

DEVELOPMENT OF MATHEMATICAL MODELS OF GROUNDWATER CONTAMINATION FROM TECHNOLOGICAL SOURCES - A METHODOLOGICAL APPROACH

Nikolay Stoyanov

University of Mining and Geology “St. Ivan Rilski”, 1700 Sofia, e-mail: nts@mgu.bg

ABSTRACT. The study proposes a general methodological approach for mathematical modelling of groundwater contamination from sources, such as mining sites, waste dumps, agricultural fields, and large engineering facilities. Key pollutants have been carefully selected for detailed investigation in quantitative assessments and predictions. The boundaries and components of the migration field marking the framework of the model area for each specific object are defined. A general modelling concept is presented, encompassing the complete substance transport mechanism - convective-diffusion transport. The latter includes considerations of sorption-desorption, mechanical dispersion, irreversible elimination (natural decay and sedimentation), and mixing. Brief introductions to key modelling tools for contaminant movement through saturated and unsaturated media, such as the VS2DI, Modflow, and MT3D-MS computer codes, are also provided.

Keywords: hydrogeological modelling, mass transport models, groundwater contamination, ecology.

МЕТОДИЧЕН ПОДХОД ЗА РАЗРАБОТВАНЕ НА МАТЕМАТИЧЕСКИ МОДЕЛИ НА ЗАМЪРСЯВАНЕТО НА ПОДЗЕМНИ ВОДИ ОТ ТЕХНОГЕННИ ИЗТОЧНИЦИ

Николай Стоянов

Минно-геоложки университет “Св. Иван Рилски”, София 1700

РЕЗЮМЕ. Предложен е общ методичен подход за математическо моделиране на замърсяването на подземни води от минни обекти, депа за отпадъци, селскостопански обекти, големи инженерни съоръжения и др. Направен е аргументиран избор на ключови замърсители, които е необходимо да бъдат изследвани при количествени оценки и прогнози. Дефинирани са границите и компонентите на миграционното поле, маркиращо рамката на моделната област за всеки конкретен обект. Представена е обща концепция за моделиране, включваща и описание на механизма на пренос на вещество в пълния му вид – конвективно-дифузионен пренос, с отчитане на процесите на сорбция-десорбция, механична дисперсия, необратимо елиминиране (естествен разпад и утаяване) и смесване. Накратко са представени и основните инструменти за моделиране движението на замърсители в ненаситена и наситена среда - компютърни кодове VS2DI, Modflow и MT3D-MS.

Ключови думи: хидрогеолошко моделиране, миграционни модели, замърсяване на подземните води, екология.

Въведение

Като основен инструмент за изследване и прогнозиране на техногенното замърсяване на подземните води през последните десетилетия в световната практика се наложиха компютърните математически модели. Обект на тези модели е движението на различни по вид и генезис замърсители в подповърхностното пространство от различни повърхностни и подземни източници – минни обекти, депа за отпадъци, селскостопански обекти, големи инженерни съоръжения и др. При тяхното разработване се отчитат конкретните природни и техногенни условия в изследваната част от хидрогеоложката структура, диферинцирано или по-обобщено в ненаситената и водонаситената зона. В зависимост от поставените цели моделите имат различен пространствено-времеви обхват и съответстващ на изследваните замърсители механизъм за описване на миграционните процеси. Разнообразни са и възможностите за използване на различен софтуер за симулиране на едномерни, двумерни и тримерни процеси в ненаситена и водонаситена среда. През годините в хидрогеоложкото моделиране са използвани с различен успех много компютърни програми. На база на постигнатите резултати при моделиране на процесите във водонаситена среда, особено ефективни са компютърните програми Modflow, Modpath и MT3D-MS, включени в стандартните софтуерни продукти GMS, Visual Modflow, Groundwater Vistas, PMWIN, Modflow-USG и др. (Anderson et al., 2015; Стоянов, 2019). В повечето от тези продукти вече има и модули за моделиране миграцията в ненаситената зона, но за по-сложни модели те изискват доста по-големи

хардуерни ресурси. Ето защо за целта е препоръчително да се ползват някои от утвърдените в практиката компютърни програми за среди с променлива водонаситеност като Hydrus (Šimůnek et al., 2008), VS2DI (Hsieh et al., 2000) и др. Това е един много удобен подход за моделиране на замърсяването на подземните води от повърхностни източници. При него миграционната задача в ненаситената зона се решава с едномерни и/или двумерни модели, съставени с някои от посочените специализирани програми и на базата на получените решения посредством Modflow и MT3D-MS да се разработят тримерни модели на последващото разпространение на замърсителят във водоносните пластове.

