систем нормального и аварийного охлаждения и привело к расплавлению активной зоны реакторов на трех энергоблоках. Если при Чернобыльской аварии выпадения радиоактивных веществ происходили в основном на земную поверхность, то при аварии на АЭС Фукусима-1 значительная часть вышедших из аварийных реакторов радионуклидов попала в Тихий океан. Радиоактивный след на поверхности земли (рис. 18.1, б) представлен изотопами цезия (Cs-134 и Cs-137). Отмечался также значительный рост содержания I-131 в морской и водопроводной воде, в продуктах питания в регионах вокруг АЭС. Анализ воды в дренажной системе 2-го энергоблока показал содержание I-131, равное $3 \cdot 10^5$ кБк/л.

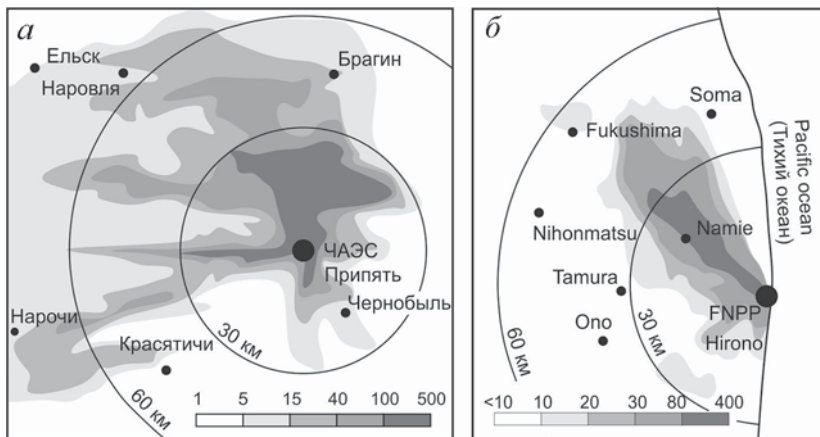


Рис. 18.1. Карты загрязненности поверхности Cs-137 (Кю/км²) после Чернобыльской аварии 1986 г. (а) и Фукусимской аварии 2011 г. (б). 1 Кю/км² = 3,7 · 10⁴ Бкм⁻².

Причиной Кыштымской аварии 1957 г., приведшей к выбросу в атмосферу радиоактивных веществ, послужил взрыв одной из емкостей (после выхода из строя системы охлаждения) для хранения высокоактивных РАО на ПО «Маяк». Около 20 МКи радиоактивности было выброшено из аварийного резервуара в окружающую среду. Большая часть (90 %) ядерных отходов была рассредоточена вблизи резервуара в виде жидкой пульпы, осевшей на территории ПО «Маяк». Остальная часть радиоактивных веществ была поднята взрывом на 1—2 км над поверхностью земли с образованием радиоактивного облака, содержащего жидкие и твердые аэрозоли. Осаждение жидких и твердых аэрозолей привело к довольно значительному загрязнению поверхности — формированию так называемого Восточно-уральского радиоактивного следа (ВУРС) (рис. 18.2).

Приведенные в табл. 18.1 данные по концентрации радионуклидов на почвенном слое отражают порядковые диапазоны значений. На самом деле распределение радионуклидов по площади в пределах участков выявленного загрязнения (в частности, связанных с Чернобыльской аварией) крайне неоднородно, что обусловлено как гетерогенным характером атмосферных выпадений в неустойчивых погодных условиях, так и разнообразием ландшафтов, в которых происходила аккумуляция радионуклидов после осаждения.

Как видно, основными (относительно долгоживущими) ПД, выпавшими на поверхность из газоаэрозольного выброса, являются Cs-137 и Sr-90. Наиболее масштабным является выброс I-131, однако вклад этого изотопа в загрязнение окружающей среды быстро падает из-за малого периода полураспада. Одной из отличительных особенностей аварии на Чернобыльской АЭС было присутствие в радиоактивных выпадениях



Рис. 18.2. Карта загрязнения поверхности Sr-90 ($\text{Кю}/\text{км}^2$) Кыштымской аварии 1957 г.

топливной компоненты. В топливных «горячих частицах» содержится основная масса таких биологически значимых радионуклидов, как Sr-90 и Pu-238,239,240. Плотность загрязнения почвенного слоя радионуклидами, N_0 , и их номенклатура — одна из главных характеристик воздействия на природные экосистемы. После попадания радионуклидов на поверхность почвы происходит их миграция с дождевыми или талыми водами, образующими поверхностный сток, к речным долинам.

Наблюдения в зоне влияния Чернобыльской аварии показали, что наиболее активное повышение уровня радиоактивного загрязнения рек наблюдается во время дождевых паводков. Во время весенних паводков 1987 и 1988 гг. были получены важные данные о влиянии загрязнения водосборов на содержание радионуклидов в речных водах.

Попадание радиоактивно загрязненных склоновых вод в поверхностные водотоки ставит под угрозу водные ресурсы целых регионов. Одновременно происходит нисходящая миграция растворенных радионуклидов в почвенный слой и зону аэрации, так что возникает опасность загрязнения подземных вод (Шестопалов и др., 2007).

Данные, представленные в табл. 18.1, могут служить некоторым ориентиром при анализе гипотетических аварийных ситуаций на проектируемых и строящихся энергоблоках с различными типами реакторов.

18.1.2. Проектные параметры радиоактивных выбросов на АЭС

Представление о масштабе потенциального воздействия АЭС на окружающую среду дает табл. 18.3 (модельные расчеты), где приведены проектные параметры выбросов в условиях эксплуатации реактора ВВЭР-1200.

Как следует из табл. 18.3, все аварии характеризуются выбросом радиоактивного йода ($I-131$) и двух изотопов цезия ($Cs-134$ и $Cs-137$). При ТЗПА в выбросе присутствует $Sr-90$.

Наблюдаемая в настоящее время плотность выпадения $Cs-137$ N' (существующий природный фон) на территории РФ по данным Росгидромета (2017) составляет около $5 \cdot 10^{-8}$ Бк/ m^2 с. В некоторых пунктах, расположенных на загрязненных в результате Чернобыльской аварии территориях или в зонах влияния радиационно опасных объектов, выпадения $Cs-137$ много выше средней величины. Например, в п. Красная Гора Брянской области эта величина составляет около $1.4 \cdot 10^{-7}$ Бк/ m^2 с (Чернобыльский след), а в районе расположения ядерно-промышленных производств ПО «Маяк» — $4.8 \cdot 10^{-7}$ Бк/ m^2 с, что свидетельствует о значимости локальной ветровой эрозии почвы, приводящей к подъему радиоактивных веществ с ее поверхности и последующему осаждению. Выпадение из атмосферы $Sr-90$ за пределами загрязненных территорий находится ниже предела обнаружения. Объемная активность трития в атмосферных осадках меняется в среднем от 0.5 до 5 Бк/л. В том же диапазоне находится активность трития в речных водах.

Несколько повышенная плотность выпадения радионуклидов наблюдается в зонах воздействия выбросов с АЭС (условиях НЭ); например, плотность атмосферных выпадений $Cs-137$ в санитарно-защитной зоне Нововоронежской АЭС за период 2002—2010 гг. менялась в диапазоне $(0.9—1.9) \cdot 10^{-7}$ Бк/ m^2 с.

Класс аварий по интенсивности выброса образует в первом приближении ряд:

$$\text{ТЗПА} \approx 10\,000 \cdot \text{ЗПА}$$

$$\text{ЗПА} \approx 10 \cdot \text{ПА}$$

$$\text{ПА} \approx 10 \cdot \text{НЭ} \text{ (в пересчете на 1 год эксплуатации).}$$

Наиболее опасной является ТЗПА, характеризующаяся большой течью теплоносителя первого контура в сочетании с отказом системы аварийного охлаждения активной зоны при обесточивании станции на 56 ч. В данном режиме происходит расплавление и обрушение активной зоны с последующим разрушением днища реактора и выходом расплава в устройство локализации расплава.

Такая ТЗПА относится к аварии примерно уровня 5 по международной шкале INES (accidents with wider consequences). Например, уровень 5 по шкале INES присвоен аварии 1979 г. на АЭС Три-Майл-Айленд; Чернобыльская авария 1986 г. и Фукусимская авария 2011 г. оцениваются по шкале INES уровнем 7 (катастрофическая авария, major/catastrophic accidents).

Основные параметры высвобождения продуктов деления (атмосферный выброс) в различных условиях эксплуатации АЭС с типом ядерного реактора ВВЭР-1200 (на примере проекта Нововоронежской АЭС-2)

Условия эксплуатации	НЭ	ПА	ЗПА	ТЗПА
Класс	DBC1,2	DBC4	DEC1	DEC2
Высота выброса, м	99.5	77.7	99.5	99.5
Продолжительность	60 лет	1, 4, 10 или 30 сут	77.7	56 ч
Обозн., ед. изм.	М', Бк/с		М, Бк	
Cs-134	0.4	1.7E + 06	1.5E + 07	6.4E + 10
Cs-137	0.6	6.3E + 05	6.8E + 06	4.0E + 10
I-131	140	5.3E + 07	1.5E + 09	3.5E + 11
St-90	—	—	—	1.1E + 10

Примечание. НЭ — нормальная эксплуатация; ПА — проектная авария; ЗПА — проектная авария (DEC1 — без плавления активной зоны); ТЗПА — тяжелая проектная авария (DEC2 — с плавлением активной зоны); DBC — Design Basis Conditions; DEC — Design Extension Conditions. Высота 99.5 м отвечает высотной трубе, 77.7 м — фильтру пассивной очистки, 0 м — байпас. М' — интенсивность выброса в атмосферу (среднегодовая), М — суммарная активность выброса.

18.2. Особенности поведения радионуклидов в почвах и водных объектах по данным мониторинга на радиоактивно загрязненных участках

Проблема изучения и прогнозирования загрязнения поверхностного и подземного стока техногенными радионуклидами имеет довольно продолжительную историю изучения. Первые исследования были связаны с анализом на основе мониторинговых данных выноса радионуклидов с водосборных бассейнов, загрязненных радиоактивными осадками в результате испытания ядерного оружия в атмосфере в 1950-х и начале 1960-х гг. Осаждение радионуклидов достигло максимума в начале 1960-х гг.; с середины 1980-х гг. содержания «бомбовых» радионуклидов на поверхности были ниже уровня обнаружения.

Позже такого рода исследования были мотивированы необходимостью прогнозирования последствий воздействия на различные экосистемы радиационных аварий на АЭС, к которым относятся аварии на Чернобыльской (1986 г.) и Фукусима-1 (2011 г.) АЭС. Исследование поведения радионуклидов в пределах Восточно-уральского радиоактивного следа (ВУРС, Кыштымская авария, 1957 г., связанная с выбросом радиоактивных веществ из емкости с жидкими РАО) также предоставило важную информацию.

Наряду с данными наблюдений за радионуклидным составом речных вод на замыкающих гидростворах проводились исследования на опытных площадках, позволяющие контролировать гидравлику потока и поток растворенного вещества с загрязненной поверхности почвы. На экспериментальных участках определяли также выщелачивание радионуклидов по профилям почв. Выполненные исследования в различных природно-климатических и ландшафтных условиях открывают довольно широкие возможности для экстраполяции полученных данных на слабо изученные территории.

Среди общих закономерностей отметим следующие:

- Sr-90 в основном присутствует в склоновой воде в ионной форме;
- Cs-137 вымывается с поверхности преимущественно под действием эрозии вместе с минеральной фазой;
- расчетные значения коэффициентов высвобождения радионуклидов заметно падают во времени, что говорит об увеличивающейся удерживающей способности почвы по отношению к радионуклидам и степени необратимости данного процесса;

— необратимая сорбция на минералах и органическом веществе почвы, а также инфильтрация воды ограничивают миграцию радионуклидов в растворенной форме;

— активность миграции радионуклидов на дисперсных частицах зависит от интенсивности жидких осадков и может существенно варьировать во времени.

Потери осажденных радионуклидов за счет их смыва осадками в первые один-два года после аварии обычно не превышают долей процента, реже нескольких процентов от общего запаса их на площади водосбора. Осажденные радионуклиды в основном остаются в районах водосбора и служат источниками для долгосрочного загрязнения окружающей среды.

Скорость миграции радионуклидов зависит от типа почвы и степени ее естественной увлажненности на водораздельных участках, а также от вида растительного покрова. Дерново-подзолистые супесчаные и песчаные почвы водоразделов обеспечивают наиболее высокую подвижность радионуклидов. Сток с таких водоразделов приводит к повышенной радиоактивности пойменных отложений, в которых концентрация радионуклидов может в несколько раз превышать концентрацию радионуклидов в почвах, слагающих водоразделы.

Водоразделы, сложенные черноземом, прочнее удерживают радионуклиды, поэтому стоки с них содержат мало радионуклидов, в результате чего в почвах поймы концентрация радионуклидов ниже, чем в почвах водораздела. Миграционная способность Sr-90 примерно в 10 и более раз выше, чем подобная Cs-137. Это связано с тем, что Sr-90 находится в почве преимущественно в водорастворимой форме и в виде комплексов с органическим веществом. Твердый сток наиболее значим на легких пахотных землях и в местах с высокой скоростью потоков поверхностных вод, т. е. на склонах.

С поверхностными и грунтовыми водами радионуклиды выносятся в реки и мигрируют по течению рек. При этом донные отложения, а также отложения низких пойм в период паводков активно сорбируют радионуклиды, выполняя важную природоохранную функцию. При этом, однако, существует опасность накопления радионуклидов в ихтиофауне и других видах гидробионтов.

Комплексным показателем способности загрязненных почв удерживать радионуклиды является так называемый коэффициент смыва, рассчитываемый по формуле (Израэль и др., 1990):

$$K_c(\Delta t) = \frac{M}{N_0 F}, \quad (18.1)$$

где M — суммарная активность вынесенная из бассейна речным потоком за время наблюдения, Бк; N_0 — плотность начального загрязнения, Бк/м²; F — площадь выпадения, м².

Так, смыв «чернобыльского» цезия (Cs-137) с весенними паводковыми водами характеризуется коэффициентом K_c , изменяющимся в диапазоне $(60—450) \cdot 10^{-6}$ при $\Delta t = 10—20$ сут (Израэль и др., 1990). В прогнозных расчетах для водосборного бассейна р. Припять (в наибольшей степени пострадавшего от аварии на АЭС) принималось значение $K_c(\Delta t = 1 \text{ г.}) = 0.01$ (1 %). В среднем менее 1 % Cs-137 перемещается с водосборных площадей в речную сеть сразу после выпадения осадков, и, как правило, менее 0.1 % перемещается в год после первоначального смыва.

Анализ данных мониторинга показывает, что очистка почвы водосборов наиболее активно происходит в первые годы после их загрязнения. Затем обычно процесс довольно резко замедляется, что может быть объяснено переходом радионуклидов в слабо подвижное состояние и переносом их в более глубокие слои почвы инфильтрационными водами.

18.3. Обоснование масштаба и конфигурации модельной области

Существующие дисперсионные модели переноса газоаэрозольных выбросов с АЭС в атмосфере позволяют довольно точно рассчитать поток осаждения радионуклидов на земную поверхность в районе размещения АЭС (условия НЭ) или конфигурацию следа и плотность осаждения аварийных радионуклидов при заданном сценарии выброса ПД (см., например, табл. 18.3) для различных погодных условий.

Прогнозирование последствий НЭ предполагает использование статистически осредненных данных радиоактивных выпадений в районе АЭС. Для практических расчетов используется роза ветров, характеризующая повторяемость ветров различных направлений. Для прогнозов выбираются ландшафты и связанные с ними водосборы (см. далее), наиболее значимые в экологическом отношении, для которых на основе моделирования рассчитывается параметр N' — среднегодовой поток радионуклидов, осаждающихся на земную поверхность [Бк/м²год].

Прогнозирование последствий аварийных (кратковременных) выбросов также в идеальном случае должно основываться на моделировании атмосферного процесса. В зависимости от синоптических условий в момент аварии протяженность радио-

активного следа может изменяться от нескольких км до нескольких десятков км. Обычно постулируется размер области влияния, ограниченный «чернобыльским» радиусом 30 км, в пределах которой выполняются основные модельные (прогнозные) оценки. Распределение радионуклидов в пределах следа носит дисперсионный характер: максимальная плотность выпадения наблюдается вблизи станции по центральной оси ореола (следа). Очевидно, что дисперсия обусловлена как турбулентным характером движения воздушных масс, так и изменением с течением времени направления и величины вектора скорости ветра, что не может быть предсказано точно в тот или иной момент времени. Поэтому моделирование выполняется для нескольких статистически обоснованных («типовых») условий, учитывающих время года, изменчивость направления и силы ветра, и некоторые другие параметры состояния атмосферы. Для этого используются данные сайтов «погоды». Модельный расчет дает значение характеристики N_0 — средняя плотность выпадения [Бк/м²].

АЭС чаще всего размещают на магистральных реках низкого (n -го) порядка, включающих суб-бассейны — водосборные площади притоков этих рек более высоких ($n + 1$) порядков. То же относится к АЭС, располагающихся на берегу озер или искусственных водохранилищ, водосборные площади которых связаны с несколькими бассейнами малых рек, питающих эти водные объекты и полностью или частично попадающих в 30-километровую зону АЭС. Поэтому, учитывая площадной характер источника загрязнения в форме *радиоактивных следов на поверхности почвы*, построение гидрологических и гидрогеологических моделей должно основываться на *бассейновом принципе* выделения границ модельных областей. Различные гидрологические бассейны в пределах 30-километровой зоны в зависимости от конфигурации радиоактивного следа могут иметь различную плотность загрязнения. Анализ гидрографов на замыкающих створах речных бассейнов наряду с данными об атмосферных осадках позволяет определить поверхностный, склоновый сток, контролирующий поступление радионуклидов в поверхностные воды.

Учитывая высокую степень неопределенности, связанную с выбором ряда гидрометеорологических параметров, экспертные (консервативные) оценки могут основываться на *сочетании секторального и бассейнового принципов* выделения границ модельных областей. Характеристика N' рассчитывается по среднегодовой интенсивности выброса того или иного радионукли-

да M' (см., например, табл. 18.3), которая распределяется по площади в соответствии с розой ветров. Характеристика N_0 определяется по суммарной активности радионуклидов, высвободившейся в процессе аварии, M (табл. 18.3), и равномерно распределенной в одном из секторов с центральным углом $22.5—45^\circ$.

Поскольку такой подход пренебрегает возможностью выноса радионуклидов за пределы зоны радиусом 30 км, то средняя плотность загрязнения поверхности всегда будет завышенной (в сравнении с классическими моделями атмосферной дисперсии), что и определяет консерватизм прогнозного моделирования. Секторальный принцип в определении последствий аварийного выброса предполагает отсутствие приоритетных направлений, поэтому оценка воздействия носит многовариантный характер и учитывает равновероятный характер радиоактивного загрязнения всех водных объектов и почвы в пределах 30-километровой зоны. Однако границы модельных областей, связанных с этими секторами, не являются линейными, а определяются конфигурацией границ речных бассейнов (суб-бассейнов) и положением их замыкающих створов.

18.4. Основные механизмы и модельные подходы

В почве или на ее поверхности загрязняющие вещества, в частности радионуклиды (РН) (как продукт выбросов с АЭС), могут находиться в растворенном или сорбированном состоянии, в том числе и на минеральных частицах, образующих при обводнении поверхности суспензии и коллоидные растворы (рис. 18.3). Растворенные и взвешенные вещества перемещаются вниз по склону с потоком дождевой или талой снежной воды, проникая через почвенный слой в нижерасположенные водоносные слои и формируя тем самым ореолы загрязненных подземных вод.

К числу основных гидрологических механизмов, контролирующих загрязнение поверхностного и подземного стока, относятся: 1) образование (генерация) слоя воды на поверхности в результате избытка дождевых осадков; 2) поток воды по земной поверхности в виде склонового и речного стока; 3) перенос радионуклидов из почвы в поверхностный сток; 4) эрозия почв, приводящая к появлению в воде дисперсных частиц — потенциальных транспортеров радионуклидов; 5) перенос (поступление) радионуклидов в растворенном и сорбированном на взвешенных частицах виде в поверхностные водотоки и подземные воды.

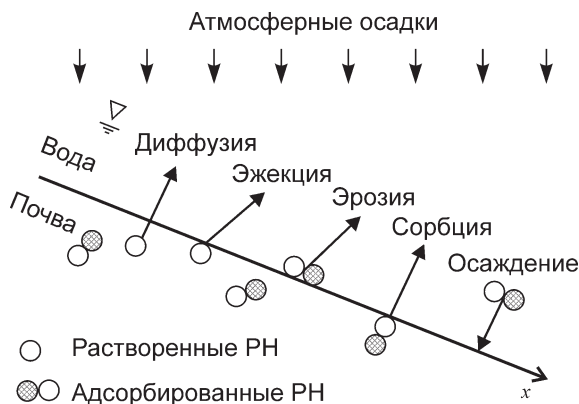


Рис. 18.3. Схематическое представление процессов массообмена между почвой и склоновым потоком воды.

18.4.1. Генерации поверхностного стока

Разработка основ количественной оценки преобразования осадков в поверхностный сток относится к одной из фундаментальных задач естествознания, интересовавших гидрологов нескольких поколений. Известно несколько концептуальных моделей, описывающих с различной степенью физического правдоподобия трансформацию атмосферных осадков в поверхностный сток. К моделям, которые имеют наибольшее признание и применение в практике гидрологического анализа, относятся: 1) модель стока, сформированного избыточной инфильтрацией, и 2) модель избыточного стока насыщения. В настоящей работе при построении расчетных моделей используется первая (так называемая хортоновская) модель.

Физические идеи и математические соотношения, которые составляют основу модели инфильтрационного избытка, были сформулированы и разработаны в ранних работах (1930-е гг.) известного американского гидролога Р. Э. Хортон (Robert Elmer Horton). В своей теории, ставшей классической, Р. Э. Хортон исходит из основного предположения, что поверхностный сток образуется из-за ограниченной способности почвы впитывать и пропускать воду, которая поступает на ее поверхность в виде дождя. Это предположение требует введения дополнительных определений и критериев, позволяющих проводить количественную оценку.

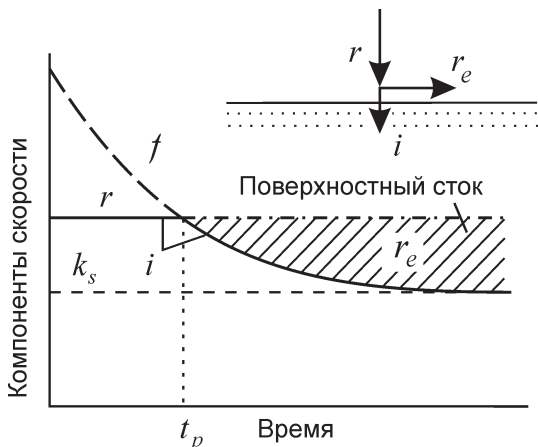


Рис. 18.4. Концептуальная модель избыточной инфильтрации Хортонa ($r = \text{const}$).

Р. Э. Хортон формулирует концепцию «инфильтрационной способности» почвы, подразумевая существование максимальной скорости, с которой дождевая вода может адсорбироваться почвой при условии неограниченного доступа жидкости к пористой поверхности, т. е. функция f может называться потенциальной инфильтрацией (по аналогии с потенциальным испарением).

Как видно из рис. 18.4, из-за нелинейности потока в ненасыщенной среде (почве) f , подобно функции распада, непрерывно уменьшается в течение периода осадков. Когда интенсивность дождя r (рассматривается самый простой случай $r = \text{const}$) меньше f , вся дождевая вода будет впитана. Когда f становится меньше, чем r , скорость накопления воды на поверхности составит

$$r_e = r - f \quad (18.1)$$

— так называемый избыток инфильтрации, который определяет потенциал потока воды по поверхности.

Количественное описание процесса подразумевает определение момента t_p , когда начинается подтопление поверхности, т. е. когда проникающая способность f становится равной r . В данный момент поверхность почвы характеризуется максимальным содержанием влаги ($\theta \approx \theta_s$), а ее проницаемость равна коэффициенту фильтрации $k \approx k_s$; поэтому, очевидно, хортонский поток возможен, когда $r > k_s$. В момент t_p величина $f =$

$= f(t - t_p)$ становится меньше r , и начинает формироваться поверхностный сток:

$$r_e(t) = \begin{cases} 0 & 0 \leq t \leq t_p, \\ r - f(t - t_p) & t > t_p. \end{cases} \quad (18.2a)$$

Соответствующая математическая запись, определяющая фактическую скорость инфильтрационного впитывания, имеет вид:

$$i(t) = \begin{cases} 0 & 0 \leq t \leq t_p, \\ f(t - t_p) & t > t_p. \end{cases} \quad (18.2б)$$

Существует два основных концептуальных подхода к моделированию гидрологических процессов на водосборных площадях, основанных либо на моделях с распределенными параметрами, либо на моделях с сосредоточенными параметрами (Rumynin, 2015).

18.4.2. Модели с распределенными параметрами

Эти модели позволяют в явном виде учесть взаимодействия основных, ранее перечисленных гидрологических механизмов, ответственных за движение загрязняющих компонентов с поверхностным стоком в пределах водосборных площадей.

Земные склоны, представленные различными формами рельефа, считаются основными элементами водосборов, поэтому математическое и физическое описание гидрологических процессов, происходящих в масштабе склонов, является первым шагом к разработке более общих гидрологических моделей, описывающих гидрологический отклик системы в масштабе всей водосборной площади. Склоновый (поверхностный) сток, который генерируется осадками, определяется несколькими факторами и процессами, в том числе интенсивностью и продолжительностью осадков, характеристиками инфильтрации (капиллярное впитывание и гравитация), температурный режим почвы, характеристики поверхности ландшафта, тип растительности и некоторые другие.

Достаточно строгое описание поверхностного стока основывается на системе уравнений мелкой воды (уравнения Сен-Венана) для слоя с горизонтальными компонентами скорости u_x и u_y (по координатам x и y соответственно), усредненными по

вертикали в слое толщиной h . Эта система, называемая также системой уравнений динамической волны, включает уравнения непрерывности и сохранения импульса. При определенных условиях она вырождается в уравнения диффузии или кинематической волны. Большинство исследователей сходятся во мнении, что наилучшим приближением, используемым для решения проблемы поверхностного стока, является *уравнение кинематической волны*, основные аналитические решения которого для идеализированных структур потока при заданных начальных и граничных условиях были получены методом характеристик.

Уравнение кинематической волны как форма представления уравнения неразрывности для поверхностного потока можно записать в виде

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \nabla Q - F_w = 0, \quad (18.3)$$

где A — площадь поперечного сечения потока [L^2]; Q — общий расход [L^3T^{-1}]; F_w — функция источника-стока, характеризующая латеральный приток или отток вследствие осадков и/или инфильтрации [L^2T^{-1}]. Переменные A и Q в общем случае являются функциями, зависящими от пространственных координат и времени.

Водный поток, стекая по поверхности земли, собирает загрязнения (удобрения, пестициды, тяжелые металлы, радионуклиды, нефть и др.), формируя площадной источник загрязнения подземных вод. Процесс течения сопровождается эрозией почвы, что увеличивает мутность воды. Поэтому транспортировка загрязнения происходит как в форме растворенных веществ, так и на взвешенных (в адсорбированном состоянии) частицах. Загрязненная дождевая вода также накапливается в поверхностных впадинах, которые могут фокусировать инфильтрацию на относительно небольшой площади.

Для описания массопереноса в склоновом стоке решается усредненное по глубине уравнение сохранения массы:

$$\frac{\partial(AC)}{\partial t} + \nabla(QC) - F_s = 0, \quad (18.4)$$

включающее характеристики A и Q уравнения (18.3); здесь C — концентрация вещества в воде [ML^{-3}]; F_s — функция источника-стока в задаче массопереноса [$ML^{-1}T^{-1}$].

Некоторым упрощенным подобием модели с распределенными параметрами может служить одномерная (1D) модель склонового потока.

18.4.2.1. 1D гидродинамическая модель для потока жидкости на склоне

Для потока на прямоугольной плоскости с постоянной шириной B объемный расход $Q = Bq$ ($q = q(x, t)$ — удельный расход на единицу ширины потока), площадь поперечного сечения $A = Bh$ ($h = h(x, t)$ — глубина потока), а функция источника-стока определяется выражением $F_w = B(r - i)$. Для такой конфигурации уравнение неразрывности (18.3) принимает вид:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = r - i. \quad (18.5)$$

Разность $(r - i)$, как мы уже знаем (см. формулу 18.2), является избытком осадков, или *стокообразующей* частью осадков,

$$r_e = r - i, \quad (18.6)$$

т. е. той частью осадков, которая образуется на поверхности в течение периода, когда интенсивность осадков r [LT^{-1}] превышает пропускную способность почвы (скорость впитывания/инфильтрации) i [LT^{-1}]; все эти компоненты потока могут зависеть от времени.

Динамика различных компонентов потока в уравнении (18.5) проиллюстрирована на рис. 18.5, где входная функция r соответствует дождевому событию длительностью T . Видно, что после образования слоя воды на поверхности ($t > t_p$ — время подтопления) скорость впитывания, i , падает, а избыток осадков, r_e , увеличивается. Удельный поток на выходе из склона ($x = L$), q_L/L , сначала отстает от кривой r_e , что связано с влиянием сил инерции, затем, как видно, эти характеристики выравниваются.

В действительности даже на склонах, которые могут казаться идеальными, пространственный характер стока довольно сложен из-за влияния микрорельефа, способствующего формированию превалирующих путей потока. Из-за этого функция h является эффективной характеристикой процесса, и было бы правильнее назвать ее эффективной глубиной потока.

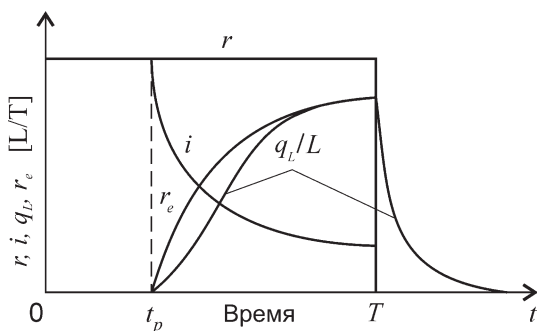


Рис. 18.5. Компоненты водного потока на склоне.

Уравнение неразрывности (18.5) содержит два неизвестных, q и h . Решение задачи в замкнутой форме возможно при его объединении с уравнением движения

$$q = \alpha h^n, \quad (18.7)$$

которое связывает расход потока воды с его глубиной; соотношение (18.7) в степенной форме ($n > 1$) носит фундаментальный характер; здесь параметр α учитывает влияние сил трения, обычно $\alpha = S_0^{1/2}/m$ [L^2-nT^{-1}]; S_0 — уклон поверхности [LL^{-1}], m — коэффициент Манинга — эмпирический параметр, который зависит от многих факторов, включая шероховатость поверхности и извилистость траекторий движения струек воды; его размерность определяется показателем степени n (характеристика режима течения); в случае турбулентного потока $n = 5/3$ (m имеет размерность [$TL^{-1/3}$]), в случае ламинарного потока $n = 3$ (так что m [$L^{1/3}T^{-1}$]); некоторые исследователи предлагают использовать промежуточное значение $n = 2$ (поток со смешанным/переходным гидродинамическим режимом). Таким образом, расход поверхностного потока q определяется при прочих равных условиях наклоном и шероховатостью поверхности земли.

Подставляя производную

$$\partial q/\partial h = \alpha n h^{n-1} \quad (18.7a)$$

в (18.5), получаем уравнение

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \alpha n h^{n-1} \frac{\partial h}{\partial x} = r - i, \quad (18.8)$$

представляющее простейшую 1D модель кинематической волны для прямоугольной конфигураций поверхности склона.

Классической является постановка задачи, в которой продолжительность выпадения осадков ограничена временем T , т. е.

$$r(x, t) = r > 0, \quad 0 \leq t < T; \quad r(x, t) = 0, \quad t > T, \quad (18.9a)$$

при нулевых граничных условиях

$$h(x, 0) = 0, \quad 0 \leq x \leq L; \quad h(0, t) = 0, \quad t \geq 0. \quad (18.9б)$$

Решение задачи складывается из ряда частных решений, получаемых методом характеристик, которые увязываются с различными режимами формирования профиля воды на наклонной плоскости (Rumynin, 2015).

В простейшем случае ($i = 0$ — непроницаемое основание склона) уравнению (18.8) отвечает характеристическое уравнение

$$\frac{dt}{1} = \frac{dx}{\alpha n h^{n-1}} = \frac{dh}{r}. \quad (18.10)$$

Дальнейший анализ ограничим случаем растущего гидрографа (рис. 18.6), полагая $t \leq T$.

Пусть смещение произвольной точки x_0 на свободной поверхности потока жидкости, движущейся вниз по наклонной прямоугольной плоскости с момента начала осадков, $t = 0$, будет $x - x_0$. В течение этого времени $t(x, x_0)$ глубина потока h увеличивается от 0 до значения $h(x, x_0)$, которое можно получить путем интегрирования второго уравнения в системе (18.10):

$$h(x, x_0) = \left(\frac{r}{\alpha} (x - x_0) \right)^{1/n}. \quad (18.11)$$

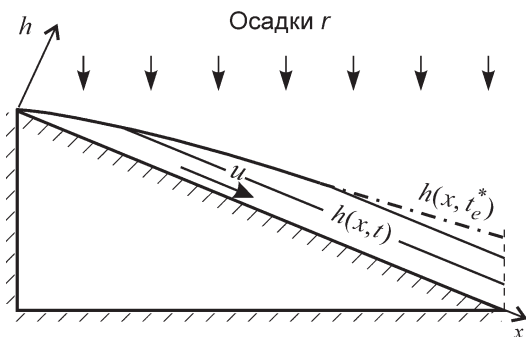


Рис. 18.6. Концептуальное представление формирования поверхности потока воды на наклонной однородной поверхности.

$h(x, t)$ — глубина потока $t < t_e^*$; $h(x, t_e^*)$ — равновесный профиль ($t \geq t_e^*$).

Подставляя (18.11) в первое уравнение (18.10) и интегрируя его от 0 до t , получаем характеристику:

$$t(x, x_0) = r^{-1} \left[\frac{r}{\alpha} (x - x_0) \right]^{1/n}. \quad (18.12)$$

Другими словами, функция h изменяется вдоль характеристики (18.12) согласно (18.11). Эта функция $t(x, 0)$ представляет собой характеристическую кривую основного потока, которая возникает в верхней части склона в начале дождя. Она также называется характеристикой равновесия, поскольку обозначает время достижения стационарного профиля при постоянных осадках (см. далее).

Теперь, объединяя (18.11) и (18.12), получаем соотношение:

$$h(t) = rt, \quad (18.13)$$

откуда следует линейная зависимость глубины h от времени процесса t ; область применимости (18.13) определяется условием гидродинамического равновесия слоя воды на склоне и периодом осадков.

Предположим, что продолжительность осадков T достаточна для того, чтобы гидродинамическая волна достигла зоны разгрузки потока $x = L$, т. е. $T > t_e^*$, где t_e^* — время формирования равновесного профиля потока. Согласно (18.13), глубина воды в любой точке (любое поперечное сечение потока) увеличивается с постоянной скоростью $dh/dt = r$, которая не зависит от x . Такой режим с изменяющимся во времени расходом, но постоянным вдоль направления x , можно наблюдать на любом участке потока до тех пор ($t = t_e$), пока граничная волна, возникающая на водоразделе, не достигнет этого участка, т. е.

$$t_e = t(x, 0) = r^{-1} \left(\frac{rx}{\alpha} \right)^{1/n} \quad (18.14)$$

(см. 18.12 при $x = x_0 = 0$).

Время t_e называется временем концентрации — равновесия, необходимым для того, чтобы на непроницаемой поверхности склона было достигнуто стационарное состояние при постоянной (избыточной) интенсивности осадков. Для времени, когда равновесие достигается по всему склону длиной L , время концентрации

$$t_e^* = t(L, 0) = r^{-1} \left(\frac{rL}{\alpha} \right)^{1/n} \equiv \frac{h(L, 0)}{r}. \quad (18.15)$$

Начиная с момента $t = t_e$ в точке x , а также в верхней области $(0, x)$ поток является стационарным и характеризуется нарастанием расхода в направлении x :

$$q = q(x) = rx. \quad (18.16)$$

Уравнение характеристики для любой точки $t = t_0 > 0$ принимает вид

$$t = t_0 + r^{-1} \left(\frac{rx}{\alpha} \right)^{1/n}, \quad (18.17)$$

и поверхность потока в этом случае описывается степенной функцией

$$h(x) = \left(\frac{rx}{\alpha} \right)^{1/n}. \quad (18.17a)$$

Формализуя приведенные выше рассуждения, мы можем записать решение задачи, которое соответствует переходному периоду формирования волны ($t < t_e$) и установившейся фазе процесса ($t_e \leq t \leq T$), в обобщенном виде:

$$h = \begin{cases} h(t) = rt, & 0 \leq t \leq t_e \leq T, \\ h(x) = rt_e, & t_e \leq t \leq T. \end{cases} \quad (18.18)$$

Аналогичным образом могут быть получены решения для временного диапазона $t > T$ (Rumynin, 2015).

18.4.2.2. 1D модель миграции растворенного вещества в склоновом потоке

Перепишем исходную систему уравнений массового (18.4) и водного (18.3) баланса для случая одномерного потока, формирующегося на проницаемой поверхности почвенного склона (полоса единичной ширины, $B = \text{const} = 1$). Для этого положим $A = Bh$, $Q = Bq$, а функции источников-стоков определим как

$$F_s = rBC_r - iBC + j_D B, \quad (18.19a)$$

$$F_w = rB - iB. \quad (18.19b)$$

В результате получаем систему из двух одномерных уравнений:

$$\frac{\partial hC}{\partial t} + \frac{\partial qC}{\partial x} = j_D - iC + rC_r = 0, \quad (18.20)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = r - i. \quad (18.21)$$

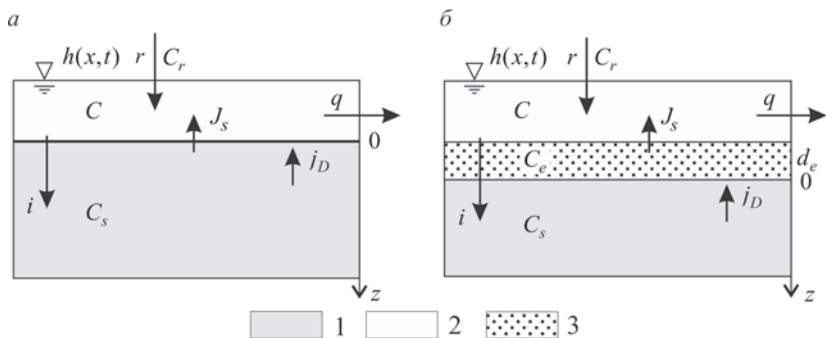


Рис. 18.7. Концептуальные модели массообмена на контакте сред (вода—почва).

a — модель пограничного слоя $j_D = k_e(C_s - C)$; b — модель слоя смешения $j_D = k_e(C_e - C)$. $J_s = i_D - iC$ — суммарный массовый поток. 1 — почва, 2 — вода, 3 — слой смешения.

В такой постановке задачи учитывается привнос вещества атмосферными осадками и его потеря за счет инфильтрации раствора в почву, а также источника вещества, характеризующего диффузионный обмен с почвой j_D [$\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$]; здесь C_r — содержание вещества в атмосферных осадках [ML^{-3}].

После образования слоя воды на поверхности происходит процесс ее насыщения веществами, содержащимися на контакте сред или в почвенном растворе. Основные взаимодействия в период осадков происходят в тонком поверхностном слое толщиной не более нескольких миллиметров. Это объясняет высокую чувствительность процесса к пространственным изменениям характеристик почвы и ландшафта и затрудняет изучение его физических параметров в экспериментах.

Массообмен на поверхности раздела почва—вода определяется: процессами диффузии и сорбции—десорбции, а также турбулентностью потока, способствующей отделению частиц почвы с поверхности за счет механического воздействия на почву (см. рис. 18.3). Математическая формализация процесса может базироваться на двух модельных подходах (рис. 18.7):

- на модели пограничного слоя;
- на модели слоя смешения конечной емкости.

Эти модели основаны на допущениях, которые чаще всего являются рабочими гипотезами, нуждающимися в лабораторных и полевых подтверждениях.

Модель пограничного слоя (рис. 18.7, a) ассоциируется с двумя сценариями высвобождения химических соединений с за-

грязненной поверхности: а) поступление растворенных веществ из порового раствора в свободный водный поток (первый сценарий); б) растворение кристаллических химических веществ, осажденных на поверхности почвы (второй сценарий). Первый сценарий предполагает, что поток растворенных веществ пропорционален разности концентраций растворенных веществ в почвенных и поверхностных водах; второй сценарий предполагает, что поток растворенного вещества контролируется дефицитом насыщения раствора. С математических позиций оба сценария подобны — дают одну и то же форму записи для массового потока:

$$j_D = k_e(C_s - C), \quad (18.22)$$

где $C = C(0, t)$ — концентрация вещества в склоновой воде; C_s — концентрация вещества в почвенном растворе на границе раздела почва—вода (первый сценарий) или растворимость химического вещества в воде (второй сценарий) [ML^{-3}]; k_e — коэффициент обмена между поверхностью почвы и потоком воды [LT^{-1}], структура которого для двух характерных гидродинамических режимов потока воды (ламинарного или турбулентного) может быть получена из теории пограничного слоя. Значение коэффициента массообмена зависит от ряда факторов, в том числе от диффузии растворенного вещества в воде, перемешивания, вызванного кинетической энергией осадков, и других параметров потока, таких как глубина потока и средняя скорость.

При выраженной кинетике переноса химических веществ из поровой воды (или с поверхности почвы) в водный поток, описываемой уравнением (18.22), исходная система уравнений (18.20), (18.21) сводится к одному дифференциальному уравнению:

$$h \frac{\partial C}{\partial t} + \alpha h^n \frac{\partial C}{\partial x} - k_e(C_s - C) - r(C_r - C) = 0. \quad (18.23)$$

В этом анализе концентрация C_s считается постоянной во времени, и без потери общности мы можем далее принять $C_r = 0$.

Рассмотрим поведение функции концентрации в условиях равновесных и частично-равновесных профилей глубины воды ($t_e^* < t_{se}^* < T$). Уравнение (18.23) соответствует характеристической системе уравнений:

$$\frac{dx}{\alpha h^n} = \frac{dt}{h} = \frac{dC}{k_e(C_s - C) - rC}. \quad (18.24)$$

Попытки получить решение уравнения (18.24) с нулевым начальным условием ($h(x, t = 0) = 0$) методом характеристик сталкиваются с проблемой сингулярности. Чтобы преодолеть эту проблему, зададимся начальной глубиной воды ($h(x, 0) = h^0$), которая может быть выбрана произвольно (Rivlin, Wallach, 1995).