Общи методически подходи и указания за съставяне на модели на замърсяването на подземните води, както и голям брой илюстративни практически примери могат да се намерят не само в ръководствата към съответния софтуер, но и в редица тематични книги, учебници, монографии и други публикации (Ostrom et al., 2016; Antonov et al., 2019; Antonov et al., 2020; Dahan 2020; Gerginov et al., 2020; Стоянов, 2015, 2019). В настоящата статия, въз основа на тридесетгодишния опит на автора в тази сфера и съобразно действащата у нас нормативна база, са представени някои важни стъпки, конвенции и инструменти при съставянето на модели на замърсяването на подземни води от техногенни източници. Разгледани са въпроси, относно избора на ключови замърсители, дефинирането на границите и елементите на миграционното поле, последователността на работа при съставянето на моделите, процесите за описване преноса на вещество и математическия апарат, използван в VS2DI, Modflow и MT3D-MS.

Избор на ключови замърсители

Математическите модели на замърсяването на подземните води не е нужно да включват изследване на поведението на всички замърсители в източника на замърсяване. Макар и привлекателен като възможност, екстензивният подход на изследване е свързан с огромни разходи на средства, без това да се компенсира с по-високо качество на крайните резултати. Същевременно, не винаги е възможно и да се посочат конкретни данни за вида и концентрациите на целия букет от замърсители в източника. Ето защо, за всеки конкретен източник от големия брой замърсители се избират два или по-рядко повече ключови замърсители, по отношение на които се правят количествени екологични оценки и прогнози чрез проиграване на различни консервативни сценарии. Главни критерии при този избор са: (i) концентрацията на замърсителя в източника на замърсяване – емитера; (ii) подвижността на замърсителя в подповърхностното пространство и подземните води; (iii) способността на замърсителя да влияе върху киселинността и окислително редукирания потенциал на средата, респ. да генерира промени на геохимичните бариери; (iv) вредното въздействие върху човешкото здраве и околната среда. Последният критерий визира не само прякото въздействие на замърсителя като особено опасен или много вреден, но и неговата роля на катализатор на физикохимични процеси, които биха влошили общата екологична обстановка.

Основните задачи на моделните изследвания е посредством компютърни симулации да се направят количествени оценки и прогнози за:

- Максималния обхват на замърсяването около източника, респ. на пространствените граници на зоната на въздействие върху елементите на околната среда, в това число върху подземните и повърхностните води.
- Границите на най-интензивно замърсяване с токсични замърсители (например с тежки метали, радионуклиди и др.) около източника.

Така дефинираните задачи до известна степен определят и избора на ключови замърсители за всеки конкретен обект. Първата задача предполага моделите да симулират поведението на практически несорбируеми и съдържащи се в големи количества замърсители. Такива са например хлоридните йони (Cl), сулфатните йони (SO₄), пестициди, инсектициди, някои органични вещества от типа на ТСЕ, РСЕ и др. При втората задача е уместно да се симулира поведението на по-подвижните тежки метали, тъй като те са определящи маркери за детерминиране на зоните с най-интензивно замърсяване около източниците. Например, такива са някои от много токсичните метали и металоиди като кадмий (Cd), арсен (As) и др. При радиоактивен източник като ключови замърсители се определят радионуклиди, имащи висока концентрация в източника, голяма подвижност във филтрационна среда и възможно по-голям период на полуразпад. Подобен избор се прави и при наличие на органични, саморазпадащи се вещества в източника. Около източници с биоразградими отпадъци като депа за битови отпадъци, ферми и пр., основен индикатор са амониевите йони (NH₄).

Обхват и компоненти на миграционното поле

Моделните изследвания е необходимо да обхващат цялата площ и всички компоненти на миграционното поле, включващо тази част от подповърхностното пространство, където се очаква да мигрират постъпилите от източника замърсители. В план, полето заема територията от източника на замърсяване (емитера) до първия приемник (реципиент). По дефиниция като такъв се приема най-близката река, дере или повърхностен водоем, в който се дренира замърсения подземен поток. В разрез миграционното поле обикновено включва три основни компонента:

- инженерните защитни бариери в основата на източника (бетонни фундаменти, бетонни облицовки, глинести екрани, геомембрани, геосинтетични облицовки и други защитни елементи, препятстващи прякото навлизане на замърсители в подповърхностното пространство);
- ненаситената зона под източника на замърсяване, включваща пространството от неговата основа или от долнището на най-дълбоко разположената инженерна бариера до нивото на подземните води, т.нар. зона на аерация. (*Забележка: Формално инженерните бариери са част от ненаситената зона*);
- водонаситената част от подповърхностното пространство, включваща водоносни и разделящи пластове и зони от състава на потенциално застрашения водоносен комплекс.