Теперь в области линейного роста функции h со временем

$$x > \frac{\alpha}{r} [(rt + h^0)^n - h^{0n}], \quad (18.25)$$

уравнение характеристических кривых принимает вид:

$$x - x_0 = \frac{\alpha}{nr} [(h^0 + rt)^n - h^{0n}]. \quad (18.26)$$

Изменение концентрации вдоль этих характеристик можно описать вторым уравнением системы (18.24), которое удобно представить в безразмерном виде

$$(\tau + h^0) \frac{d\bar{C}}{d\tau} + (1 + \beta)\bar{C} - \beta = 0, \quad (18.27)$$

где $\bar{C} = C/C_s$, $\tau = rt$, $\beta = k_e/r$. Решая это уравнение с начальным условием $\bar{C}(\tau = 0) = \bar{C}_0$, получаем:

$$\bar{C} = \frac{\beta}{1 + \beta} + \left(\bar{C}_0 - \frac{\beta}{1 + \beta} \right) \left(\frac{h^0}{\tau + h^0} \right)^{1 + \beta}, \quad \beta = k_e/r. \quad (18.28)$$

Очевидно, что предел $h^0 \rightarrow 0$ ведет к стационарному решению

$$\bar{C} = \frac{\beta}{1 + \beta}, \quad (18.29)$$

в области $x \geq (\alpha/r)(rt)^n$, где, несмотря на неустановившийся характер течения, концентрация остается постоянной как во времени, так и в пространстве.

В области стационарного распределения функции глубины воды $h(x) = [rx/\alpha + (h^0)^n]^{1/n}$, т. е. когда условие

$$x \leq \frac{\alpha}{r} [(rt + h^0)^n - h^{0n}] \quad (18.30)$$

выполнено, уравнение для кривых растворенного вещества принимает вид

$$\frac{rx}{\alpha} = \left[\left(\frac{rx_0}{\alpha} + h^{0n} \right)^{1/n} + \frac{rt}{n} \right]^n - h^{0n}. \quad (18.31)$$

Из-за кинетики процесса растворения распределение концентрации существует как в области, лежащей ниже кривой предельной характеристики для растворенного вещества (18.31), так и в области выше этой характеристики:

$$t(x, t_0) = t_0 + \frac{n}{r} \left[\left(\frac{rx}{\alpha} + h^{0n} \right)^{1/n} - h^{0n} \right]. \quad (18.32)$$

Это распределение описывается обыкновенным дифференциальным уравнением

$$(h_x^n + h^{0n}) \frac{d\bar{C}}{dh_x^n} + (1 + \beta)\bar{C} - \beta = 0, \quad h_x^n = \frac{rx}{\alpha}, \quad (18.33)$$

что следует из базовой системы уравнений 18.24, записанной с учетом начальной глубины воды $h = [rx/\alpha + (h^0)^n]^{1/n}$.

Решая это уравнение, получаем:

$$\bar{C} = \frac{\beta}{1 + \beta} \left[1 - \left(1 - \frac{1 + \beta}{\beta} \bar{C}^0 \right) \left(\frac{h^{0n}}{h_x^n + h^{0n}} \right)^{1 + \beta} \right],$$

$$\bar{C} (h_x^n = 0) = \bar{C}^0. \quad (18.34)$$

Из этого решения видно, что при $h^0 \rightarrow 0$ уравнение (18.33) имеет единственное стационарное решение, совпадающее с (18.29) для любой характеристики (18.32), заданной параметром t_0 , т. е. концентрация в области $t_e^* < t < T$ также является стационарной функцией постоянной по пространству.

Пример. Полученный выше результат может быть использован для оценки времени реабилитации загрязненного участка применительно к условиям равномерного распределения на почве (в некоторый начальный момент времени) конечной массы загрязнителя с плотностью N_0 [МЛ⁻²]. Действительно, поскольку в идеализированных условиях непрерывного выпадения осадков ($t < T$) концентрация C постоянна (18.29), кинетическое уравнение

$$-\frac{\partial N}{\partial t} = k_e(C_s - C), \quad (18.35)$$

становится

$$\frac{dN}{dt} = -r \frac{\beta C_s}{1 + \beta}. \quad (18.36)$$

Его интегрирование позволяет нам определить время, необходимое для вымывания всей массы солей с поверхности склона:

$$t^* \approx \frac{1 + \beta}{\beta r} \frac{N_0}{C_s}, \quad (18.37)$$

где N_0 — начальная плотность загрязнения поверхности почвы [ML⁻²].

С решением для периода падающего гидрографа $t > T$ можно ознакомиться в работе (Rumynin, 2015).

Модель обмена со слоем смешения основывается на допущении о существовании в верхней части почвенного разреза узкого активного слоя (рис. 18.7, б), в котором происходит взаимодействие (смешение) дождевой воды с почвенными водами (Gao et al., 2004). Толщина слоя смешения, d_e , принимается постоянной, и при самой общей постановке задачи допускается попадание химических веществ в поверхностный сток из подстилающих слоев почвы. Величина d_e , как правило, не превышает 10 мм и, согласно оценкам разных авторов, чаще всего составляет первые миллиметры.

Кинетическая модель с активным слоем может быть представлена следующей системой уравнений баланса растворенного вещества в склоновом потоке:

$$\frac{\partial hC}{\partial t} + \frac{\partial qC}{\partial x} = k_e(C_e - C) - iC + rC_r = 0, \quad (18.38)$$

$$\frac{\partial \theta d_e C_e}{\partial t} = k_e(C - C_e) + i(C - C_e), \quad (18.39)$$

где C_e — концентрация в слое смешения; k_e — коэффициент обмена; θ — влажность почвы при полном насыщении.

Продифференцируем левую часть уравнения (18.38), принимая во внимание уравнение водного баланса потока (18.5). В итоге получаем

$$h \frac{\partial C}{\partial t} + q \frac{\partial C}{\partial x} = -k_e(C - C_e) + r(C_r - C). \quad (18.40)$$

Сложив левые и правые части уравнений (18.40) и (18.39), приходим к уравнению

$$h \frac{\partial C}{\partial t} + q \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial \theta d_e C_e}{\partial t} = i(C - C_e) + r(C_r - C). \quad (18.41)$$

При активном перемешивании воды в двух контактирующих средах концентрации выравниваются, т. е. $C = C_e$, что позволяет переписать (18.41) в форме

$$(h + \theta d_e) \frac{\partial C}{\partial t} + q \frac{\partial C}{\partial x} = r(C_r - C). \quad (18.42)$$

В случае равновесной сорбции параметр θ заменяется суммой $\theta + K_d \rho_b$; K_d — равновесный коэффициент сорбционного распределения; ρ_b — плотность почвы. Возможность явного учета сорбции является важным преимуществом этой модели по сравнению с моделью пограничного слоя.

Уравнение (18.42) должно решаться совместно с уравнением непрерывности водного потока (18.5). Частные решения можно найти в работе (Rumynin, 2015).

Модели с распределенными параметрами требуют детальной информации о пространственном распределении параметров системы и математически являются более сложными, чем рассматриваемые ниже модели с сосредоточенными параметрами.

18.4.3. Модели с сосредоточенными параметрами

Использование этих моделей оправдано в случаях, когда содержание растворенных компонентов в склоновом потоке (или в замыкающем створе бассейна — см. далее) в большей степени определяется кинетикой попадания радионуклидов с загрязненной поверхности почвы в поверхностный сток, нежели динамикой поверхностного потока воды (изменениями его скорости и мощности). Такие модели позволяют описать формирование слоя воды на поверхности при дождевых осадках или снеготаянии, инфильтрацию (поступление дождевых вод в почву и грунтовые воды), а также миграцию вещества (радионуклидов) в поверхностных и подземных водах. Инерция водного потока, приводящая к временной задержке разгрузки склонового (водосборного) потока по отношению к избыточному дождевому питанию, может быть учтена через эффективные параметры в линейных или нелинейных кинетических уравнениях, или же может полностью не приниматься во внимание, если разгрузка склонового (водосборного) потока принимается мгновенной — происходящей одновременно с дождевыми выпадениями.

Математическое описание процесса в макроскопическом масштабе основано на решении системы двух взаимосвязанных уравнений: 1) уравнения неразрывности (в рамках предпосылки сосредоточенной емкости) применительно к участку склона или

всему водосборному суб-бассейну, и 2) уравнения массового баланса (также в рамках предпосылки сосредоточенной емкости). «Потоковый» (источник-сток) член в дифференциальных уравнениях учитывает высвобождение растворенных веществ (радионуклидов) из почвы в ответ на дождевые события. В такой макроскопической постановке предполагается, что все гидрологические функции (избыток дождевых выпадений, формирующий слой воды на поверхности почвы, и содержание растворенных веществ), а также параметры, контролирующие гидродинамику потока и условия его разгрузки в гидросеть, как и химический обмен между склоновым стоком и почвой, представлены значениями, усредненными для склона или всей площади водосборного бассейна.

18.4.3.1. Уравнение водного баланса для склонового потока

Предположим, что в любой момент t приращение расхода склонового потока $Q_x(t)$ вдоль направления потока x (рис. 18.8) является постоянной величиной (Agnese et al. 2001). Это приближение приводит к дифференциальному отношению для скорости потока в виде:

$$\frac{\partial Q_x(t)}{\partial x} = q(t). \quad (18.43)$$

Заметим, что физический смысл характеристики $q = q(t)$ [LT^{-1}] (скорость) отличается ранее использованной величины $q = q(x, t)$ [L^2T^{-1}] — расход потока в задаче о кинематической волне (см. разд. 18.4.2).

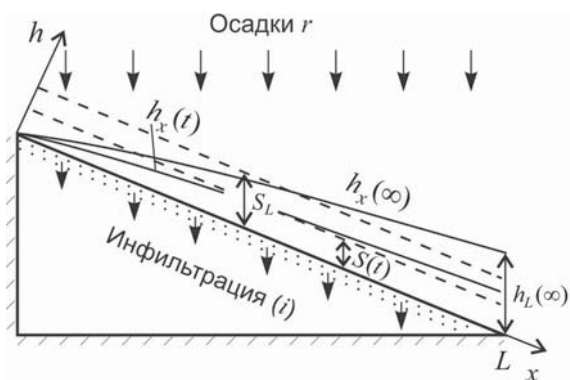


Рис. 18.8. Формирование склонового потока.

$h_x(\infty)$ и h_L соответствуют условиям $r_e = \text{const}$.

В предпосылке (18.43) уравнение неразрывности (18.5) для произвольной зависящей от времени интенсивности избыточных осадков r_e (18.6)

$$\frac{\partial h_x(t)}{\partial t} + \frac{\partial Q_x(t)}{\partial x} = r_e(t), \quad (18.44)$$

преобразуется к виду

$$\frac{\partial h_x(t)}{\partial t} = r_e(t) - q(t). \quad (18.45)$$

где $h_x(t)$ — глубина слоя воды на поверхности.

Интегрирование уравнения (18.43) дает $Q_x(t) = q(t)x$, так что расход потока на склоне в точке разгрузки потока ($x = L$) равен $Q_L(t) = q(t)L$. Подставляя это выражение в формулу (18.7), которая связывает поток воды и глубину поверхностных вод, получим

$$h_x(t) = \left(\frac{Q_x(t)}{\alpha} \right)^{1/n} = \left(\frac{q(t)x}{\alpha} \right)^{1/n}. \quad (18.46)$$

Очевидно, что в установившемся режиме ($r_e = \text{const}$) мы имеем $q(\infty) = r_e$ и $h_x(\infty) = (r_e x / \alpha)^{1/n}$, что соответствует приближению потока кинематической волны (разд. 18.4.2). Предположим, что существует эффективная глубина потока, $S(t)$, которая характеризует количество воды, которое временно удерживается поверхностью почвы на единицу площади (рис. 18.8) и может рассматриваться как среднее значение $h_x(t)$,

$$S(t) = \frac{1}{L} \int_0^L h_x(t) dx = \left(\frac{q(t)}{\mu} \right)^{1/n}, \quad (18.47)$$

$$\mu = \frac{\alpha}{L_e}, \quad L_e = \left(\frac{n}{1+n} \right)^n L, \quad (18.47a)$$

где μ можно рассматривать как константу скорости, характеризующую замедленное стекание воды со склона [$L^{1-n}T^{-1}$]; L_e — эффективная длина склона [L]. Соотношение (18.47) может быть легко получено умножением левой и правой частей уравнения (18.46) на dx и интегрирования от 0 до L . Теперь уравнение (18.45) приобретает вид

$$\frac{dS}{dt} = r_e - q, \quad q = \mu S^n. \quad (18.48)$$

Как видно, особенностью уравнения (18.48) является нелинейная зависимость отклика потока на склоне, характеризуемого функцией S , на избыток осадков r_e .

18.4.3.2. Уравнения массового баланса

Ранее мы описали перенос растворенных веществ в воде, протекающей по поверхности почвы, используя решения обобщенной системы уравнений (18.20)—(18.21), полученные методом характеристик. В этом случае мы учитывали различия между поведением функций и в разных зонах потока, и в разных временных интервалах, т. е. функция концентрации $C(x, t)$ определялась несколькими частичными решениями. Более удобными для практического применения могут оказаться отношения, полученные на основе осредненных характеристик потока. В такой постановке концентрация растворенного вещества в воде, контактирующей с поверхностью, также является усредненной функцией.

В качестве примера рассмотрим модель водного и массового баланса, в которой обмен растворенного вещества на границе раздела сред определяется наличием активного слоя смешения, характеризуемого емкостным параметром θd_e и кинетическим коэффициентом k_e :

$$\frac{dSC}{dt} = k_e(C_e - C) - iC - qC + rC_r + W_s, \quad (18.49)$$

$$\frac{d\theta d_e C_e}{dt} = k_e(C - C_e) + i(C - C_e), \quad (18.50)$$

где S — эффективная глубина слоя стока; W_s — источник/сток. Определяя dS/dt из уравнения (18.48), преобразуем (18.49) к виду

$$S \frac{dC}{dt} = k_e(C_e - C) - rC + rC_r + W_s. \quad (18.51)$$

Подставляя в это уравнение потоковый член $k_e(C - C_e)$ из (18.50), приходим к уравнению

$$S \frac{dC}{dt} + \frac{d\theta d_e C_e}{dt} = i(C - C_e) - r(C - C_r) + W_s. \quad (18.52)$$

Предположим, что скорость кинетического обмена достаточно большая ($k_e \rightarrow \infty$), и процесс быстро достигает равновесного состояния, когда можно считать $C_e = C$. В этом случае (18.52) вырождается в уравнение

$$(S + \theta d_e) \frac{dC}{dt} = -r(C - C_r) + W_s. \quad (18.53)$$

Концепция модели склонового потока с сосредоточенными параметрами может быть применена для описания процессов в масштабе всей водосборной площади. В этом случае мы приходим к модели «резервуарного» типа, в которой под величиной $S(t)$ понимается осредненная толщина слоя воды, удержива-

емого водосбором в момент времени t . О соответствующих расчетных подходах применительно к анализу радионуклидного транспорта речь пойдет в следующих разделах учебника.

18.5. Расчетная модель для прогноза миграции радионуклидов

Рассматриваемая здесь модель описывает перенос радионуклидов в пределах водосборного бассейна в условиях переменных дождевых осадков, приводящих к формированию слоя подвижной воды на почве и нисходящего инфильтрационного потока, питающего грунтовые воды (рис. 18.9), т. е. подземные воды также рассматриваются в качестве носителя радиоактивного загрязнения. Система, включающая две подвижные фазы, рассматривается здесь в предпосылке существования сосредоточенных параметров, описывающих основные гидрологические процессы, что существенно облегчает постановку миграционной задачи транспорта радионуклидов и делает практически выполнимым долгосрочный прогноз перераспределения радионуклидов между приповерхностной зоной и водоносным горизонтом при ограниченном наборе гидрогеологических параметров.



Рис. 18.9. Схематическое представление двухкомпонентной модели сосредоточенной емкости для поверхностного/подземного стока.

При этом можно пренебречь временем миграции частиц в системе поверхностных водотоков по сравнению с временем нахождения частиц в поверхностном стоке внутри водосборного суб-бассейна.

18.5.1. Баланс радионуклидов в почвенном слое

Уравнение неразрывности, связывающее изменение накопленного объема воды в пределах водосборного бассейна в терминах слоя поверхностного стока S_1 , с приходными и расходными характеристиками водного баланса (рис. 18.10), может быть записано таким образом:

$$\frac{dS_1}{dt} = r_e - q_1, \quad (18.54)$$

где r_e — избыточные стокообразующие осадки (хортоновская модель 18.6); $q_1 = Q_1/F$ — удельный расход разгрузки потока (расход воды Q_1 , стекающей с единицы площади водосборного бассейна F); все потоковые компоненты имеют размерность скорости [м/сут]. Уравнение (18.54) подобно уравнению осредненного потока на склоне (18.48).

Система уравнений массового баланса, учитывающая радиоактивный распад, сорбцию и обмен радионуклидами между свободным потоком и почвой, имеет вид

$$\frac{dS_1 C_1}{dt} + \lambda S_1 = k_e (C_e - C_1) - i C_1 - q C_1 + r C_r + W_s, \quad (18.55)$$

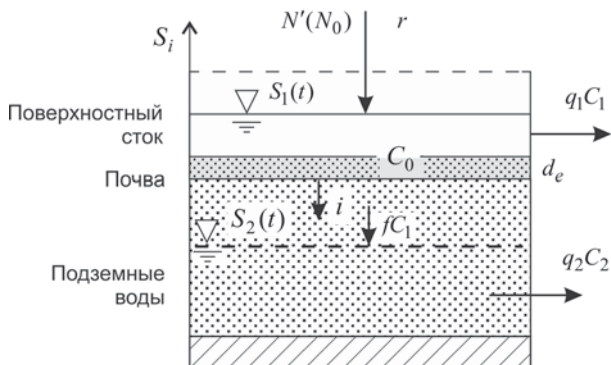


Рис. 18.10. Общая концепция двухкомпонентной модели сосредоточенной емкости.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\theta d_e C_e + N_1) + \theta d_e \lambda C_e + \lambda N_1 = \\ = k_e(C_1 - C_e) + i(C_1 - C_e), \end{aligned} \quad (18.56)$$

где C_1 — удельная активность радионуклидов в поверхностном стоке [Бк/м³]; C_e — концентрации в слое смешения [Бк/м³]; λ — константа радиоактивного распада [сут⁻¹]; N_1 — удельная активность радионуклидов в сорбированном состоянии в слое смешения на единицу площади [Бк/м²]; k_e — коэффициент обмена между потоком и почвой [м/сут]; θ — полная влагоемкость почвы; N' — удельная плотность выпадения радионуклидов на поверхность [Бк/м²сут]. Система уравнений (18.55)—(18.56) подобна уравнениям (18.49)—(18.50), записанным для одномерного склонового потока.

Упростим систему уравнений (18.55)—(18.56), полагая, что сорбция подчиняется линейной изотерме $N_1 = K_{d1} \rho_b d_e C_1$ (K_{d1} — коэффициент сорбционного распределения в почве [см³/г]; ρ_b — плотность почвы в сухом состоянии [г/см³]), а производная $dS_1 C_1 / dt = C_1 dS_1 / dt + S_1 dC_1 / dt$ может быть определена из уравнения (18.54), где избыток осадков r_e определяется формулой Хортонa (18.6). Промежуточным действием является операция сложения левых и правых частей уравнений (18.55) и (18.56). Наконец, предпосылка о равенстве концентраций C_1 и C_e , достигаемом при высоких коэффициентах обмена между свободным раствором и почвой, позволяет записать:

$$\begin{aligned} (\theta d_e R_1 + S_1) \frac{dC_1}{dt} + \lambda (\theta d_e R_1 + S_1) C_1 = \\ = W_s - r(C_1 - C_r), \end{aligned} \quad (18.57)$$

где $R_1 = 1 + K_{d1} \rho_b / \theta$ — фактор сорбционной задержки. В общем случае S_1 является функцией времени.

Сумма в скобках (18.57), $\theta d_e R_1 + S_1(t)$, указывает на то, что дождевая и почвенная воды перемешиваются мгновенно и полностью. Перенос радионуклидов с земной поверхности в поток воды на поверхности происходит за счет высвобождения диссипационной энергии дождевых капель в момент их соприкосновения с частицами почвы.

Частное решение системы уравнений (18.57), (18.54) для условий миграции стабильного компонента ($\lambda = 0$) при аппроксимации дождевого гидрографа $r(t)$ ступенчатой функцией можно найти в работе (Rumynin, 2015). Это решение учитывает

растущий и падающий гидрографы поверхностного стока в периоды выпадения дождевых осадков различной интенсивности или в периоды их отсутствия. При этом учитывается возможность как полного осушения поверхности в засушливые периоды, так и наличие на ней слоя воды, сформировавшегося в течение n -го периода, предшествующего расчетному $n + 1$ периоду выпадения порции дождевых осадков.

На практике такая детализация процесса, обусловленная необходимостью учета конечной скорости реакции потока q_1 на изменение интенсивности атмосферных осадков, может оказаться избыточной. При малых временах пребывания и удержания воды на поверхности исследование поведения гидрологической системы можно ограничить анализом, основанным на принципе последовательной смены ее равновесных состояний. В соответствии с этим принципом считается, что отклик расхода разгрузки q_n (цифровой индекс опускаем) на дождевые осадки является мгновенным, т. е. $q_n = r_{en}$. Такое состояние сохраняется до следующего дождевого пакета, когда наступает новое равновесие ($q_{n+1} = r_{en+1}$), или в случае сухого периода $q_{n+1} = r_{en+1} = 0$. С математических позиций такое поведение системы предполагает $dS_1/dt = 0$ или $S_1 = \text{const}$. Поскольку обычно $\theta d_e R_1 \gg S_1$, уравнение (18.57) при $CR = 0$ может быть представлено в виде:

$$\frac{dC_1}{dt} = \frac{W_s}{\theta d_e R_1} - \left(\lambda + \frac{r}{\theta d_e R_1} \right) C_1, \quad (18.58)$$

удобном для дальнейшего физико-математического анализа.