Ще отбележим, че трите компонента са обект на разглеждане при моделиране на повърхностни и в различна степен защитени източници на замърсяване. За обекти с подземни източници, разположени под нивото на подземните води, моделите обхващат единствено водонаситената част от подповърхностното пространство. В последния случай инженерните бариери се разглеждат като елемент от водонаситената зона.

Обща схема за провеждане на моделните изследвания

Моделните изследвания за оценка и прогнозиране на миграцията на избрани ключови замърсители, постъпващи в подповърхностното пространство при различни хидрогеоложки условия и от различни по вид техногенни източници е уместно да бъдат провеждани по една обща схема, засягаща специфичните характеристики на източника, параметрите на природната среда, последователността и съдържанието на изчислителните процедури, използвания софтуер, визуализацията на резултатите и др. Целта е към всеки конкретен обект да се прилага един общ унифициран подход, осигуряващ равно по достоверност доближаване на моделите до реалните условия и процеси, както и по-добра възможност за систематизация, анализ и интерпретация на получените за различните обекти резултати. Разбира се, предложената обща схема може да бъде опростявана или допълвана, в зависимост от важността на съответното изследване.

Главните изходни позиции в тази схема са следните:

- Условието за миграция на замърсителите през ненаситената зона и инженерните бариери (при наличие на такива) се симулират посредством двумерни (2D) модели, а разпространението им в подземните води – с тримерни (3D) модели. Получените двумерни решения

се използват като входни данни при разработването на тримерните модели. Възможно е да се разработят и по-сложни 3D модели, които включват всички елементи на миграционното поле, но те изискват многократно по-голям компютърен ресурс, особено при изготвянето на дългосрочни прогнози. Същевременно, разделянето на процесите в ненаситената и водонаситена среда не намалява априори точността на моделните решения, дори напротив – прави моделите по-устойчиви и дава възможност за по-прецизирани анализи и прогнози.

- Моделната област в двумерните модели обхваща разрезите, преминаващи през централната част на източника – в направление по посока на подземния поток. Моделната област в тримерните модели обхваща цялата територия от източника до първия реципиент на замърсения подземен поток.
- Хидрогеоложките единици и инженерните бариери се пресъздават в пълно съответствие с техните основни характеристики: геометрични – дебелина, дължина или площ на разпространение; физични – плътност, порестост; филтрационни – коефициент на филтрация, коефициент на водоотдаване; миграционни – коефициенти на разпределение, дисперсивност и молекулярна дифузия. В зоната на аерация допълнително са зададени и специфичните за ненаситената среда параметри: естествена влажност, коефициент на влагопроводност и връзката между всмукващия потенциал и влажността.
- Вертикалното инфилтрационно подхранване се определя в съответствие с климатичните, геоложките и техногенните условия в района на изследвания обект.
- Механизмът на масопренасяне се задава във възможно най-пълния му вид: конвективно-дифузионен пренос, съпроводен с процеси на сорбция/десорбция, механична дисперсия, необратимо елиминиране (радиоактивен разпад, утаяване), смесване и пр.
- Приемат се и някои опростяващи моделите разумно консервативни допускания: (i) инфилтрационният поток през инженерните бариери и в площта извън границите на източника е равномерно разпределен; (ii) концентрацията на замърсителите е променлива, функция на прилаганата технология и времето от началото на експлоатацията на обекта, хомогенно разпределена по участъци в източника.
- С моделите се симулира миграцията на предварително избраните по-силно и по-слабо подвижни ключови замърсители, които дават цялостна представа за възможното разпространение на постъпилите от източниците замърсители в подпочвеното пространство и подземните води. Максималният обхват на замърсяването се маркира от практически несорбируемите и най-подвижните замърсители като Cl, SO₄ и др., а най-засегнатата зона се очертава от силно сорбируемите и много слабо подвижни замърсители, например NH₄ или тежките метали As, Cd и много други.
- Тъй като абсолютната концентрация на замърсителите в източника обикновено е неизвестна, резултатите от моделните изследвания е уместно да се представят като „относителна концентрация“, т.е. отношение на „текущата“ концентрация C_t в даден момент t_i и място x_i, y_i, z_i към началната (входната) концентрация C₀ на съответния ключов замърсител. Разбира се, ако C₀ е измерима и точно определена величина е по-правилно

в моделите да се работи и резултатите да се получават в абсолютни концентрации.