18.5.2. Базовые решения для концентрационной функции в слое смешения

В контексте настоящей главы, основной интерес представляют две типовые ситуации. Первая отвечает условиям НЭ АЭС, при которой основной характеристикой воздействия является удельная плотность выпадения радионуклидов на поверхность N' — источник активности, действующий в течение всего периода эксплуатации АЭС (десятки лет). Вторая — условиям проектных или запроектных аварий, при которых происходит мгновенный подъем активности, в слое смешения (d_e) до значения, определяемого плотностью загрязнения поверхности N_0 (активность радионуклидов на единицу площади сразу после аварии).

Решение уравнения (18.58) при $W_s = N'$ и условии $C_1(t=0) = C_{10}$ (начальная активность/концентрация) имеет вид

$$C_1 = C_{10} + \left(\frac{N'/\theta d_e R_1}{\lambda + r / d_e R_1} - C_{10} \right) \left[1 - \exp(-\lambda t) \exp\left(-\frac{rt}{\theta d_e R_1}\right) \right], \quad (18.59)$$

($r = \text{const}$). Асимптотика решения (18.59) для малых моментов времени ($t \rightarrow 0$) имеет вид

$$C_1 \approx \frac{N' t}{\theta d_e R_1}, \quad (18.59a)$$

что свидетельствует о примерно линейном во времени накоплении радионуклидов в почвенном слое.

Для условий аварийного осаждения, когда «фоновым» потоком радионуклидов можно пренебречь ($N' = 0$), интегрированы уравнения (18.58) выполняется для начальной концентрации

$$C_1(t=0) = C_{10} = \frac{N_0}{(\theta + K_{d1\rho_b}) d_e} = \frac{N_0}{\theta d_e R_1}, \quad (18.60)$$

что дает

$$C_1 = C_{10} \exp(-\lambda t) \exp\left(-\frac{rt}{\theta d_e R_1}\right). \quad (18.61)$$

Формально говоря, решения (18.59) и (18.61) могут быть обобщены на случай переменных во времени дождевых осадков. Если $r_n - r_{n-1} = \pm \Delta r_n$, где $\Delta r_n = \text{const}$ в интервале $t_n - t_{n-1}$, то концентрация в слое смешения C_{1n} в момент t_n может быть рассчитана исходя из концентрации C_{1n-1} в предшествующий период t_{n-1} :

— для первого сценария (НЭ):

$$C_{1n} = C_{1n-1} + \left(\frac{N'/\theta d_e R_1}{\lambda + r_n/\theta d_e R_1} - C_{1n-1} \right) \times \left[1 - \exp\left(-\left(\lambda + \frac{r_n}{\theta d_e R_1}\right)(t_n - t_{n-1})\right) \right]; \quad (18.62)$$

в случае переменных осадков в периоды, $r_n = 0$, в расчетах должно учитываться накопление активности за счет «сухого» осаждения радионуклидов $C_n = C_{n-1} + N'(t_n - t_{n-1})/\theta d_e R_1$;
 — для второго сценария (аварийный выброс):

$$C_{1n} = \exp(-\lambda t) C_{1n-1} \exp\left(-\frac{r_n(t_n - t_{n-1})}{\theta d_e R_1}\right) = \\ = C_{1n-1} \exp\left(-\left(\lambda + \frac{r_n}{\theta d_e R_1}\right)(t_n - t_{n-1})\right). \quad (18.63)$$

Из структуры решений видно, что в засушливый период ($r_n = 0$), изменение активности обусловлено радиоактивным распадом.

В свете оценки воздействия площадного загрязнения на качество поверхностных и подземных вод необходима дифференциация потока r на компоненты поверхностного стока q_1 и инфильтрации i_1 , о чем пойдет речь в разд. 18.5.4.

18.5.3. Миграция радионуклидов с подземным стоком

Поверхностный сток часто сопровождается латеральным движением воды в грунтовом водоносном горизонте в форме подземного стока (рис. 18.10). Это может быть зона насыщения в нижней части почвенного разреза. На радиоактивно загрязненных площадях подземный сток имеет радиоактивную компоненту, обусловленную смешением «старой» («чистой») воды, находившейся в почве до начала выпадений, и «новой» воды, представляющей собой инфильтрационные воды, содержащие радионуклиды.

Соотношение между расходом разгрузки подземных вод q_2 и расходом инфильтрационного питания f горизонта может быть представлено в виде линеаризованного уравнения фильтрации подземных вод с сосредоточенными параметрами (Arnold et al., 1993)

$$\frac{dq_2}{dt} = \mu_2(f - q_2) \quad (q_2 = \mu_2 S_2), \quad (18.64)$$

где μ_2 — коэффициент скорости дренирования грунтового водоносного горизонта [сут^{-1}]; для линеаризованного уравнения фильтрации подземных вод (Arnold et al., 1993; De Rooij, 2013)

$\mu_2 \approx (3 - 10)T/\mu^* L_0^2$ (T — водопроводимость, м²/сут; μ^* — водоотдача, безразмерная величина; L_0 — средний размер бассейна в направлении основных траекторий движения поверхностных и подземных вод — от водораздельной линии, м); $S_2 = S_2(t)$ — аккумулярованный слой воды в горизонте.

Для описания миграции радионуклидов необходимо записать уравнение массового баланса

$$\phi_2 \frac{dS_2 C_2}{dt} + \frac{dN_2}{dt} + \lambda S_2 \phi_2 C_2 + \lambda N_2 = f C_1 - q_2 C_2, \quad (18.65)$$

где ϕ_2 — активная (дренируемая) пористость; концентрация C_1 определяется из решений (18.59) или (18.60); N_2 — текущая активность радионуклида в сорбированном состоянии в грунтовой воде на единицу площади [Бк/м²].

Используя линейную сорбционную модель, $N_2 \equiv K_{d2} \rho_b S_2 C_2$, можно преобразовать уравнение (18.65) к виду

$$\phi_2 R_2 \frac{dS_2 C_2}{dt} + \lambda \phi_2 R_2 S_2 C_2 = f C_1 - q_2 C_2, \quad (18.66)$$

где $R_2 = 1 + K_{d2} \rho_b / \phi_2$; K_{d2} — коэффициент сорбционного распределения для водоносных пород.

В упрощенной постановке, при больших μ_2 ($\mu_2 \rightarrow \infty$), будет выполняться равенство $q_2 = f$, и уравнение (18.65) принимает вид

$$\phi_2 R_2 S_2^0 \frac{dC_2}{dt} + \lambda \phi_2 R_2 S_2^0 C_2 = f(C_1 - C_2), \quad (18.67)$$

где S_2^0 — средняя мощность водоносного горизонта.

Обыкновенное дифференциальное уравнение (18.67) может быть решено численно относительно $C_2(t)$ при $C_1(t)$ и $f(t)$, определяемых из решения задачи формирования поверхностного стока. В этом уравнении $f C_1$ играет роль функции-источника, имеющей кусочно-однородное представление (18.62) или (18.63).

18.5.4. Модель фрагментации атмосферных осадков

Для того, чтобы воспользоваться результатами предыдущих разделов, где были получены концентрации C_1 и C_2 , в прогнозных оценках необходимо определить потоковые компоненты q и i для известной (заданной) функции r , т. е. воспользоваться

одной из гидрологических моделей генерации поверхностного стока. В этом свете может оказаться полезным опыт анализа гидрологических данных на основе «модели номерных кривых» (curve number (CN) model), разработанной Службой охраны почв США (Soil Conservation Service (SCS), USA). Эта модель, основанная на обобщении значительного объема полевых данных, относится к классу эмпирических моделей бассейнов стока и используется для прогнозирования прямого стока или инфильтрации при избыточных дождевых осадках (USDA 1986). Первые публикации, касающиеся этой модели, появились в 1949 г. Они были связаны с именами двух американских инженеров — В. Мокуса (V. Mockus,) и Л. К. Шермана (L. K. Sherman) (Plummer, Woodward, 1998).

18.5.4.1 Стандартная модель SCS-CN

В модели используется две кумулятивные функции: слой осадков, P (мм), когда дождь рассматривается как событие, *продолжительность которого и интенсивность в явном виде не учитываются*; мощность избыточного слоя осадков или прямого (поверхностного, без подземной компоненты) стока, Q (мм), который является откликом на дождевые осадки (USDA 1986; Chow et al. 1988; Boughton, 1989; Geetha et al., 2008). Область применения ограничена отдельными дождевыми событиями, которые считаются независимыми друг от друга и не влияющими на начальные условия. Хотя временная шкала в методе в явном виде отсутствует, в нем неявно присутствует масштаб, равный одним суткам, поскольку анализ гидрологического материала опирается на суточные замеры.

Авторами метода вводится понятие *потенциал поверхностного стока*, определяемое как разница двух характеристик $P - I_a$, где I_a — начальная доля осадков (initial abstraction), не участвующая в формировании поверхностного стока (мм), — параметр, отражающий тот факт, что пока $P \leq I_a$, $Q = 0$. Характеристика I_a включает кратковременные эффекты, а именно задержку осадков растительным покровом, испарение, поверхностную аккумуляцию влаги в локальных депрессиях, инфильтрационное впитывание влаги. Мощность избыточного слоя осадков или прямой поверхностный сток Q всегда меньше или равен мощности слоя осадков, P . После того как в водосборном бассейне формируется поверхностный сток, количество удерживаемой воды характеризуется величиной куммулятивной ин-

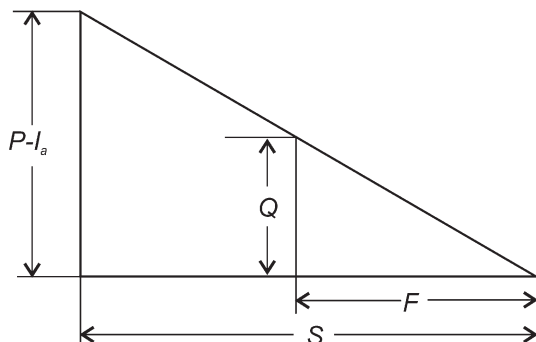


Рис. 18.11. Графическое представление «гипотезы пропорциональности» (18.68) в SCS-CN модели.

фильтрации, F [мм]. Значение F меньше или равно максимальной толщине слоя воды, удерживаемой водосборным бассейном, S [мм] (максимальная величина впитывания).

В соответствии с исходным постулатом отношение фактических значений Q и F к потенциально возможным, $P - I_a$ и S , должны быть равны, т. е.

$$\frac{Q}{P - I_a} = \frac{F}{S}. \quad (18.68)$$

Пропорция (18.68) может быть представлена графически (рис. 18.11).

Решая уравнение (18.68) совместно с балансовым уравнением

$$P = Q + I_a + F \quad (18.69)$$

относительно Q , получаем

$$Q = \frac{(P - I_a)^2}{P - I_a + S}, \quad \text{при } P > I_a, \quad (18.70a)$$

$$Q = 0, \quad \text{в других случаях (при } P \leq I_a). \quad (18.70b)$$

Аналогично для куммулятивной функции (при $P > I_a$):

$$F = \frac{S(P - I_a)}{P - I_a + S}. \quad (18.71)$$

В изначальной формулировке метод SCS-CN предполагает, что уравнения (18.71) выполняются в конце дождевого события (ливневых осадков), т. е. выбранный временной масштаб соответствует длительности события, обычно — длительности ливневых осадков. Сумма $F + I_a$ — это часть выпавших осадков, не перешедшая в поверхностный сток.

Обобщение значительного объема полевых данных (в основном по бассейнам стока в США) позволило прийти к выводу, что I_a может быть определено как доля потенциально заполненной водой емкости почвы:

$$I_a = \lambda_a S, \quad (18.72)$$

где в первом приближении может быть принято $\lambda_a = 0.2$.

Эмпирическая формула, полученная для оценки способности водосборного бассейна удерживать воду (maximal retaining capacity of water in a watershed), имеет вид (USDA, 1986)

$$S = 25.4 \left(\frac{1000}{CN} - 10 \right), \quad (18.73)$$

где CN — номер кривой поверхностного стока, характеризующей тип почвы, растительный покров и условия землепользования, а также некоторые другие параметры, определяющие способность водосборного бассейна удерживать воду (Erickson, Stefan, 2007). CN принимает значения от 0 (почва поглощает все выпадающие на ее поверхность осадки) до 100 (поглощение отсутствует).

В методе номерных кривых, являющемся в данном контексте элементом бассейновой модели радионуклидного транспорта, используется классификация почв по гидрологическим группам (hydrologic soil groups), в соответствии с которой можно установить минимальную величину инфильтрации. Она достигается на обнаженной почве после продолжительного ее увлажнения. Выделяют четыре гидрологические группы почв: А, В, С и D (USDA, 1986).

Группа А объединяет почвы, имеющие низкий потенциал поверхностного стока и высокие уровни инфильтрации даже при высоком увлажнении. Они представлены главным образом глубоко, хорошо и даже избыточно дренированными песками и гравийными отложениями и характеризуются довольно высокими коэффициентами фильтрации k (более 0.2 м/сут).

Группа В — это почвы со средними величинами инфильтрационной способности при высоком увлажнении, в основном почвы средне- и глубоко- и средне- и хорошо дренируемые, с текстурами от умеренно тонких до умеренно грубых ($k = 0.1—0.2$ м/сут).

**Принятые номера кривых (CN)
для разных условий землепользования (USDA, 1986)**

Вид использования земель	Группа			
	A	B	C	D
Населенный пункт	49	69	79	84
Промышленная зона	81	88	91	93
Сельхоз земли	69	78	83	87
Сады	43	65	76	82
Лес и кустарник	35	56	70	77
Луга	30	58	71	78
Болота	30	58	71	78
Вода	0	0	0	0

Группа C объединяет почвы с низкими величинами инфильтрации при высоком увлажнении, представленные в основном почвами, содержащими слой, препятствующий нисходящему движению воды, преимущественно со средней и тонкой текстурой ($k = 0.03—0.1$ м/сут).

Группа D — это почвы с высокими потенциальными значениями поверхностного стока. У них очень низкие величины инфильтрационной способности при высоком увлажнении, и они представлены преимущественно глинистыми почвами с высокой способностью к набуханию, это почвы с постоянно высоким положением зеркала грунтовых вод, почвы, содержащие вблизи поверхности глинистые прослой (k менее 0.03 м/сут).

На выбор номера кривой стока CN, наряду с группой почвы, влияют условия землепользования (табл. 18.4).

18.5.4.2. Расширение дискретной SCS-CN модели

В вышеописанной классической SCS-CN модели P и Q являются дискретными функциями, характеризующими единичное событие, с которым в данном контексте ассоциируется дождевой период. В то же время нет формальных ограничений для рассмотрения функций P , Q и F в качестве непрерывных и дифференцируемых (в области $P > I_a$) (Michel et al., 2005; Geetha et al., 2008) Их временные производные являются характеристиками удельных расходов: $r = dP/dt$ (интенсивность осадков), $q = dQ/dt$ (поверхностный сток) и $i = dF/dt$ (скорость инфильтрации). Если это так, то справедливы дифференциальные тождества

$$\frac{dQ}{dP} = \frac{dQ/dt}{dP/dt} = \frac{q}{r}, \quad \frac{dF}{dP} = \frac{dF/dt}{dP/dt} = \frac{i}{r}, \quad (18.74)$$

(в двухкомпонентной модели подразумевается $q \equiv q_1$). Отсюда получаем:

$$q = \frac{(P - I_a)(P - I_a + 2S)}{(P - I_a + S)^2} r, \quad i = \frac{S^2}{(P - I_a + S)^2} r, \\ P > I_a. \quad (18.75)$$

Здесь мы для упрощения записи опустили цифровой индекс у расхода потока $q \equiv q_1$.

В формулы (18.75) входит характеристика $P - I_a$ (эффективные осадки), которая может быть определена из (18.71):

$$P - I_a = \frac{FS}{S - F}. \quad (18.76)$$

Подставляя (18.76) в (18.75), находим

$$q = \bar{V}(2 - \bar{V})r, \quad i = (\bar{V} - 1)^2 r, \quad \bar{V} > I_a/S = \lambda_a, \quad (18.77)$$

где $\bar{V} = \frac{F}{S}$. Напомним, $S = f(\text{CN})$; более того, часто рекомендуемое значение λ_a равно 0.2. Основываясь на (18.77), легко показать, что $q(\bar{V})$ и $i(\bar{V})$ связаны дифференциальным тождеством

$$\frac{dq}{d\bar{V}} + \frac{di}{d\bar{V}} = 0. \quad (18.78)$$

Из балансового уравнения (18.69) при постоянных I_a и S следует уравнение неразрывности

$$\frac{d\bar{V}}{dt} = \frac{1}{S} (r - q). \quad (18.79)$$

Подставляя в это уравнение выражение для $q(\bar{V})$ (18.77), приходим к обыкновенному дифференциальному уравнению

$$\frac{d\bar{V}}{dt} = \frac{r}{S} (1 - \bar{V})^2. \quad (18.80)$$

Разделяя переменные и интегрируя (18.80) при $r = \text{const}$ (нулевые начальные условия), получаем решение для нахождения функции \bar{V}

$$\bar{V} = \frac{\alpha t}{1 + \alpha t}, \quad \alpha = \frac{r}{S}. \quad (18.81)$$

Нулевое начальное условие, $\bar{V}(t = 0) = 0$, подразумевает отсутствие поверхностного стока в начале дождевого события. В более общем случае, $\bar{V}(t = 0) = \bar{V}_0$, т. е. когда выпадение осадков происходит при наличии слоя воды на поверхности, интегрирование (18.80) дает

$$\bar{V} = \frac{\bar{V}_0 + (1 - \bar{V}_0) \alpha t}{1 + (1 - \bar{V}_0) \alpha t}. \quad (18.82)$$

Подстановка (18.81) и (18.82) в (18.77) позволяет определить удельный расход поверхностного стока и инфильтрацию в любой расчетный момент времени. Как следует из (18.77), в начальные моменты, при $\bar{V}_0 = 0$, $q \rightarrow 0$, $i \rightarrow r$, для больших моментов времени — картина обратная $q \rightarrow r$, $i \rightarrow 0$, что отвечает физике процесса. Особенностью решения (18.77) является обнуление функций q и i в момент прекращения дождя (когда $r = 0$), а также скачкообразный их рост или падение при дискретном приращении или убыли интенсивности дождевых осадков.

Вследствие эвапотранспирации воды из верхней части почвенного разреза существует различие между величиной инфильтрации i и величиной питания грунтовых вод, f . Данный процесс может быть учтен в балансовой формуле (18.80) посредством включения дополнительного члена-источника (Michel et al., 2005): $E = g(\bar{V}, PET)$, где PET — потенциальная эвапотранспирация [м]. Очевидно, что рост \bar{V} делает влагу почвы для процесса эвапотранспирации более доступной, причем при приближении \bar{V} к предельному значению, равному 1, интенсивность эвапотранспирации, $E = d(ET)/dt$, равна величине $E_p = d(PET)/dt$ [м/сут]. Этому условию, например, удовлетворяет простейшая линейная зависимость (Шестаков, Поздняков, 2003)

$$E = E_p \bar{V}, \quad (18.83)$$

так что расширенное уравнение массового баланса имеет вид:

$$\frac{d\bar{V}}{dt} = \frac{r}{S} (1 - \bar{V})^2 - \frac{E_p}{S} \bar{V}, \quad (18.84)$$

или

$$\frac{d\bar{V}}{dt} = \alpha (1 - \bar{V})^2 - \beta \bar{V}, \quad \alpha = \frac{r}{S}, \quad \beta = \frac{E_p}{S}. \quad (18.85)$$

Уравнение (18.85) также может быть решено посредством разделения переменных,

$$\int_{\bar{V}_0}^{\bar{V}} \frac{d\bar{V}}{\alpha(1-\bar{V})^2 - \beta\bar{V}} = \int_0^t dt, \quad (18.86)$$

что дает:

$$\bar{V} = \frac{1 - \bar{Q}}{g_1 - g_2 \bar{Q}}, \quad (18.87)$$

где

$$\bar{Q} = \frac{1 - g_1 V_0}{1 - g_2 V_0} \exp(-\sqrt{A}t), \quad g_1 = \frac{g}{1 - P}, \quad g_2 = \frac{g}{1 + P}, \quad g = \frac{2\alpha}{2\alpha + \beta},$$

$$P = \frac{\sqrt{A}}{2\alpha + \beta}, \quad A = \beta(4\alpha + \beta).$$

(ненулевые начальные условия). Таким образом могут корректироваться значения функций $q \equiv q_1$ и i (18.77) с поправкой на эвапотранспирацию. В этом случае инфильтрация может рассматриваться как величина питания подстилающего водоносного горизонта ($f = i$).

Решение (18.87) описывает частный случай эвапотранспирации при отсутствии атмосферных осадков ($r = 0$). В этом случае оно принимает вид решения уравнения кинетики первого порядка («распада»):

$$\bar{V} = \bar{V}_0 \exp\left(-\frac{E_p}{S} t\right). \quad (18.87a)$$

Если r аппроксимируется ступенчатой функцией, то компоненты q и i (18.77) на конец n -го расчетного периода определяются из представленных выше выражений для функции \bar{V} , в которых

$$a \rightarrow a_n = \frac{r_n}{S}. \quad (18.88)$$

18.5.5. Численно-аналитические расчеты для одиночного бассейна

18.5.5.1. Концентрационные функции

Математическая модель предполагает, что во время периодических дождевых событий, приводящих к образованию слоя воды на поверхности, растворенные радионуклиды (продукты выбросов с АЭС) из почвы поступают как в склоновый сток, так и в резервуар грунтовых вод, причем в консервативных оценках

можно допустить, что процесс такого вертикального массообмена протекает весьма быстро. Быстрый транспорт влаги — достаточно распространенное явление в структурированных (макропористых, растрескавшихся) почвах.