- Моделните изследвания най-често целят изготвянето на средносрочни и дългосрочни прогнози, съответно за период от 10 или 100 години. При радиоактивни източници прогнозните изчисления се правят за период от 1000 години и повече. Препоръчително е прогнозите, особено ако са направени преди съществуването на източника, да бъдат актуализирани след калибриране на моделите на базата на мониторингови данни.
- Резултатите от моделите се представят посредством таблици, графики, карти и блок-диаграми на концентрационното поле в различни моменти от време. За по-добро илюстриране на протичащите миграционни процеси се записват като компютърни симулации в подходящ за популяризация формат.

Механизъм за пренос на замърсители в подповърхностното пространство и подземните води

Съществуват две основни форми на пренос на вещество, респ. и на замърсители в подповърхностното пространство и подземните води:

- *Дифузионен пренос.* Обуславя се от разликата в концентрациите на дадения компонент или замърсител в течната фаза в различни точки от пласта. Посоката и интензивността на процеса не зависят от посоката и скоростта на филтрационния поток.
- *Конвективен пренос.* Реализира се от филтрационния поток. Протича под формата на заместване на чистите пластови води, в които се разпространява замърсителя, с подземни води, в които той се съдържа.

Двете форми на масопренос се проявяват както в зоната на аерация (ненаситената среда), така и във водоносните пластовете. Относителната тежест и значение на едната или другата форма е различна и зависи от начина и скоростта на движение на водата.

Разпространението на замърсителите в подповърхностното пространство се съпътства и в различна степен зависи от следните по-важни физични и физикохимични процеси:

- Сорбция (задържане) на разтвореното вещество в твърдата фаза, зависеща както от вида на замърсителя, така и от свойствата на самата среда (зърнометрия, минерален състав и пр.). Процесът е обратим и обикновено протича по линейна зависимост. Има много силно влияние върху подвижността на различните замърсители, напр. ако несорбируемите се движат със скоростта филтрационния поток, то силно сорбируемите са многократно по-бавни.
- Механична дисперсия, зависеща главно от скоростта на подземния поток и характеристиките на твърдата фаза. При ниски скорости нейният ефект е пренебрежим.
- Необратимо елиминиране или извеждане на вещество от течната фаза в резултат на процес на необратимо утаяване, радиоактивно и хидролитично разпадане. Тези процеси водят единствено до намаляване на концентрациите на замърсителите във времето, но не ограничават тяхното пространствено разпространение.

В математическите уравнения съпътстващите процеси се описват количествено със съответните миграционни характеристики на твърдата фаза съобразно специфичните свойства на различните замърсители, по-важните от които са коефициент на разпределение K_D (респ. забавящ фактор R_f или сорбционна порестост n_s), коефициент на хидродисперсия D , коефициент на разпадане γ и др. При радиоактивното и хидролитичното разпадане параметърът γ е пряко свързан с периода на полуразпад на различните радионуклиди, пестициди, инсектициди и пр.

Същевременно има много големи различия в движението на водите и съдържащите се в тях замърсители в зоната на аерация и във водоносните пластове, където има пълно водонасищане. В първия случай става дума за влагопренасяне – просмукване на инфилтрирали се от повърхността води, съпътствано от действие на капилярни сили, докато във втория случай е налице филтрационен поток, обусловен от хидравличните градиенти във водоносния пласт. Различно е и математическото описание на двата процеса, както и инструментите за тяхното моделиране.

Инструменти за разработване на модели на замърсяването на подповърхностното пространство и подземните води

Моделиране на миграцията през инженерните бариери и зоната на аерация. Компютърна програма VS2DI.

Математическото моделиране на миграцията през инженерните бариери и зоната на аерация може да се извърши посредством програмния пакет VS2DI, който е един от най-ефективните софтуерни продукти за моделиране на процесите в среда с променлива водонаситеност. Той е разработен от Геоложката служба на САЩ (USGS). Първоначалната версия на програмата VS2D моделира влагопреноса и преноса на вещество в среда с променлива водонаситеност (Lappala et al., 1987; Healy, 1990). Впоследствие на базата на първата версия е разработен и модул за симулиране на преноса на топлина (Healy and Ronan, 1996), а след няколко години е разработен и модул с графичен интерфейс (Hsieh et al., 2000). Последната версия на програма VS2DI включва три основни модула: (1) VS2DTI – за моделиране на преноса на вещество, респ. на миграцията на замърсителите; (2) VS2HI – за моделиране на енергийния пренос, включително и процеси на топлинно замърсяване; и (3) VS2DPOST – за визуализация на резултатите от предходните модули, във формат на вертикални карти или компютърна анимация. Алгоритъмът на програмата използва числен модел по крайни разлики при решаване на уравнението на инфилтрационния поток, уравнението на масопреноса и уравнението на топлопренасяне (Healy & Essaid, 2012).

Първото уравнение, определящо функцията на потока в ненаситена среда, има вида:

$$d(\theta(h) + sS_s H)/dt = \nabla \cdot \bar{k}^*(h, T) \cdot \nabla H + q, \quad (1)$$

където: θ – обемна влажност, без дименсия; h – всмукващ потенциал, L; s – водонаситеност, без дименсия; S_s – коефициент на специфично водоотдаване, L⁻¹; H – общ хидровличен напор, L; ∇ – диференциален оператор

$\partial/\partial x + \partial/\partial y + \partial/\partial z$, L⁻¹; $\bar{k}^*(h, T)$ – тензор на коефициента на влагопроводност (коефициент на филтрация при непълно водонасищане), зависещ и от температурата при моделиране на топлинен пренос, LT⁻¹; q – разход на единица обем, отчитащ различните източници или стокове, T⁻¹; t – време, T.

При съставянето на модели на инфилтрационния поток връзките на коефициента на влагопроводност и всмукващия потенциал с обемната влажност се моделират посредством функциите, предложени от van Genuchten, Brooks & Corey, Haverkamp et al., Rossi & Nimmo или чрез таблични стойности (Healy & Essaid, 2012). Тези зависимости се съдържат в алгоритъма на програмата и се задават от началното меню. Началните хидравлични условия в моделите се специфицират посредством статичен равновесен профил или със задаване на стойности на всмукващия потенциал и влагонасищането. Граничните условия се дефинират като по външните граници на моделната област се задават стойности на всмукващия потенциал или общия напор, единичния разход към/от моделната област, сумарния поток, евапорацията, както и възможно протичане като изчислима променлива, отсъствие на поток и др.

Второто уравнение, описващо движението на замърсители в частично водонаситената среда може да се запише като:

$$d(\theta(h) + sS_s H)/dt = \nabla \cdot \theta \bar{D}_h \cdot \nabla c - \nabla \cdot \theta \bar{v} c + q', \quad (2)$$

където: c – концентрация на замърсителя, ML⁻³; \bar{D}_h – тензор на хидродинамична дисперсия, L²T⁻¹; \bar{v} – вектор на скоростта на потока, LT⁻¹; q' – член, описващ прихода / разхода на вещество в / от разтвора, ML⁻³T⁻¹.

Първият член от дясната страна на уравнение (2) отразява хидродинамичната дисперсия, включваща механичната дисперсия и молекулярната дифузия. Вторият член представлява дивергенцията на конвективния поток. Този член отчита промяната на концентрацията на разтвора, дължаща се на преноса на вещество с филтрационния поток. Членът q' отразява процесите, обуславящи постъпването или напускането на вещество в течната фаза – сорбция, комплексобразуване, утаяване, радиологичен разпад, смесване и др. Тези процеси се симулират по два начина: (1) разтворената маса се въвежда в или извежда от моделната област посредством задаване на определена концентрация на замърсителя в зададения по границата входящ или изходящ поток; (2) изменението на концентрацията на замърсителя се симулира посредством изотермите на Henry, Freundlich или Langmuir, с които се описват химическите реакции в течната фаза или реакциите между течната и твърдата фаза (Healy, 1990).