Суперпозиция двух массовых потоков позволяет определить среднюю (общую) концентрацию в выходном створе гидрологического бассейна в момент выпадения осадков и формирования расходов потоков (q_1 и q_2), C_q , а также суммарный массовых поток, j^{tot} ,

$$C_q = \frac{q_1 C_1 + q_2 C_2}{q_1 + q_2}, \quad j^{tot} = (q_1 + q_2) C_q. \quad (18.89)$$

Алгоритм расчетной модели предполагает аппроксимацию графика выпадения дождевых осадков, $P = P(t)$, ступенчатой функцией с постоянным шагом $\Delta t = 1$ сут. В решениях для концентрационной функции в слое смешения C_1 (18.62), (18.63) эффективные осадки определяются из выражения $r = [P - I_a(S)] / \Delta t$. Массив значений $P(t)$ трансформируется в массивы q_n и i_n в соответствии с SCS-CN концепцией (разд. 18.5.4). Решение задачи производится последовательно для каждого временного шага, причем значения q_{1n} и q_{2n} (расходы поверхностного и подземного потока), C_1 и C_2 (активности в воде поверхностного и подземного стока), полученные на предыдущем временном шаге, использовались для расчета значений этих функций на текущем шаге. В периоды, когда не происходит генерации поверхностного стока, инфильтрационная вода идет на разбавление радионуклидов в слое смешения и весь массовый поток поступает в грунтовые воды. При образовании поверхностного стока инфильтрационный массовый поток сокращается, но увеличивается интенсивность выноса радионуклидов с водосборной площади склоновыми водами.

Собственно функции C_1 и C_2 непрерывны, а наблюдаемые колебания концентраций связаны с разбавлением радионуклидов в слое смешения в период дождей. В свою очередь потоковые компоненты $q_i(t)$ дискретны, что связано с периодичностью дождевых выпадений, и имеют многочисленные разрывы — нулевые значения q_1 и q_2 в засушливые периоды. В эти периоды C_q (18.89) не может быть определена. Однако при осреднении значений C_q за определенный промежуток времени $T = \sum_n^N \Delta t_n$ (N — количество точек осреднения), включающий как дождли-

вые дни ($P > I_a$), так и дни без осадков (или когда $P < I_a$), может быть рассчитано среднее значение активности

$$C_{aver} = \frac{\sum_n^N (q_{1n}C_{1n} + q_{2n}C_{2n})}{\sum_n^N q_{1n} + q_{2n}}, \quad (18.90)$$

на которое мы и будем в дальнейшем ориентироваться, задавшись временным диапазоном T .

18.5.5.2. Пример

Представленная модель позволяет проиллюстрировать особенности радиоактивного загрязнения природных (поверхностных и подземных) вод в различных ландшафтных условиях, базируясь на CN-концепции. Пусть дождевые осадки характеризуются синтетическим гидрографом, представленным на рис. 18.12. Параметры почвенного слоя и подстилающего горизонта следующие: $\theta d_e R_1 = 1$ м; $\varphi_2 S_2^0 R_2 = 5$ м; $E(E_p) = 0$. Рассматриваются условия нормальной эксплуатации и аварийный режим выброса радионуклидов в атмосферу, соответственно: $N' = 10^{-4}$ Бк/м² сут (НЭ); $N_0 = 10^3$ Бк/м² (ЗПА). Для наглядности будем считать, что выброс представлен двумя радионуклидами — Cs-137 и Cs-134, имеющими периоды полураспада 30.17 и 2.06 года ($\lambda = 6.29 \cdot 10^{-5}$ сут⁻¹ и $\lambda = 9.22 \cdot 10^{-4}$ сут⁻¹).

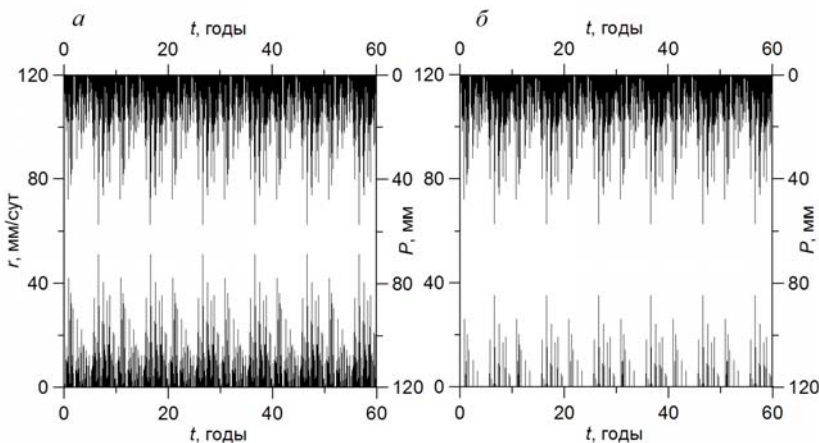


Рис. 18.12. Слой атмосферных осадков (P) и эффективные (r) атмосферные осадки (мм/сут).

a — CN = 90, b — CN = 70.

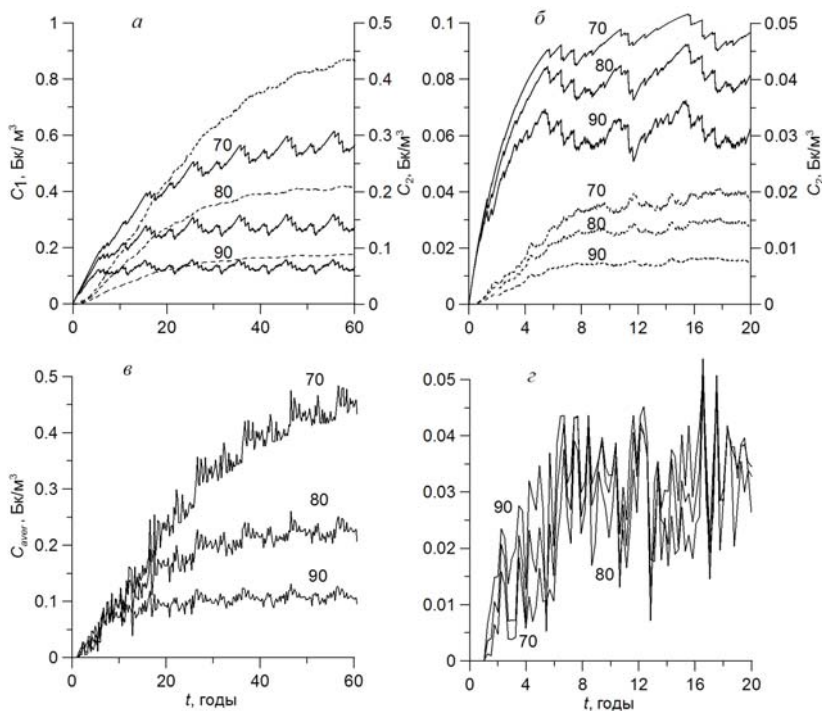


Рис. 18.13. Нормальная эксплуатация.

a, б — график концентраций C_1 (сплошные кривые) и C_2 (пунктирные кривые): *a* — Cs-137, *б* — Cs-134; *в, г* — средние концентрации C_{aver} ; *в* — Cs-137, *г* — Cs-134. Трех-месячное осреднение. Числа у кривых — номер кривой стока.

Как видно на рис. 18.12, номер кривой (CN) контролирует величину эффективных осадков, а также их перераспределение в водных потоках. Чем выше значение CN, тем больше влаги участвует в процессе переноса радионуклидов на поверхности почвы.

В случае НЭ при больших CN радионуклиды не успевают накапливаться на почве, и соответствующие кривые C_1 , C_2 и C_{aver} на графиках $C(t)$ (рис. 18.13, *a, б*) располагаются под кривыми с более низкими значениями CN. При ЗПА рост CN приводит к более быстрому истощению запасов аварийных радионуклидов в почвенном слое (рис. 18.14. *a, б*), они активно выносятся поверхностным стоком с водосборной площади, что способствует более быстрому появлению радионуклидов в выходном створе бассейна. Наоборот, пониженные значения CN отражают повышенную роль инфильтрационной компоненты в общем водном балансе, поэтому основная масса радионуклидов поступает в грунтовые воды. Вынос радионуклидов из бассейна происходит в основном с подземными водами (при низких CN) с большой временной задержкой (рис. 18.14. *a, б*). Водо-

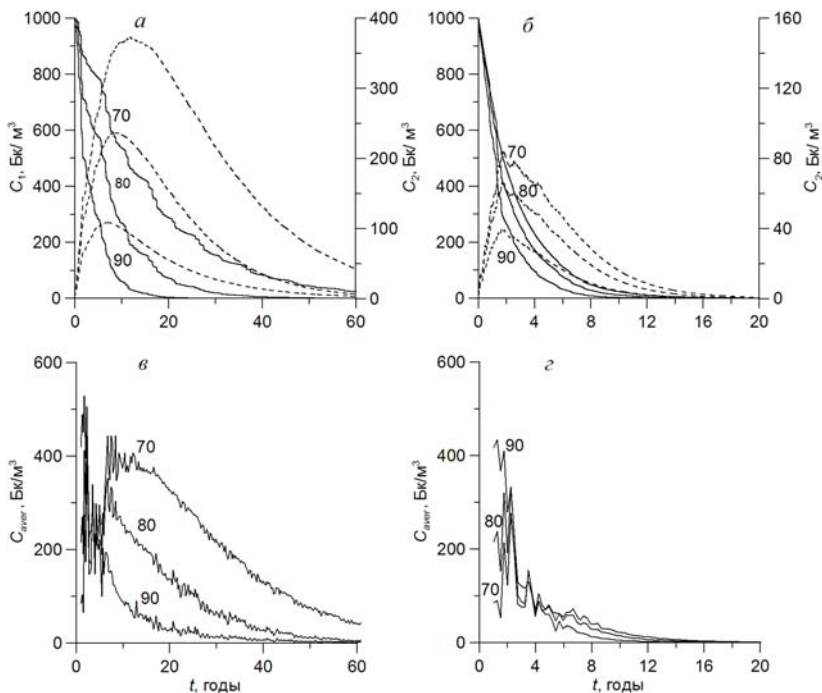


Рис. 18.14. Последствия аварии.

a, б — график концентраций C_1 (сплошные кривые) и C_2 (пунктирные кривые): *a* — Cs-137, *б* — Cs-134; *в, з* — средние концентрации C_{aver} : *в* — Cs-137, *з* — Cs-134. Трехмесячное осреднение. Числа у кривых — номер кривой стока (CN).

носный горизонт становится источником долговременного загрязнения природных вод.

Графики средних концентраций C_{aver} [формула (18.90), рис. 18.13, *в, з* и 18.14, *в, з*] построены для трехмесячного (квартального) периода осреднения ($N = 90$, $T = 90$ сут) (суточные кривые, как отмечалось, существенно дискретны и имеют многочисленные разрывы в связи с нулевыми значениями функций q_i в засушливые периоды). Для условий ЗПА (рис. 18.14, *в, з*) восходящая ветвь кривой C_{aver} образуется вследствие загрязнения поверхностного стока, нисходящая ветвь — вследствие миграции радионуклидов в водоносном горизонте.

18.5.6. Модель связанных потоков для «цепочек» бассейнов

Представленная выше модель единичного бассейна может быть обобщена на случай, когда радиоактивному загрязнению подвержены несколько суб-бассейнов, составляющих единую гидрологическую систему

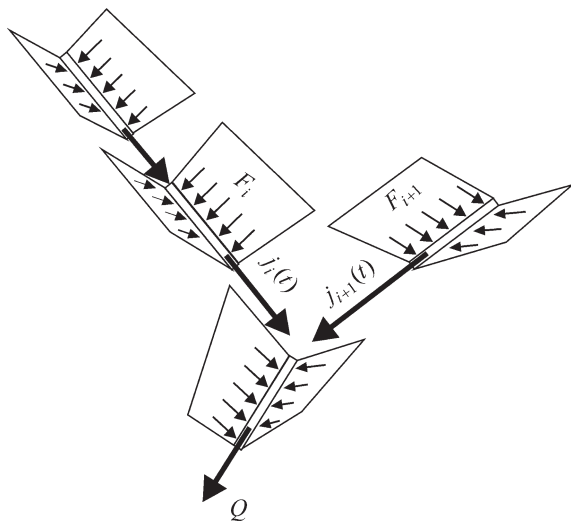


Рис. 18.15. Концептуальное представление о формировании связей потоков с водосборных суб-бассейнов.

(рис. 18.15). Каждый из суб-бассейнов (в пределах 30-километровой зоны АЭС) можно охарактеризовать различными параметрами, и он будет испытывать различную степень воздействия радиоактивного выброса, определяемую розой ветров (НЭ) или характеристиками радиоактивного следа (аварийные сценарии — ПА, ЗПА). Будем считать, что каждый суб-бассейн транслирует избыток осадков в поверхностный и подземный сток, порождающий приток радионуклидов в замыкающий створ некоторого мега-бассейна. В соответствии со структурой связности стока суб-бассейны могут быть собраны в цепочки (систему) суб-бассейнов. Простые операции в «цепочках» стока позволяют моделировать перемещение радионуклидов со стоком воды из загрязненных суб-бассейнов вниз по площади водосбора к замыкающему створу мега-бассейна.

Удельная активность определяется посредством суммирования потоков активностей, формируемых в пределах загрязненных суб-бассейнов, с учетом гидрографа стока воды по всей совокупности путей миграции («цепочек»):

$$C(t) = \frac{\sum_{i=1}^k j_i(t)}{Q(t)}, \quad (18.91)$$

где $j_i(t)$ — поток радионуклидов (сформированный поверхностным стоком) на замыкающем створе i -го суб-бассейна;

$$j_i(t) = [C_1(t)q_{1i} + C_2(t)q_{2i}]F_i, \quad (18.92)$$

$q_i(t)$ — расход воды; индексы 1 и 2 означают поверхностную и подземную компоненты; F_i — площадь i -го суб-бассейна.

Общий расход, Q , в формуле (18.91) характеризует поток воды, разбавляющий загрязненный радионуклидами поверхностный сток. В зависимости от условий стока из водосборного бассейна и водного объекта, качество которого подлежит оценке, общий расход может быть представлен двумя способами. Если загрязненный поверхностный сток разбавляется в потоке воды, образовавшемся в том же моделируемом водосборном бассейне (или группе бассейнов), то

$$Q(t) = \sum_i (q_{1i} + q_{2i}) F_i. \quad (18.93)$$

Если же загрязненная вода питает речной поток, вода которого поступает в моделируемую область извне (из незагрязненных участков), то

$$Q(t) = Q_s(t) + \sum q_{1,2i}, \quad (18.94)$$

где $Q_s(t)$ — расход транзитного потока.

Разрывы потоковых компонент q_{1i} и q_{2i} обуславливают необходимость оперировать осредненными значениями суммарной активности:

$$C_{aver} = \frac{\sum_n \sum_{i=1}^k j_{in}(t)}{\sum_n Q_n + \sum_n \sum_{i=1}^k q_{in}(t)}. \quad (18.95)$$

Очевидно, что в общем случае связность путей миграции радионуклидов вниз по бассейну водосбора различна для разных сценариев радиоактивных выбросов.

Для условий НЭ, когда вся 30-километровая зона вокруг АЭС подвержена радиоактивному воздействию, каждая контрольная точка интегрирует массовые потоки, формирующиеся в пределах строго определенного набора суб-бассейнов, имеющих различную плотность загрязнения. Для аварийных сценариев (ПА и ЗПА) траектория маршрута радионуклидного транспорта зависит от геометрии и расположения радиоактивного следа. Для определенной контрольной точки, в зависимости от расположения радиоактивного следа, эта траектория будет разной.

18.6. Заключительные ремарки

Оценка воздействия на окружающую среду при проектировании и строительстве АЭС в соответствии с российским и международным экологическим законодательством, в частности с требованиями МАГАТЭ, предполагает прогнозирование миграции ПД в водных объектах: поверхностных и подземных водах.

Трудности, связанные с реализацией соответствующих требований на практике, обусловлены недостаточной разработанностью научно-методической базы, которая учитывала бы специфику функционирования рассматриваемых инженерных объектов. Представленные выше результаты развивают методические и теоретические подходы к прогнозам миграции ПД в водных объектах, подверженных выбросам ПД в атмосферу на АЭС как в условиях их нормальной эксплуатации, так и при гипотетических авариях разного уровня (проектных и запроектных).

Математические модели различаются особенностями задания типа граничных условий на почве — поверхности осаждения ПД из атмосферы. Для НЭ зона воздействия и плотность выпадения ПД определяется данными статистического осреднения погодных условий в многолетнем разрезе времени. Модель должна учитывать накопление радионуклидов в почве с последующим их вымыванием атмосферными осадками и талыми водами снежного покрова в течение периода времени, измеряемого многими десятилетиями (для российских АЭС — это 60 лет). Для прогнозирования последствий аварийных выбросов (ПА и ЗПА) исходят из предпосылки об импульсном характере площадного источника загрязнения поверхности и вероятностной (наперед незаданной) геометрии и ориентации радиационного следа.

Основной принцип задания плановых границ моделей — бассейновый. Прогнозы, связанные как с НЭ станции, так и с оценкой последствий ПА и ЗПА, строятся дифференцированно применительно к каждому из водосборных бассейнов, попадающих в 30-километровую зону влияния АЭС. Преимущества такого бассейнового подхода обусловлены возможностью привлечения гидрографов замыкающих створов бассейна для определения величин компонентов поверхностного (склоновый сток) и подземного (водоносный горизонт) стока.

Зона потенциального воздействия выбросов ПД с АЭС, измеряемая десятками и сотнями квадратных километров, является, как правило, недостаточно изученной с точки зрения выполнения детальных прогнозов распространения ПД на основе сеточных моделей поверхностного стока и фильтрации с распределенными параметрами. В этих условиях более реалистичные (приближенные, экспертные) оценки могут быть получены на основе моделей с сосредоточенными параметрами. Для этого предложены аналитические решения и алгоритмы для численно-аналитических расчетов миграции ПД, описывающие образование слоя воды, насыщенного осажденными ПД, и поступле-

ние радиоактивно загрязненных вод в поверхностный водоток и грунтовые воды, которые также движутся к контуру дренирования водосборного бассейна. Расчетные модели интегрированы с методом нумерованных кривых стока (USDA, 1986), что позволяет предсказать цикличность выноса радионуклидов с загрязненных территорий, основываясь на гидрографе дождевых осадков и используя при этом обширную базу данных обобщенных параметров. Эти параметры учитывают природные почвенно-ландшафтные особенности территорий и условия их промышленного, городского и сельскохозяйственного освоения. Номер кривой стока (CN) отражает также перераспределение между двумя компонентами стока — поверхностной (быстрой) и подземной (медленной), предсказывая характер развития процесса радиоактивного загрязнения природных вод в целом.

ЛИТЕРАТУРА

Агапов А. Е., Семикобыла Я. Г. Экология районов закрываемых шахт. М.: Недра, 2006.

Алексахин А. И. Особенности гидрологического режима и техногенных илов открытого хранилища жидких радиоактивных отходов ПО «Маяк» водоема В-9 (Карачай). Автореф. ... канд. биол. наук. Озерск, 2007.

Анисимов Б. В., Пухов А. Г. История техногенного загрязнения подземных вод при освоении нефтяных месторождений региона // Гидрогеоэкологические исследования в нефтедобывающих районах Республики Татарстан / Под ред. А. И. Короткова и В. К. Учаева. Казань: НПО «Репер», 2007.

Баренблатт Г. И., Ентов В. М., Рыжик В. М. Теория нестационарной фильтрации жидкости и газа. М.: Недра, 1972.

Баренблатт Г. И., Ентов В. М., Рыжик В. М. Движение жидкостей и газов в природных пластах. М.: Недра, 1984.

Басниев К. С. Подземная гидравлика. М.: Недра, 1986.

Басниев К. С., Власов А. М., Кочина И. Н., Максимов В. М. Подземная гидравлика. Учебник для вузов. М.: Недра, 1986. 303 с.

Басниев К. С., Дмитриев Н. М., Каневская Р. Д., Максимов В. М. Подземная гидромеханика. Учебник для вузов. М.; Ижевск: Ин-т компьютер. исслед. 2005.

Бачурин В. А., Бабошко А. Ю. Эколого-геохимическая характеристика отходов калийного производства // Горный журнал. 2008. № 10. С. 88—91.

Белицкий А. С., Орлова Е. И. Охрана подземных вод от радиоактивных загрязнений. М.: Медицина, 1968.

Белкин И. В., Петров А. В. Определение параметров трещиноватости и расчет гидрогеологических параметров при помощи метода телефотометрии // Научно-технические достижения и передовой опыт в области геологии и разведки недр. М., 1993. С. 18—25.

Бабошко А. Ю., Бачурин В. А. Экологические проблемы верхнекамского калия [Электронный ресурс] // Горное эхо. 2002. URL: <http://ftp.mi-perm.ru/ge4-04/ge4-04-bach.htm>.

Боревский Б. В., Дробноход Н. И., Язвин Л. С. Оценка запасов подземных вод. Киев: Высшая школа, 1989. 407 с.

Боревский Б. В., Язвин Л. С., Закутин В. П. Оценка эксплуатационных запасов питьевых и технических подземных вод по участкам недр, эксплуатируемым одиночными водозаборами. Методические рекомендации. М.: ГИДЭК, 2002. 61 с.

Боровицкая Л. Б., Савенкова Г. И. Подземные воды Санкт-Петербурга // Охрана окружающей среды, природопользование и обеспечение экологической безопасности в Санкт-Петербурге в 2006 году. СПб.: ООО «Сезам-Принт», 2007. С. 337—348.

Бочеввер Ф. М., Лапшин Н. Н., Орадовская А. Е. Защита подземных вод от загрязнения. М.: Недра, 1979.

Бочеввер Ф. М., Орадовская А. С. Гидрогеологическое обоснование защиты подземных вод и водозаборов от загрязнения. М.: Недра, 1972.

Быкадоров А. И., Ларичкин П. М., Свирко С. В., Ягунова О. А. Анализ динамики затопления консервируемых шахт Кузбасса // Горный информационно-аналитический бюллетень. 2015. № 11. С. 269—276.

Веницианов Е. В., Рубинштейн Р. И. Динамика сорбции из жидких сред. М.: Наука, 1983.

Веригин Н. Н., Васильев С. В., Саркисян В. С., Шержуков Б. С. Гидродинамические и физико-химические свойства горных пород. М.: Недра, 1977.

Веригин Н. Н., Саркисян В. С. О фильтрации двух жидкостей с разной плотностью и вязкостью при закачке в галерею с постоянным расходом // Докл. АН СССР. 1974. Т. 218. № 3. С. 536—539.

Вишняк А. И. Изменение химического состава подземных вод в ограниченных карбонатных структурах при окислении пирита покровных отложений (на примере Полдневского месторождения Егоршинско-Каменской синклинали Восточно-Уральского прогиба). Автореф. дис. ... канд. Геол.-минер. наук. М.: 2005.

Водоём-9 — хранилище жидких радиоактивных отходов и воздействие его на геологическую среду / Под ред. Е. Г. Дрожко, Б. Г. Самсонова. М.: Росатом, 2007.

Ворушилов С. В., Ем А. А. Радиационная катастрофа г. Лермонтов // Ломоносов-2008. С. 6—7.

Гавришин А. И., Корadini А. Происхождение и закономерности формирования химического состава подземных и шахтных вод в Восточном Донбассе // Водные ресурсы. 2009. Т. 36. № 5. С. 564—574.

Гавришин А. И., Корadini А., Мохов А. В., Бондарева Л. И. Формирование химического состава шахтных вод в Восточном Донбассе. Новочеркасск: ЮРГТУ (НПИ), 2003.

Гаррелс Р. М., Крайст Ч. Л. Растворы, минералы, равновесия. М.: Мир, 1968.

Гензель Г. Н., Еланцева Л. А., Кравчук Т. Н. Анализ изменения качества подземных вод Старооскольского железорудного района в процессе эксплуатации горнодобывающих предприятий и перспективы их использования для хозяйственно-питьевого и технического водоснабжения // Научные ведомости. БелГУ. Серия: Естественные науки. 2010. № 15 (86). Вып. 12. С. 151.

Гиринский Н. К. Комплексный потенциал потока пресных вод со слабо наклонными струйками, фильтрующего в водопроницаемой толще морских побережий // Докл. АН СССР. 1947. Т. LVIII. № 4.

Гиринский Н. К. К расчету установившегося плоского движения двух потоков подземных вод со свободной поверхностью разной минерализации // Докл. АН СССР. 1951. Т. LXXX. № 2.

Голубев В. С. Динамика геохимических процессов. М.: Недра, 1981.

Гольдберг В. М. Гидрогеологические прогнозы качества подземных вод на водозаборах. М.: Недра, 1976.

Гольдберг В. М., Газда С. Гидрогеологические основы охраны подземных вод от загрязнения. М.: Недра, 1984.

Гольдберг В. М., Зверев В. П., Арбузов А. И., Казеннов С. М., Ковалевский Ю. В., Путилина В. С. Техногенное загрязнение природных вод углеводородами и его экологические последствия. М.: Наука, 2001.

Грязнов О. Н., Елохина С. Н. Геоэкологические проблемы горно-промышленного техногенеза на Урале // Известия Уральского государственного горного университета. 2017. № 2 (46). С. 28—33.

Гудков А. В., Каменский И. Л., Мелихова Г. С. и др. Тритий-Геллий-3 метод и его применение для датирования подземных вод (на примере Кировского горнопромышленного района, Мурманской области) // Геохимия. 2014. № 7. С. 646—653.

Дашко Р. Э. Инженерно-геологическая и геоэкологическая оценка нижнекембрийских синих глин как среды размещения радиоактивных отходов // Геоэкология. 2006. № 3. С. 235—241.

Дашко Р. Э., Крысов О. Ю., Мольский Е. В., Петров Н. С. Изучение противодиффузионных экранов шламохранилищ жидких отходов калийного производства // Охрана окружающей среды калийных производств. Тр. ВНИИталургии. Л., 1985. С. 73—83.

Долина Л. Ф. Сточные воды предприятий горной промышленности и методы их очистки. Справочное пособие. Днепропетровск: Молодежная экологическая лига Приднестровья, 2000. С. 9.

Дрозжо Е. Г., Иванов И. А., Алексахин А. И., Самсонова Л. М., Глаголев А. В. Современное состояние подземной гидросферы в районе ПО «Маяк» // Вопросы радиационной безопасности. 1995. № 1. С. 11—19.

Дрожко Е. Г., Стукалов П. М., Иванов И. А., Алексахин А. И. Результаты комплексного обследования Водоема 9 в 2002 году // Тезисы докладов Российской конференции по радиохимии «Радиохимия 2003». Озерск, 2003. С. 241—242.

Еланцева Л. А., Фоменко С. В. Осушение месторождений Старооскольского железорудного района и использование дренажных вод в связи с охраной геологической среды. Проблемы природопользования и экологическая ситуация в Европейской России и сопредельных странах // Материалы VI международной научной конференции. Отв. за выпуск П. В. Голушов. Белгород: 2015. Политерра, 2015. С. 359—363.

Елохина С. Н. Горнорудный техногенез постэксплуатационной стадии на территории Урала // Литосфера. 2013. № 5. С. 151—164.

Елохина С. Н., Арзамасцев А. А. Гидрогеологические условия эксплуатации и ликвидации рудников Урала // Известия высших учебных заведений. Геология и разведка. 2007. № 4. С. 57—67.

Забулис Р. М. Охрана подземных вод Литовской ССР от загрязнения в районах крупных животноводческих комплексов (методические рекомендации). Вильнюс, 1988.

Захарова Е. В., Каймин Е. П., Волкова А. Г., Зубков А. А., Румынин В. Г., Синдаловский Л. Н. Экспериментальные и модельные исследования коллоидного транспорта радионуклидов в водоносных горизонтах (применительно к условиям глубинного захоронения жидких РАО на полигоне Сибирского химического комбината): 1. Адсорбция радионуклидов на коллоидных частицах // Геоэкология. 2007. № 1. С. 39—50.

Зубков А. А., Рыбальченко А. И., Румынин В. Г., Токарев И. В., Данилов В. В., Сухоруков В. А., Захарова Е. В., Александрова Л. Н. Анализ системы геотехнологического мониторинга полигона подземного захоронения жидких радиоактивных отходов СХК // Разведка и охрана недр. 2007. № 11. С. 56—61.

Иванов И. А. Миграция урана и трансураниевых элементов в подземных водах района размещения открытого хранилища жидких радиоактивных отходов оз. Карачай (ПО «Маяк», Челябинская обл.). Автореф. дис. ... канд. техн. наук. Озерск, 2004. 28 с.

Иванов И. А., Постовалова Г. А., Дрожко Е. Г. Миграция урана и трансураниевых элементов в подземных водах района размещения открытого хранилища жидких радиоактивных отходов оз. Карачай // Вопросы радиационной безопасности. 2005. № 1. С. 23—34.

Израэль Ю. А., Вакуловский С. М., Ветров В. А. и др. Чернобыль: Радиоактивное загрязнение природных сред / Под ред. Ю. А. Израэля. Л.: Гидрометеиздат, 1990.

Имайкин А. К., Имайкин К. К. Гидрогеологические условия Кизеловского угольного бассейна во время и после окончания его экс-

плуатации, прогноз их изменений. Пермь: Перм. гос. нац. иссл. ун-т, 2013.

Каменский И. Л., Гудков А. В., Мазухина С. И., Ганнибал М. А., Скиба В. И., Токарев И. В. Два неожиданных результата, полученных при определении возраста воды водозабора «Центральный» (г. Кировск, Мурманская обл.). Региональная геология, минералогия и полезные ископаемые Кольского полуострова // Труды XIII Всероссийской Ферсмановской научной сессии. Апатиты, 2016.

Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. 6-е изд. СПб.: Изд-во «Лань», 2003.

Карпенко Е. И. Оценка радиологической ситуации в районе расположения предприятия по добыче и переработке урановых руд. Автореф. дис. ... канд. биол. наук. Обнинск, 2010.

Кирюхин В. А., Толстихин Н. И. Региональная гидрогеология: Учебник для вузов. М.: Недра, 1987.

Кисель В. А., Абрамов Ю. С. Разработка нефтяных залежей с подошвенной водой. М.: Недра, 1978.

Коносавский П. К., Мироненко В. А., Румынин В. Г. Разработка и апробация моделей индикаторного опробования комплексов трещиноватых пород // Геоэкология. 1993. № 3. С. 104—124.

Коносавский П. К., Румынин В. Г., Синдаловский Л. Н. Особенности численного моделирования фильтрации потоков переменной плотности // Современные проблемы гидрогеологии и гидрогеомеханики. СПб.: Изд-во СПбГУ, 2002. С. 533—550.

Крайнов С. Р., Швец В. М. Основы геохимии подземных вод. М.: Недра, 1980.

Крамчанинов Н. Н., Петин А. Н., Погорельцев И. А. Анализ состояния подземных вод горнопромышленного района КМА на территории Белгородской области // Научные ведомости БелГУ. Серия: Естественные науки. 2011. № 9 (104). Вып. 15. С. 166.

Латишин Н. Н., Орадовская А. Е. Рекомендации по гидрогеологическим расчетам зон санитарной охраны подземных источников хозяйственно-питьевого водоснабжения. М.: ВОДГЕО, 1983.

Лехов А. В. Физико-химическая гидрогеодинамика: учебник для студентов. М.: КДУ, 2010.

Лехов А. В., Вишняк А. И. Модель окисления дисперсного пирита песчано-глинистых отложений при водопонижении // Геоэкология. 2005. № 6. С. 505—516.

Лудзиш В. С. Гидрогеологические проблемы ликвидации шахт Кузбасса и пути их решения. ЭКО-бюллетень ИнЭКА № 6 (137), ноябрь 2009—январь 2010 года.

Мазухина С. И. Формирование химического состава природных и антропогенно измененных вод Кольского полуострова. Автореф. дис. ... д-ра техн. наук. Апатиты, 2016.

Макашов С. Э. Исследование миграции техногенных рассолов методами численного моделирования в районе СКРУ-3 Верхнекамского месторождения калийно-магниевого солей // Первая Всероссийская конференция молодых ученых, посвященная памяти В.А. Мироненко. СПб.: Изд-во СПбГУ, 2010. С. 77—88.

Максимович Н. Г., Черемных Н. В., Хайрулина Е. А. Экологические последствия ликвидации Кизеловского угольного бассейна. Пермь: ФГНУ «Естественно-научный институт», 2006.

Межгосударственная целевая программа «Рекультивация территорий государств, подвергшихся воздействию уранодобывающих производств» (в редакции Решения Совета глав правительств СНГ от 29 мая 2015 года). Бурабай — 29.05.2015.

Минкин Е. Л. Гидрогеологические расчеты для выделения зон санитарной охраны водозаборов подземных вод. М.: Недра, 1967.

Минкин Е. Л. Исследования и прогнозные расчеты для охраны подземных вод. М.: Недра, 1972.

Мироненко В. А. Динамика подземных вод. М.: МГГУ, 1996.

Мироненко М. В. Особенности термодинамического моделирования некоторых водосодержащих систем // Геологическая эволюция и самоорганизация системы вода—порода / Под ред. С. Л. Шварцева. Новосибирск, 2005. Т. 1. С. 175—180.

Мироненко В. А., Мольский Е. В., Румынин В. Г. Изучение загрязнения подземных вод в горнодобывающих районах. Л.: Недра, 1988.

Мироненко В. А., Румынин В. Г. Опыт-миграционные работы в водоносных пластах. М.: Недра, 1986.

Мироненко В. А., Румынин В. Г. Проблемы гидрогеоэкологии. Т. 1: Теоретическое изучение и моделирование геомиграционных процессов. М.: МГГУ, 1998.

Мироненко В. А., Румынин В. Г. Проблемы гидрогеоэкологии. Т. 3: Прикладные исследования. Кн. 2. М.: МГГУ, 1999.

Мироненко В. А., Румынин В. Г., Боровский Б. В., Ершов Г. Е. Опыт-миграционные работы на месторождениях питьевых вод (методические рекомендации). М.: ГИДЭК, 1998.

Мироненко В. А., Румынин В. Г., Учаев В. К. Охрана подземных вод в горнодобывающих районах (опыт гидрогеологических исследований). Л.: Недра, 1980.

Митюшин А. И., Разбегина Е. Г. Двухфазная фильтрация несмешивающихся жидкостей. Учебное пособие по курсу «Подземная гидромеханика». Вып. 3. М.: РГУ нефти и газа им. И. М. Губкина, 2005.

Новиков А. П., Павлоцкая Ф. И., Горяченкова Т. А., Посохов А. К., Казинская И. Е., Емельянов В. В., Кузовкина Е. В., Барсукова К. В., Лавринович Е. А., Коровайков П. А., Дрожко Е. Г., Ровный С. И., Мясоедов Б. Ф. Содержание радионуклидов в подземных водах и поро-

дах наблюдательных скважин вокруг озера Карачай // Радиохимия. 1998. Т. 40. № 5. С. 468—473.

НРБ-99/2009. СанПиН 2.6.1.2523-09. Нормы радиационной безопасности. Санитарные правила и нормативы. 2009.

Огняник Н. С., Парамонова Н. К., Брикс А. Л., Пашковский И. С., Коннов Д. В. Основы изучения загрязнения геологической среды легкими нефтепродуктами. Киев: А. П. Н., 2006.

Озерский А. Ю., Караулов В. А. Гидрогеологические исследования при изысканиях массива кристаллических пород для подземного строительства в южной части Енисейского кряжа // Инженерные изыскания. 2012. № 11. С. 52—59.

Орадовская А. Е., Лапшин Н. Н. Санитарная охрана водозаборов подземных вод. М.: Недра, 1987.

Отчет по экологической безопасности ПАО «ППГХО» за 2016 г.

Панова К. А. Мониторинг состава шахтных вод шахты комиссаровская в Восточном Донбассе. Проблемы геологии и освоения недр // Труды XVII Международного симпозиума имени академика М. А. Усова. Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2013. Т. I. С. 541—543.

Пашковский И. С. Закономерности процессов насыщения и осушения водоносных горизонтов. Обзор. Серия: Гидрогеология и инженерная геология. М.: ВИЭМС, 1983.

Петин А. Н., Крамчанинов Н. Н., Погорельцев И. А., Уколов И. М. Оценка техногенного воздействия на подземные воды в зоне влияния Старооскольско-Губкинского промышленного комплекса // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. 2013. Т. 15. № 3 (3). С. 949—953

Поздняков С. П. Стохастическое моделирование гидрогеодинамических процессов. Автореф. дис. ... д-ра геол.-минер. наук. М.: МГУ, 1996.

Полубаринова-Кочина П. Я. Теория движения грунтовых вод. М.: Изд-во физико-математической литературы, 1977.

Рачинский В. В. Введение в общую теорию динамики сорбции и хроматографии. М.: Наука, 1964.

Ровный С. И., Иванов И. А., Стукалов П. М., Алексахин А. И., Поставалова Г. А., Тананаев И. Г. Загрязнение подземных вод технецием-99 в районе размещения водоемов-хранилищ жидких радиоактивных отходов озеро Карачай и Старое болото // Вопросы радиационной безопасности. 2007. № 3. С. 17—27.

Рошаль А. А., Шестаков В. М. О миграции подземных вод в слоистых пластах // Гидрогеологические вопросы подземного захоронения промышленных стоков. М.: Изд-во ВСЕГИНГЕО, 1969. Вып. 14. С. 43—55.

Румынин В. Г. Геомиграционные модели в гидрогеологии. СПб.: Наука, 2011.

Румынин В. Г., Коносовский П. К., Совадина Л. Учет гидрохимических процессов в гидродинамических моделях фильтрации // Водные ресурсы. 1988. № 2. С. 59—70.

Румынин В. Г., Никуленков А. М. Зональность физических свойств котлинских глин вендской системы (северо-запад русской платформы) // Записки Горного института. 2012. Т. 197. С. 191—196.

Румынин В. Г., Токарев И. В., Коносовский П. К. Комплексное исследование техногенного режима подземных вод в бассейне оз. Б. Вудъявр (Кировский горнодобывающий район) // Геология и разведка (Изв. ВУЗов). 1991. № 6. С. 66—75.

Рыбальченко А. И., Пименов М. К., Костин П. П. Глубинное захоронение жидких радиоактивных отходов. М.: ИзДАТ, 1994.

Рыбникова Л. С., Рыбников П. А. Гидрогеологические проблемы постмайнинга на Среднем Урале // Теоретические и прикладные аспекты региональной гидрогеологии. Международная научная конференция «Гидрогеология сегодня и завтра: наука, образование и практика». 60 лет кафедре кафедре гидрогеологии гидрогеологии МГУ. 2013. С. 96—102.

Рыбникова Л. С., Рыбников П. А. Проблемы горнопромышленной гидрогеологии на постэксплуатационном этапе. Моделирование гидрогеологических процессов: от теоретических представлений до решения практических задач // Труды школы-семинара. К 90-летию со дня рождения В. М. Шестакова. М.: МГУ, 2018. С. 98—111.

Сабодина М. Н. Закономерности поведения радионуклидов при создании техногенно-геохимического барьера на основе глин. Автореф. дис. ... канд. хим. наук. М., 2008.

Самойленко В. Г., Якубова Р. А., Кахаров А. С. Охрана подземных вод от загрязнения агрохимикатами. Ташкент: Мехнат, 1987.

Саркисов О. Р. Проблемы реализации государственной политики в сфере охраны окружающей среды: правовые и организационные аспекты // Вестник экономики, права и социологии. 2009. № 4. С. 87—91.

Сидоров Р. В., Корчагина Т. В., Рыбак В. Л. Экологические последствия закрытия угольных шахт в Кузбассе // Известия ТулГУ. Науки о земле. 2014. Вып. 1. С. 30—33.

Синдаловский Л. Н. Аналитическое моделирование опытных опробований водоносных пластов и скважинных водозаборов (программный комплекс ANSDIMAT). СПб.: Наука, 2014.

Солодов И. Н., Величкин В. И., Рубцов М. Н., Купер В. Я., Черток М. Б. Гидрогеохимический каротаж: теория и практика. М.: Едиториал УРСС, 2005.

Толстихин И. Н., Каменский И. Л. О возможности тритий-гелий-3 датирования подземных вод // Геохимия. 1969. № 8. С. 1027—1029.

Тютюнова Ф. И. Гидрагеохимия техногенеза. М.: Наука, 1987.

Удалов И. В., Кононенко А. В. Особенности процессов миграции естественных радионуклидов в подземных водах при ликвидации угольных шахт Северо-Восточного Донбасса // Вісник Дніпропетровського університету. Серія: геологія, географія. 2016. № 24 (2). С. 121—128.

Учаев В. К., Сапожников Б. Г., Харьковский К. С., Токарев И. Л., Абрамов В. Ю., Прасолов Э. М. Результаты гидрогеологических исследований и наблюдений на опытном полигоне «Васильевка» // Гидрогеоэкологические исследования в нефтедобывающих районах Республики Татарстан / Под ред. А. И. Короткова и В. К. Учаева. Казань: НПО «Репер», 2007а.

Учаев В. К., Сапожников Б. Г., Харьковский К. С., Щиров М. Д. Разведка очагов загрязнения подземных вод // Гидрогеоэкологические исследования в нефтедобывающих районах Республики Татарстан / Под ред. А. И. Короткова и В. К. Учаева. Казань: НПО «Репер», 2007б.

Федяева О. А. Промышленная экология. Конспект лекций. Омск: Изд-во ОмГТУ, 2007.

Чарный И. А. Подземная гидрогазодинамика. М.: Гостоптехиздат, 1963.

Чернобыльская радиация в вопросах и ответах М.: Комтехпринт, 2005.

Шварц А. А. Экологическая гидрогеология. Санкт-Петербург. СПб.: Изд-во СПбГУ, 1996.

Шестаков В. М. Динамика подземных вод. М.: Изд-во МГУ, 1973.

Шестаков В. М. Гидрогеодинамика. М.: Изд-во МГУ, 1995.

Шестаков В. М., Невечеря И. К., Авиллина И. В. Методика оценки ресурсов подземных вод на участках береговых водозаборов. М.: Изд-во МГУ, 2009.

Шестаков В. М., Поздняков С. П. Геогидрология. М.: ИКЦ «Академкнига», 2003.

Шестопалов В. М., Богуславский А. С., Бублясь В. Н. Оценка защищенности и уязвимости подземных вод с учетом зон быстрой миграции. Институт геологических наук Национальной академии наук Украины. Киев. 2007. 120 с.

Щемелинин В. В. Исследование гидрогеологических условий и процессов загрязнения подземных вод геофизическими методами: на примере горнодобывающих районов. Автореф. дис. ... канд. геол.-минер. наук. Л., 1983.

Agnese C., Baiamonte G., Corrao C. A simple model of hillslope response for overland flow generation // Hydrol. Process. 2001. Vol. 15. Issue 17. P. 3225—3238; doi: 10.1002/hyp.182.

Anderson P. R., Christensen T. H. Distribution coefficients of Cd, Co, Ni, and Zn in soils // *European Journal of Soil Science*. 1988. Vol. 39. N 1. P. 15—22.

Appelo C. A. J., Postma D. Geochemistry, groundwater and pollution. Amsterdam: Balkema Publishers, 2005.

Arnold J. G., Allen P. M., Bernhardt G. A comprehensive surface-groundwater flow model // *Journal of Hydrol.* 1993. Vol. 142. P. 47—69.

Arnould M. Discontinuity networks in mudstones: a geological approach. Implications for radioactive wastes isolation in deep geological formation in Belgium, France, Switzerland // *Bull. of Eng. Geol. and the Envir.* 2006. Vol. 65. P. 413—422.

Banwart S. A. Aqueous speciation at the interface between geological solids and groundwater // *Modelling in Aquatic Chemistry*. OECD Publications / Eds. I. Grenthe, I. Puigdomenech. Nuclear Energy Agency, 1997.

Bear J. Dynamics of Fluids in Porous Media. New York; London; Amsterdam: American Elsevier Publishing Company, INC., 1972.

Bear J. Hydraulics of Groundwater. New York: McGraw-Hill, 1979.

Bear J., Cheng A. H.-D. Modeling groundwater flow and contaminant transport. Series title: Theory and Applications of Transport in Porous Media. 2010. Vol. 23. 2010.

Bear J., Jacobs M. On the movement of water bodies injected into aquifers // *Journal of Hydrol.* 1965. Vol. 3. P. 37—57.

Beckett G. D. Light non-aqueous phase liquid (LNAPL) parameters database. Version 2.0, Users Guide. Regulatory analysis & scientific affairs department. API publication number 4731, December 2003. P. 1—12.

Berkowitz B. Characterizing flow and transport in fractured geological media: a review // *Advances in Water Resources*. 2002. Vol. 25 (8). P. 861—884.

Berkowitz B., Dror I., Yaron B. Contaminant Geochemistry. Interaction and Transport in the Subsurface Environment. Heidelberg: Springer-Verlag, Berlin; 2008.

Blandford T. N., Huyakorn P. S. WHPA: A modular semi-analytical model for the delineation of wellhead protection areas, version 2.0. Report to the U. S. Environmental Protection Agency, Washington, DC, 1991.

Bock H., Blumling P., Konietzky H. Study of the micro-mechanical behavior of the Opalinus Clay: an example of co-operation across the ground engineering disciplines // *Bull. of Engin. Geol. and the Envir.* 2006. Vol. 65. P. 195—207.

Bosma W. J. P., Van der Zee S. E. A. T. M. Analytical approximation for nonlinear adsorbing solute transport and first-order degradation // *Transport in Porous Media*. 1993. Vol. 11. P. 33—43.

Boughton W. C. A Review of the USDA SCS Curve Number Method // Aust. J. Soil Res. 1989. Vol. 27. P. 511—523.

Bower J. W., Motz L. H., Durden D. W. Analytical solution for determining the critical condition of saltwater upconing in a leaky artesian aquifer // Journal of Hydrol. 1999. Vol. 221. P. 43—54.

Boyce W. E., DiPrima R. C. Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems. John Wiley & Sons, Inc., 2012.

Carrera J., Benet I., Galarza G. On matrix diffusion: formulations, solution methods and qualitative effects // Hydrogeol. Journal. 1998. Vol. 6. P. 178—190.

Ceric A., Haitjema H. On using simple time-of-travel capture zone delineation methods // Ground Water. 2005. Vol. 43. N 3. P. 4008—4012.

Charbeneau R. J. Groundwater contaminant transport with adsorption and ion exchange chemistry: Method of characteristics for the case without dispersion // Water Res. Res. 1981. Vol. 17. N 3. P. 705—713.

Charbeneau R. J. Groundwater Hydraulics and Pollutant Transport. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 2000.

Charbeneau R. J. Models for design of free-product recovering systems for petroleum hydrocarbon liquids. Regulatory Analysis and scientific affairs department. API publication 4729; August 2003. P. 70.

Chow V. T., Maidment D. R., Mays L. W. Applied Hydrology. New York: McGraw-Hill, 1988.

ConnectFlow Verification. Release 11.4 July 2016; Amec Foster Wheeler, 2016. <https://www.amecfw.com/services/specialist-services/connectflow/connectflow-overview>.

Contardi J. S., Turner D. R., Ahn T. M. Modeling colloid transport for performance assessment // Journal of Contam. Hydrol. 2001. Vol. 47. P. 323—333.

Crawford J., Moreno L., Neretnieks I. Determination of the flow-wetted surface in fractured media // Journal of Contam. Hydrol. 2003. Vol. 61. P. 361—369.

Cresser M., Edwards A. Acidation of Freshwater. Cambridge: Cambridge University Press, 1987.

Dagan G. Flow and Transport in Porous Formations. Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 1989.

Dagan G. Effective, equivalent, and Apparent Properties of Heterogeneous Media. Mechanics for a New Millennium / Eds. H. Aref, J. W. Phillips. Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 2001. P. 473—486.

Davis J. A., Kent D. B. Surface complexation modeling in aqueous geochemistry // Rev. Miner Geochem. 1990. Vol. 23. P. 177—260.

De Rooij G. H. Aquifer-scale flow equations as generalized linear reservoir models for strip and circular aquifers: Links between the Darcian and the aquifer scale // Water Res. Res. 2013. Vol. 49. P. 8605—8615; doi:10.1002/2013WR014873.

De Smedt F. Analytical solution for capture and catchment zones of a well located on a groundwater divide // *Water Resources Research* [Internet]. Wiley-Blackwell; 2014 Jan; 50 (1): 736—740; [http:// dx.doi.org/10.1002/2013wr014763](http://dx.doi.org/10.1002/2013wr014763).

De Smedt F. Analytical solution for the catchment zone of a well located near a groundwater divide in a recharged semi-confined aquifer // *Journal of Hydrology* [Internet]. Elsevier BV; 2014 Nov; 519:1271—7; <http://dx.doi.org/10.1016/j.jhydrol.2014.08.054>.

Delay J., Bossart P., Ling L. X. Three Decades of Underground Research Laboratories: What Have We Learned? Geological Society, London, Special Publications, 2014; doi 10.1144/SP400.1.

Deutsch C., Journel A. GSLIB, Geostatistical Software Library and User's Guide. Oxford: Oxford University Press, 1992.

Domenico P. A. An analytical model for multi-dimensional transport of a decaying contaminant species // *Journal of Hydrol.* 1987. Vol. 96. P. 47—58.

Domenico P. A., Robbins G. A. A new method of contaminant plume analysis // *Ground Water.* 1985. Vol. 23. N 4. P. 476—485.

Dria A. M., Byrant S. L., Schechter R. S., Lake L. W. Interacting precipitation/dissolution waves: The movement of inorganic contaminants in groundwater // *Water Res. Res.* 1987. Vol. 11. P. 2076—2090.

Drozdko E. G., Glagolenko Y. U. Environmental problems at the Mayak Site // *Joint Russian-American Hydrogeology Seminar.* July 8—9, PUB-804, LBNL. Berkeley, Calif., 1997. P. 5—14.

Elert M. Retention mechanisms and the flow wetted surface — implications for safety analysis. Kemakta Konsult AB. Technical report SKB # 97-01, 1997.

Engesgaard P. Groundwater Flow and Solute Transport. University of Copenhagen, Geological Institute, 2003.

Erickson T., Stefan H. G. Groundwater recharge from a changing landscape. S. Anthony Falls Laboratory. Project report 490. Minnesota Pollution Control Agency. St Paul, MN, 2007. P. 112.

Falta R. W., Pruess K., Finsterle S., Battistelli A. T2VOC. User's guide. Earth Science Division, Lawrence Berkeley Laboratory. Report No LBL-36400. Berkeley, 1995.

Farr A. M., Houghtalen R. J., McWhorter D. B. Volume estimation of light nonaqueous phase liquids in porous media // *Ground Water.* 1990. Vol. 28. N 1. P. 48—56.

Franzetti S., Guadagnini A. Probabilistic estimation of well catchments in heterogeneous aquifers // *Journal of Hydrol.* 1996. Vol. 174. P. 149—171.

Gao B., Walter M. T., Steenhuis T. S. Rainfall induced chemical transport from soil to runoff: theory and experiments // *Journal of Hydrol.* 2004. Vol. 295. P. 291—304.

Geetha K., Mishra S. K., Eldho T. I., Rastogi A. K., Pandey R. P. SCS-CN-based Continuous Simulation Model for Hydrologic Forecasting. 2008. Vol. 22. Issue 2. P. 165—190.

Gelhar L. W. Stochastic subsurface hydrology from theory to applications // *Water Res. Res.* 1986. Vol. 22 (9). P. 1355—1455.

Gelhar L. W. Stochastic subsurface hydrology. Prentice-Hall Inc, Englewood Clift, N. J. USA, 1993.

Gelhar L. W., Axness C. L. Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers // *Water Res. Res.* 1983. Vol. 19. N 1. P. 161—180.

Gemitzi A., Tolikas D. Development of a sharp interface model that simulates coastal aquifer flow with the coupled use of GIS // *Hydrogeol. Journal.* 2004. Vol. 12. Issue 3. P. 345—356.

Gingerich S. B., Voss C. I. Three-dimensional variable-density flow simulation of a coastal aquifer in southern Oahu, Hawaii, USA // *Hydrogeol. Journal.* 2005. Vol. 13. N 2. P. 437—450.

Goldberg S. Adsorption models incorporated into chemical equilibrium models // *Chemical equilibrium and reaction models / Eds. R. Loeppert, A. P. Schwab, S. Goldberg.* Soil. Sci. Soc. Am. Special Publication. 1995. N 42. P. 75—95.

Goldstein S. On the mathematics of exchange processes in fixed columns. I. Mathematical solutions and asymptotic expansions. Proceedings of the Royal Society of London. Series A // *Mathematical and Physical Sciences.* 1953. Vol. 219. N 1137. P. 151—171.

Guyonnet D., Neville C. Dimensionless analysis of two analytical solutions for 3-D solute transport in groundwater // *Journal of Contamin. Hydrol.* 2004. Vol. 75. P. 141—153.

Haggerty R., Gorelick S. M. Multi-rate mass transfer for modeling diffusion and surface reactions in media with pore-scale heterogeneity // *Water Res. Res.* 1995. Vol. 31. N 10. P. 2383—2400.

Haitjema H. M. On the residence time distribution in idealized groundwatersheds // *Journal of Hydrol.* 1995. Vol. 172. P. 127—146.

Hayes K. F., Leckie J. O. Modeling ionic strength effects on cation adsorption at hydrous oxide/solution interface // *Journal Colloid Interface Sci.* 1987. Vol. 115. P. 564—572.

Henry H. R. Salt intrusion into fresh-water aquifer // *Journal of Geophys. Res.* 1959. Vol. 64. N 11. P. 1911—1919.

Huntush M. S. Hydraulics of wells // *Advances in Hydroscience*, 1 / Ed. V. T. Chow. New York: Academic Press, 1964. P. 281—442.

Huysmans M., Dassargues A. Stochastic analysis of the effect of spatial variability of diffusion parameters on radionuclide transport in a low permeability clay layer // *Hydrogeol. Journal.* 2006. Vol. 14. P. 1094—1106.

Hyman J. D., Karra S., Makedonska N., Gable C. W., Painter S. L., Viswanathan H. S. DFNWORKS: A discrete fracture network framework

for modeling subsurface flow and transport // *Computers & Geosciences*. 2015. Vol. 84. P. 10—19.

Jennings A. A., Kirkner D. J., Theis T. L. Multicomponent equilibrium chemistry in groundwater quality models // *Water Res. Res.* 1982. Vol. 18. P. 1089—1096.

Kamensky I. L., Tokarev I. V., Tolstikhin I. N. 3H—3He dating: A case for mixing of young and old groundwaters // *GGA*. 1991. Vol. 55. N 10. P. 1899—2895.

Kim J. I. Actinide colloid generation in groundwater. Final Report for the CEC project MIRAGE II. RCM 01190, 1990. Institut für Radiochemie der Technischen Universität München.

Korom S. F., Schlag A. J., Schuh W. M., Schlag A. K. Natural denitrification in the saturated zone: A review // *Water Res. Res.* 1992. Vol. 28. P. 1657—1668.

Kueper B. H., Wealhall G. P., Smith J. W. N., Leharne S. A., Lerner D. N. An illustrated handbook of DNAPL transport and fate in the subsurface. Environment Agency R&D Publication No. 133. Bristol, 2003.

Lehto J., Harjula R. Selective separation of radionuclides from nuclear waste solutions with inorganic ion exchanger // *Radiochim. Acta*. 1999. Vol. 86. P. 65—70.

Leij F. J., Alves W. J., Van Genuchten M. Th., Williams J. R. The UN-SODA unsaturated soil hydraulic database. User's Manual, Version 1.0. Report IAG-DW 12933934. National risk management research laboratory office of research and development. USEPA Cincinnati, OHIO 45268, 1996. P. 1—103.

Lerner D. N. Well catchments and time-of-travel zones in aquifers with recharge // *Water Res. Res.* 1992. Vol. 28 (10). P. 2621—2628; <http://dx.doi.org/10.1029/92wr01170>.

Lerner D. N., Papatolios K. T. A simple analytical approach for predicting Nitrate concentrations in pumped ground water // *Ground Water*. 1993. Vol. 31. N 3. P. 370—375.

Lewis F. M., Voss C. I., Rubin J. Numerical simulation of advective-dispersive multisolute transport with sorption, ion exchange and equilibrium chemistry. 1986, Reston, Virginia USGS, Water-Resources Investigations Report 86 4022.

Lührmann L., Noseck U., Tix C. Model on contaminant transport in porous media in the presence of colloids applied to actinide migration in column experiments // *Water Res. Res.* 1998. Vol. 34. N 3. P. 421—426.

Maloszewski P., Zuber A. On the theory of tracer experiments in fractured rocks with a porous matrix // *Journal of Hydrol.* 1985. Vol. 79. P. 333—358.

Martos F. S. Las aguas subterráneas en el Bajo Andrax (Almería). Universidad de Almería, 2001.

McDonald M. G., Harbough A. W. MODFLOW, A Modular D3 Finite-Difference Ground-Water Flow Model USGS. 1988, Tec. Water-Resources Inv., Bk 6, Chap A1. Washington, DC.

McElwee C. D. Capture zones for simple aquifers // *Ground Water*. 1991. Vol. 29. N 4. P. 587—590.

Mercer I. W., Cohen R. M. A review of immiscible fluids in the subsurface: properties, models, characterization and remediation // *Journal of Contam. Hydrol*. 1990. N 6. P. 107—163.

Michel C., Vazken A., Perrin C. Soil conservation service curve number method: how to mend a wrong soil moisture accounting procedure // *Water Res. Res.* 2005. Vol. 41 (2). P. 1—6. doi:10.1029/2004WR003191.

Motz L. H. Salt-water upconing in an aquifer overlain by a leaky confining bed // *Ground Water*. 1992. Vol. 30. N 2. P. 192—198.

Neuman Sh. P. Continuum representation of fractured rock permeability as an alternative to the REV and fracture network concepts // *The 28th U. S. Symposium on Rock Mechanics (USRMS)*. 29 June—1 July, 1987. Tucson, Arizona, 1987. P. 533—561.

Neuman Sh. P. Universal scaling of hydraulic conductivities and dispersivities in geologic media // *Water Res. Res.* 1990. Vol. 26. N 8. P. 1749—1758.

Neville C. J. Solute transport in fractured-porous media: dual porosity simulations with MT3D. S. S. Papadopoulos & Associates, Inc., 2006.

Newell C. J., Acree S. D., Ross R. R., Huling S. G. Light nonaqueous phase liquids // *Ground Water Issue*. EPA, Office of Research and Development, Office of Soil Waste and Emergency Response. EPA/540/S-95/500. 1995.

Nicholson R. V., Gillham R. W., Reardon E. J. Pyrite oxidation in carbonate-buffered solution: 2. Rate control by oxide coatings // *Geochimica et Cosmochimica Acta*. 1990. Vol. 54. N 2. P. 395—402.

Novikov A. P., Kalmykov S. N., Utsunomiya S., Ewing R. C., Horreard F., Merkulov A., Clark S. B., Tkachev V. V., Myasoedov B. F. Colloid transport of Plutonium in the Far-Field of the Mayak Production Association, Russia // *Science*. 2006. Vol. 314. P. 638—641.

Parker J. C., Lenhard R. J., Kuppasamy T. A parametric model for constitutive properties governing multiphase flow in porous media // *Water Res. Res.* 1987. Vol. 23. N 3. P. 618—624.

Plummer A., Woodward D. E. The origin and derivation of Ia/S in the runoff curve number system // *Proceeding of the International Water Resources Engineering Conference, Water Resources Engineering 98*, ASCE Reston, VA, 1998. P. 1260—1265.

Poinssot C., Geckeis H. Overview of Radionuclide Behavior in the Natural Environment. *Radionuclide Behavior in the Natural Environment* / Eds. C. Poinssot, H. Geckeis. Woodhead Publishing Limited, 2012. P. 1—12.

Pollock D. W. User guide for MODPATH Version 7 — A particle-tracking model for MODFLOW: U.S. Geological Survey Open-File Report 2016-1086, 2016. <http://dx.doi.org/10.3133/ofr20161086>.

POSIVA 2010. Models and Data Report. POSIVA 2010-01. Posiva Oy, 2010. Olkiluoto, Finland.

Pozdniakov S., Tsang C.-F. A self-consistent approach for calculating the effective hydraulic conductivity of a binary, heterogeneous medium // *Water Res. Res.* 2004. Vol. 40. W05105. doi:10.1029/2003WR002617.

Pruess K., Oldenburg C., Moridis G. TOUGH2 — User's guide. Version 2.0. LBLN-43134. November 1999.

Rasmuson A., Neretnieks I. Radionuclide transport in fast channels in crystalline rock // *Water Res. Res.* 1986. Vol. 22. N 4. P. 1247—1256 b.

Reeves D. M., Benson D. A., Meerschaert M. M., Scheffler H.-P. Transport of conservative solutes in simulated fracture networks: 2. Ensemble solute transport and the correspondence to operator-stable limit distributions // *Water Res. Res.* 2008. Vol. 44. W05410. Doi:10.1029/2008WR006858.

The Release, dispersion and deposition of radionuclides. Chernobyl: Assessment of Radiological and Health Impact Update of Chernobyl: Ten Years On (2002); <https://www.oecd-nea.org/rp/chernobyl/c02.html>.

Rivlin J., Wallach R. An analytical solution for the lateral transport of dissolved chemicals in overland flow // *Water Res. Res.* 1995. Vol. 31 (4). P. 1031—1040.

Rozov K. B., Rumynin V. G., Nikulenkov A. M., Leskova P. G. Sorption of ^{137}Cs , ^{90}Sr , Se, ^{99}Tc , $^{152(154)}\text{Eu}$, $^{239(240)}\text{Pu}$ on fractured rocks of the Yeniseysky site (Nizhne-Kansky massif, Russia). *Journal of Environmental Radioactivity*. 2018. Vol. 192. P. 513—523.

Rubin J., James R. V. Dispersion-affected transport of reacting solutes in saturated porous media: Galerkin method applied to equilibrium-controlled exchange in unidirectional steady water flow // *Water Res. Res.* 1973. Vol. 9 (5). P. 1332—1356.

Rubin Y. Applied Stochastic Hydrogeology. New York: Oxford University Press Inc., 2003.

Rumynin V. G. Subsurface Solute Transport Models and Case Histories. Dordrecht: Springer, 2011.

Rumynin V. G. Overland Flow Dynamics and Solute Transport. Springer, 2015.

Rumynin V. G., Leskova P. G., Sindalovskiy L. N., Nikulenkov A. M. Effect of depth-dependent hydraulic conductivity and anisotropy on transit time distributions. *Journal of Hydrology*. 2019. Vol. 579. 124—161.

Rumynin V. G., Nikulenkov A. M. Geological and physicochemical controls of the spatial distribution of partition coefficients for radionuclides

(Sr-90, Cs-137, Co-60, Pu-239,240 and Am-241) at a site of nuclear reactors and radioactive waste disposal (St. Petersburg region, Russian Federation) // Journal of Environ. Radioactivity. 2016. Vol. 162—163. P. 205—218.

Saleem M., Al-Suwaiyan M. S., Aiban S. A., Ishaq A. M., Al-Malack M. H., Hussan M. Estimation of spilled hydrocarbon volume — the state-of-the-art // Environ. Technol. 2004. Vol. 25. P. 1077—1090.

Salve R. Observations of preferential flow during a liquid release experiment in fractured welded tuffs // Water Res. Res. 2005. Vol. 41. W09427; doi:10.1029/2004WR003570.

Samsonova L. M., Drozhko E. G. Migration of high-density industrial waste solutions through fresh groundwaters // Deep Injection Disposal of Hazardous and Industrial Waste. Scientific and Engineering Aspects / Eds. by J. A. Apps, C.-F. Tsang. Academic Press, 1996. P. 669—680.

Schulze-Makuch D. Longitudinal dispersivity data and implications for scaling behavior // Ground water. Vol. 43. N 3. P. 443—456.

Shuman L. M. Effect of ionic strength and anions on zink adsorption by two soils // Soil Sci. Soc. of Amer. Journal. 1986. Vol. 50. N 6. P. 1438—1442.

Sindalovskiy L. N. Aquifer Test Solutions. A Practitioner's Guide with Algorithms Using ANSDIMAT. Springer, 2017.

SKB 2006. Data report for the safety assessment SR-Can. SKB TR-06-25. Svensk Kärnbränslehantering AB, Stockholm, Sweden.

SKB 2017. Äspö site descriptive model Geological single-hole interpretation of KAS04, KAS06 and KAS08. Svensk Kärnbränslehantering AB Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co.

Solomon D. K., Sudicky E. A. Tritium and helium-3 isotope ratios for direct estimation of spatial variations in groundwater recharge // Water Res. Res. 1991. Vol. 27 (9). P. 2309—2319.

Strack O. D. L. A single-potential solution for regional interface problems in coastal aquifers // Water Res. Res. 1976. Vol. 12. N 6. P. 1165—1174.

Strack O. D. L. Analytical groundwater mechanics. Cambridge: Cambridge University Press, 2017.

Tsang C.-F., Neretnieks I., Tsang Y. W. Hydrologic issues associated with nuclear waste repositories. 2015. Vol. 51. N 9. P. 6923—6972; doi.org/10.1002/2015WR017641.

Tsang Y. W., Tsang C.-F. Hydrological characterization of variable-aperture fractures // Rock Joints. Balkema, 1990.

Tsang Y. W., Tsang C.-F., Hale F. V., Dverstorp B. Tracer transport in a stochastic continuum model of fractured media // Water Res. Res. 1996. Vol. 32. N 10. P. 3077—3092.

Understanding variation in partition coefficient, K_d, values. Vol. II: Review of Geochemistry and Available K_d Values for Cadmium, Cesi-

um, Chromium, Lead, Plutonium, Radon, Strontium, Thorium, Tritium (3 H), and Uranium. — USA EPA Report No. 402-R—99-004B, August 1999.

USDA. Urban Hydrology for Small Watersheds. Technical Release 55 (TR 55). Washington, DC. 1986.

Valocchi A. J., Street R. L., Roberts P. V. Transport of ion-exchanging solutes in groundwater: chromatographic theory and field simulation // *Water Res. Res.* 1981. Vol. 17 (5). P. 1517—1527.

Van de Weerd H., Leijnse A., van Riemsdijk W. H. Transport of reactive colloids and contaminants in groundwater: effect of nonlinear kinetic interactions // *Journal of Contam. Hydrol.* 1998. Vol. 32. P. 313—331.

Van der Zee, S. E. A. T. M. Analytical traveling wave solution for transport with nonlinear and nonequilibrium adsorption // *Water Res. Res.* 1990. Vol. 26. N 10. P. 2563—2578.

Vandergraaf T. T., Abry D. R. M. Radionuclide sorption in drill core material from the Canadian Shield // *Nucl. Technol.* 1982. Vol. 57. P. 399—412.

Van Genuchten M. Th. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils // *Soil Sci. Soc. Amer. Journal.* 1980. Vol. 44. P. 892—898.

Van Genuchten M. Th., Alves W. J. Analytical Solutions of the One-Dimensional Convective-Dispersive Solute Transport Equation // U. S. Department of Agriculture. Technical Bulletin. 1982. N 1661. 151 p.

Vilks P., Cramer J. J., Bachinski D. B., Doern D. C., Miller H. G. Studies of colloids and suspended particles, Cigar Lake uranium deposit, Saskatchewan, Canada // *Appl. Geochem.* 1998. Vol. 8. P. 605—616.

Vilks P., Dequclare C. Sorption behavior of Sr-85, I-131 and Cs-137 on colloids and suspended particles from the Grimsel Test Site, Switzerland // *Appl. Geochem.* 1991. N 6. P. 553—563.

Viswanathan H. S., Robinson B. A., Gable C. W., Carey J. W. A geo-statistical modeling study of the effect of heterogeneity on radionuclide transport in the unsaturated zone, Yucca Mountain // *Journ. of Contam. Hydrol.* 2003. Vol. 62—63. P. 319—336.

Wellhead Protection Area (WHPA) Model.

West M. R., Kueper B. H., Unger M. J. On the use and error of application in the Domenico (1987) solution // *Ground Water.* 2007. Vol. 45. N 2. P. 126—135.

Willis C., Rubin V. Transport of reacting solutes subject to a moving dissolution boundary: numerical methods and solutions // *Water Res. Res.* 1987. Vol. 23 (8). P. 1561—1574.

Wolkersdorfer C. Water management at abandoned flooded underground mines. Fundamentals. Tracer tests. Modelling. Water treatment. Springer, 2008.

Xu T., White S. P., Pruess K., Brimhall G. H. Modeling of pyrite oxidation in saturated and unsaturated subsurface flow systems // *Transport in Porous Media*. 2000. Vol. 39. P. 25—56.

Yeh G.-T., Tripathi V. S. A Model for Simulating Transport of Reactive Multispecies Components: Model Development and Demonstration. 1991. Vol. 27 (12). P. 3075—3094.

Zheng C. MT3DMS. A modular three-dimensional multispecies transport model (v.5.3). University of Alabama, 2010.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
Часть I. ОСНОВНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ О ЗАГРЯЗНЕНИИ ПОДЗЕМНЫХ ВОД, УСЛОВИЯХ И ПРОЦЕССАХ, ЕГО КОНТРОЛИРУЮЩИХ	6
Глава 1. Факторы и критерии, определяющие загрязнение подземных вод	7
1.1. Качество подземных вод в контексте современного законодательства	7
1.2. Типы загрязняющих растворов	10
1.3. Типы источников загрязнения подземных вод	12
1.4. О расчетных моделях миграции вещества в водоносных породах	14
Глава 2. Конвективный перенос растворенного вещества в водоносных горизонтах	15
2.1. Основные уравнения движения частиц жидкости	17
2.2. Активная пористость (трещиноватость)	23
2.3. Миграция вещества в плановых фильтрационных потоках	25
2.3.1. Миграция в плановом квазиодномерном фильтрационном потоке	26
2.3.2. Модель резервуарного типа	29
2.3.3. Миграция в плановом двухмерном (в плоскости $x-y$) фильтрационном потоке	39
2.4. Задача о миграции вещества в профильном (в плоскости $x-z$) фильтрационном потоке, наведенном инфильтрацией	46
2.4.1. Приближение Дюпюи—Форхгеймера	46
2.4.2. Функция кумулятивного распределения и концентрационный профиль	51
2.4.3. Профильно-неоднородный пласт	53
2.4.4. Решение профильной фильтрационной задачи в строгой постановке	55
2.5. Сорбция и деструкция (распад)	63
2.5.1. Линейная сорбция	63
2.5.2. Деструкция (распад)	66

Глава 3. Дисперсия вещества в водоносных горизонтах	76
3.1. Базовая дисперсионная модель и параметры, ее определяющие	76
3.1.1. Исходные предпосылки	77
3.1.2. Параметры, определяющие диффузионно-дисперсионные явления	79
3.1.3. Фактор сорбционной задержки и распад в структуре уравнения массопереноса	81
3.1.4. Некоторые частные решения	82
3.2. Макродисперсия в гетерогенных породах и масштабные эффекты	86
3.2.1. О масштабах макродисперсии	87
3.2.2. Стохастические модели макродисперсии	88
3.3. Модели миграции вещества в трещиноватых и трещиновато-пористых породах	99
3.3.1. Модели эквивалентной пористой среды (EPM)	100
3.3.2. Физические эффекты, ограничивающие применение EPM моделей	107
3.3.3. Модели стохастически-непрерывной среды (SCM)	113
3.3.4. Модели дискретной трещиноватой среды (DFN)	114
Глава 4. Миграционные модели нелинейных сорбционных взаимодействий и физико-химических трансформаций . .	115
4.1. Нелинейная физическая сорбция	115
4.1.1. Поршневое вытеснение	116
4.1.2. Влияние нелинейной сорбции на характер дисперсионного фронта	119
4.2. Ионный обмен	122
4.2.1. Общие представления о процессе	122
4.2.2. Формирование ионообменных фронтов (поршневое вытеснение)	128
4.2.3. Ионный обмен при конвективно-дисперсионном переносе	134
4.3. Модель поверхностного комплексообразования	138
4.4. Закономерности миграции компонентов, участвующих в процессах растворения/осаждения	142
4.4.1. Термодинамика процессов растворения/осаждения	142
4.4.2. Простейшая модель равновесного растворения минерала в потоке подземных вод	144
4.4.3. Процессы равновесного растворения/осаждения вещества применительно к растворам сложного состава на подвижных гидрогеохимических барьерах	148
4.5. Модели многокомпонентного переноса	154

4.5.1. Комплексообразование с участием неконсервативных компонентов	154
4.5.2. Модельные подходы к описанию миграции многокомпонентных растворов	159
Часть II. ЗАГРЯЗНЕНИЕ ПОДЗЕМНЫХ ВОД НА ВОДОЗАБОРАХ	165
Глава 5. Основы гидрогеологических расчетов для обоснования ЗСО и тестовые примеры	169
5.1. Водозабор в потоке грунтовых вод	171
5.1.1. Конфигурация зон захвата и изохроны при отсутствии инфильтрации	171
5.1.2. Влияние площадного инфильтрационного питания горизонтов на конфигурацию зон захвата	178
5.2. Водозабор в речной долине	181
5.2.1. Расчетная часть	183
5.2.2. О значимости процессов самоочищения при фильтрации воды через отложения, слагающие прибрежную зону реки	186
5.3. О вероятностном подходе к оценке параметров зоны захвата скважины в естественном фильтрационном потоке	190
5.4. Расчет параметров ЗСО с использованием модельного комплекса ANSDIMAT	192
5.4.1. Краткая характеристика программы	193
5.4.2. Пример расчета зоны санитарной охраны для группового водозабора	194
5.4.3. Влияние инфильтрационного питания	196
Глава 6. Изменение качества подземных вод при подтягивании к водозаборам природных некондиционных вод или при нарушении природных гидрохимических условий	197
6.1. Субгоризонтальная миграция от подземного источника природных некондиционных вод	198
6.1.1. Вводные замечания и иллюстративный пример	198
6.1.2. Приближенные аналитические решения	201
6.2. Субвертикальная миграция от подземного источника природных некондиционных вод	204
6.2.1. Решение для функции минерализации, не учитывающее влияние плотностного градиента	205
6.2.2. Равновесный купол соленых вод под несовершенной эксплуатационной скважиной	209
6.3. Водозаборы подземных вод на морских побережьях	214
6.3.1. Стационарная граница раздела пресной и морской воды	214
6.3.2. Деформация границы раздела пресной и морской воды вблизи откачивающей скважины	217

6.3.3. Пример: модельные исследования влияния интрузии морских вод на качество подземных вод в дельте р. Андалракс (провинция Альмерия, Испания)	225
6.4. Влияние окисления сульфидов в зоне аэрации на качество откачиваемых вод	234
6.4.1. Определяющие факторы и масштабы процесса	234
6.4.2. Математическая модель	237
Глава 7. Пример изучения природных и техногенных факторов воздействия на водозаборы подземных вод в межгорном артезианском бассейне (Хибины, Кировский горнопромышленный район, Мурманская область)	238
7.1. Гидрогеологические условия	241
7.2. Динамика водоотбора подземных вод	242
7.3. Природное качество подземных вод на водозаборах и его вариации	244
7.4. Анализ воздействия антропогенных факторов на качество подземных вод	246
7.5. Изотопная идентификация генезиса азотных соединений и определение возраста воды	252
Часть III. ЗАГРЯЗНЕНИЕ ПОДЗЕМНЫХ ВОД ПРИ ОСВОЕНИИ МЕСТОРОЖДЕНИЙ ТВЕРДЫХ ПОЛЕЗНЫХ ИСКОПАЕМЫХ И В РАЙОНАХ НЕФТЕДОБЫЧИ	255
Глава 8. Актуальные проблемы загрязнения подземных вод в горнодобывающих районах	256
8.1. Эксплуатационный период	257
8.1.1. Влияние горного дренажа	257
8.1.2. Источники техногенного загрязнения подземных вод (общая характеристика).	259
8.1.3. Шахтные воды	260
8.1.4. Горные отвалы	262
8.2. Постэксплуатационный период	262
8.2.1. Медноколчеданные рудники Среднего Урала	264
8.2.2. Кузбасс	265
8.2.3. Кизеловский каменноугольный бассейн	266
8.2.4. Восточный Донбасс (Гавришин и др., 2003; Гавришин, Корadini, 2009; Панова, 2013)	267
8.2.5. Районы добычи урановой руды	268
Глава 9. Анализ условий и прогноз миграции пресных загрязненных вод от хвостохранилищ ГОКов и горных отвалов	273
9.1. Хвостохранилища	274
9.1.1. Особенности гидрогеологических прогнозов	274

9.1.2. Пример прогноза распространения загрязненных вод в реальных гидрогеологических условиях (Губкинско-Стойленский железорудный район КМА)	278
9.1.3. Гидрохимические преобразования промстоков в системе «техногенный бассейн—донные осадки—водоносный горизонт»	287
9.2. Горные отвалы	289
9.2.1. Ковдорское железорудное месторождение (Кольский полуостров)	289
9.2.2. Коашвинское апатит-нефелиновое месторождение (Хибинский щелочной массив)	291
Глава 10. Миграция рассолов в зоне влияния предприятий горно-химического производства	295
10.1. О некоторых особенностях миграции растворов переменной плотности	296
10.2. Изучение и прогноз процессов засоления подземных вод на Верхнекамском месторождении калийно-магниевых солей	300
10.2.1. Участок шахтного поля БКРУ-2	302
10.2.2. Участок шахтного поля СКРУ-3	308
Глава 11. Подтягивания глубинных рассолов к контурам дренажа (на примере Коршуновского железорудного месторождения, Восточная Сибирь)	315
11.1. Дренажные мероприятия и режим подземных вод, нарушенный горными работами	316
11.1.1. Основные водоносные горизонты	316
11.1.2. Естественная гидрохимическая зональность	318
11.2. Модельные оценки	319
11.2.1. Схематизация и численная модель	320
11.2.2. Результаты моделирования	321
11.2.3. Интерпретация данных откачки	323
Глава 12. Загрязнение подземных вод рассолами при эксплуатации нефтяных месторождений (на примере юго-восточных районов Республики Татарстан)	323
12.1. История техногенного загрязнения подземных вод при освоении нефтяных месторождений региона (Анисимов, Пухов, 2007).	324
12.2. Разведка очагов загрязнения (Учаев и др., 2007б)	328
12.3. Гидрогеологические исследования и наблюдения на опытном полигоне «Васильевка» (Учаев и др., 2007а)	334
12.3.1. Гидрогеологическая характеристика опытного полигона	335
12.3.2. Режимные наблюдения	339
12.3.3. Полевые эксперименты в зоне аэрации	342

12.3.4. Геофизический мониторинг	346
12.3.5. Использование тритий/гелий-3 метода определения возраста подземных вод	347
Часть IV. ЗАГРЯЗНЕНИЕ ПОДЗЕМНЫХ ВОД ЖИДКИМИ УГЛЕВОДОРОДАМИ.	349
Глава 13. Физико-математические основы описания поведения NAPL в подземной гидросфере	351
13.1. Спецификация многофазной системы	351
13.2. Обобщенный закон Дарси	353
13.3. Явления капиллярности и смачивания	356
13.3.1. Характеристики, определяющие проявление молекулярных сил на границах раздела фаз	357
13.3.2. Фазовые давления в капиллярах и пористых средах	358
13.4. Основные параметрические функции, используемые для описания фильтрации NAPL и воды в многофазных системах	362
13.4.1. Основные модели гидрофизической (капиллярной) характеристики	363
13.4.2. Экстраполяционные зависимости для двухфазных систем	364
13.4.3. Относительная фазовая проницаемость	365
13.5. Межфазовый обмен.	366
13.5.1. Растворение	368
13.5.2. Сорбция	368
13.6. Фильтрация в отсутствие межфазового обмена	370
Глава 14. Примеры исследования и прогноз загрязнения подземных вод NAPL	377
14.1. Особенности поведения NAPL в подземной гидросфере (качественный анализ)	378
14.1.1. Типы и свойства NAPL	378
14.1.2. Особенности поведения NAPL в подземной гидросфере	379
14.1.3. Особенности скважинного контроля	384
14.2. Пример исследования загрязнения подземных вод легкими углеводородными соединениями (участок Loma la Lata, Аргентина)	388
14.2.1. Краткая характеристика процесса	388
14.2.2. Моделирование трехфазной фильтрации	391
14.3. Пример исследования загрязнения подземных вод тяжелыми хлорорганическими соединениями (участок расположения предприятия Саянхимпром, Иркутская область)	397
14.3.1. Гидрогеологические условия	397

14.3.2. Характер и масштаб загрязнения подземных вод	400
14.3.3. Математическая модель и результаты моделирования	404
Часть V. МИГРАЦИЯ ТЕХНОГЕННЫХ РАДИОНУКЛИДОВ . .	408
Глава 15. Радиоактивный распад и особенности физико-химического поведения радионуклидов в подземной гидросфере	411
15.1. Радиоактивный распад	411
15.2. Влияние сорбционных процессов на миграцию радионуклидов	413
15.2.1. Kd-концепция, ее достоинства и недостатки	414
15.2.2. Нелинейные изотермы сорбции и десорбции радионуклидов	421
15.2.3. Пространственная изменчивость сорбционных параметров	424
15.2.4. Пример определения эффективного фактора сорбционной задержки радионуклида для зоны тектонической (сдвиговой) деформации .	429
Глава 16. Физико-химические процессы, обуславливающие повышенную подвижность сорбирующихся радионуклидов в водоносных горизонтах	432
16.1. Влияние комплексообразования ионов в растворе .	433
16.2. Коллоидный транспорт радионуклидов в водоносных горизонтах	439
16.2.1. Общие представления о коллоидах и их генезисе	440
16.2.2. Скорость миграции коллоидов и их аккумуляция в фильтрующих средах	442
16.2.3. Адсорбция компонентов на коллоидах (статические представления)	443
16.2.4. Влияние сорбции радионуклидов на коллоидах на конвективный перенос	445
16.3. Пример определения коллоидных форм миграции радионуклидов на полигоне захоронения РАО Сибирского химического комбината	447
16.3.1. Изучение адсорбции плутония на коллоидах из модельных растворов	448
16.3.2. Изучение коллоидных форм миграции радионуклидов на участке загрязнения природных вод	450
16.4. Быстрый транспорт радионуклидов в составе нитратных рассолов (участок радиоактивного загрязнения подземных вод «оз. Карачай», Челябинская область)	451

16.4.1. Общие представления об условиях радиоактивного загрязнения подземных вод	452
16.4.2. Структура потока загрязненных вод	455
16.4.3. Основные гидрогеохимические процессы	456
16.5. Влияние на сорбируемость радионуклидов конкурирующих ионов — продуктов растворения минеральной фазы породы	462
Глава 17. Опыт изучения глинистых толщ и кристаллических массивов как геологических сред для окончательной изоляции РАО	465
17.1. О новой концепции обращения с РАО, зарубежный и отечественный опыт обращения с РАО на современном этапе	465
17.2. ПЗРО в вендских глинах (Сосновоборский район Ленинградской области)	468
17.2.1. Водно-физические и физико-механические свойства	469
17.2.2. Фильтрационные и геомиграционные свойства глин	472
17.2.3. Сравнение вендских глин (Vkt) с глинистыми формациями в Западной Европе (BC, COx и OPA)	474
17.3. ПЗРО в гнейсовом массиве (участок «Енисейский», Красноярский край).	475
Глава 18. Воздействие выбросов с АЭС на радиоактивность почв, поверхностных и подземных вод	480
18.1. Общие представления об радиоэкологических последствиях эксплуатации АЭС	480
18.1.1. Краткая история аварийных событий	481
18.1.2. Проектные параметры радиоактивных выбросов на АЭС	484
18.2. Особенности поведения радионуклидов в почвах и водных объектах по данным мониторинга на радиоактивно загрязненных участках	487
18.3. Обоснование масштаба и конфигурации модельной области	489
18.4. Основные механизмы и модельные подходы	491
18.4.1. Генерации поверхностного стока	492
18.4.2. Модели с распределенными параметрами	494
18.4.3. Модели с сосредоточенными параметрами	506
18.5. Расчетная модель для прогноза миграции радионуклидов	510
18.5.1. Баланс радионуклидов в почвенном слое	511
18.5.2. Базовые решения для концентрационной функции в слое смешения	513

18.5.3. Миграция радионуклидов с подземным стоком	515
18.5.4. Модель фрагментации атмосферных осадков	516
18.5.5. Численно-аналитические расчеты для одиночного бассейна	523
18.5.6. Модель связанных потоков для «цепочек» бассейнов	527
18.6. Заключительные ремарки.	529
ЛИТЕРАТУРА	532

Научное издание

Вячеслав Гениевич Румынин

**ТЕОРИЯ И МЕТОДЫ ИЗУЧЕНИЯ ЗАГРЯЗНЕНИЯ
ПОДЗЕМНЫХ ВОД**

Учебник для вузов

*Утверждено к печати
Учебно-методической комиссией
Института наук о Земле СПбГУ,
решение от 19 июня 2019 г. № 06/05-03-7-1*

Редактор издательства *Т. Л. Ломакина*
Художник *П. Э. Палей*
Компьютерная верстка *Т. Н. Поповой*

Подписано к печати 29.07.2020. Формат 60×90^{1/16}. Бумага офсетная.
Гарнитура Таймс. Печать офсетная. Усл. печ. л. 35. Уч.-изд. л. 33.
Тираж 170 экз. Тип. зак. №

ФГУП «Издательство «Наука»
117997 г. Москва, ул. Профсоюзная, 90
тел.: +7(495)276-77-35, e-mail: info@naukaran.com
<https://naukapublishers.ru>
<https://naukabooks.ru>

Санкт-Петербургский филиал
ФГУП «Издательство «Наука»
199034 г. Санкт-Петербург, 9-я линия В. О., 12/28
тел.: +7(812)655-65-01, e-mail: secretspb@naukaran.com

Отпечатано в ФГУП «Издательство «Наука»
(Типография «Наука»)
121099, Москва, Шубинский пер., 6

ISBN 978-5-02-040326-0



9785020403260