Третото уравнение, с което се симулира конвективно-дисперсионния пренос на топлина има подобен на предшестващото уравнение (2) вид:

$$d(\theta C_w + (1 - n)C_s)T/dt = \nabla \cdot \theta C_w \bar{D}_h \cdot \nabla T - \nabla \cdot \bar{k}_T(\theta) \cdot \nabla T - \nabla \cdot \theta C_w \bar{v} T + q', \quad (3)$$

където: C_w – топлинен капацитет на водата, ML²θ⁻¹T⁻²; n – порестост, без дименсия; C_s – топлинен капацитет на

твърдата фаза, $ML^{2\theta-1}T^{-2}$; $\overline{k_T}$ – тензор на коефициента на топлопроводност, $MLT^{-3\theta-1}$.

Подробности относно компютърните модули и начина за разработване на двумерни модели са дадени в Healy (1990), Healy and Ronan (1996), Hsieh et al. (2000) и диалоговите помощни модули на програма VS2DI.

Моделиране на миграцията във водонасните пластове. Компютърни програми Modflow и MT3D-MS.

Създаването на модели на миграцията на замърсители във водоносните пластове включва решаването на две основни задачи – филтрационна и миграционна. Първата е свързана с определяне разпределението на напорите, скоростите и градиентите на филтрационния поток в моделната област. Въз основа на получената пиезометрична структура се решава и втората задача – същинското моделиране на миграционните процеси.

За решаване на филтрационната задача при прости хидрогеоложки условия се прилагат аналитични методи, основани на съществуващите решения на уравненията, описващи едномерната или двумерната филтрация. При по-сложни водоносни структури, коректното решение изисква разработването на тримерни числени модели. Понастоящем, най-използваната за тази цел компютърна програма е Modflow (Harbaugh, 2005; Anderson et al., 2015; Стоянов, 2019). В нея по метода на крайните разлики е реализирано едно апроксимационно решение на основното диференциално уравнение на филтрацията, което най-често се записва във вида (Harbaugh, 2005):

$$\frac{\partial}{\partial x}(k_x \frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(k_y \frac{\partial h}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(k_z \frac{\partial h}{\partial z}) - W = S_s \frac{\partial h}{\partial t}, \quad (4)$$

където: k_x , k_y и k_z – коефициент на филтрация по осите x , y и z , LT^{-1} ; h – хидравличен напор, L ; W – разход на единица обем, отразяващ притока или оттока от различни източници или стокове, T^{-1} .

В програма Modflow непрекъснатата среда се заменя с краен брой дискретни в пространството и времето точки, а частните производни се заменят с изрази, изчислени въз основа на различията в стойностите на напора в тези точки. Този процес води до система линейни уравнения, чието решаване дава стойностите на напора в определени точки и към определени моменти. Получените стойности представляват апроксимация на променящото се във времето разпределение на напорите, които би дало аналитичното решение на уравнение (4).

При съставяне на филтрационен модел водоносната структура се дискретизира пространствено чрез мрежа от клетки. Във всяка клетка филтрационните свойства са постоянни. Затова при дефиниране на границите между пластове и зони с различни свойства точността расте с намаляване на стъпката на дискретизация. Размерът на стъпката влияе и на точността на решението, особено в участъци с висок напорен градиент. Тъй като малкият размер, респ. по-големият брой клетки се лимитира от изчислителните възможности и паметта на компютъра, обикновено се търси компромис с използване на неравномерни мрежи. Общото време за симулация се разделя на времеви интервали – стрес периоди и времеви стъпки. Стрес периодите са времеви интервали, в чиито граници външните въздействия върху водоносната

структура (реки; дренажи; кладенци; инфилтрационно подхранване; и др.) остават постоянни.

За решаване на миграционната задача се използват аналитични и числени решения на уравненията, описващи миграционния процес. Аналитични решения могат да бъдат изведени само в случай, че миграцията протича в прости условия и източниците на замърсяване са точкови. При по-сложна хидрогеоложка обстановка и площни източници е препоръчително да се ползват тримерни миграционни модели, съставени с широко прилаганата в практиката компютърна програма MT3D-MS (Zheng & Wong, 1999; Zheng & Bennett, 2002; Anderson et al., 2015; Стоянов, 2019). В нея се използва числено решение на основното диференциално уравнение на тримерната миграция, което може да се представи във вида (Zheng & Wong, 1999):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}(D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j}) - \frac{\partial}{\partial x_i}(u_i c) + q_s/n_0 c_s + \sum_{k=1}^N R_k, \quad (5)$$

където: c – концентрация на замърсителите в подземните води, ML^{-3} ; x_i – разстояние по съответната координатна ос, L ; D_{ij} – тензор на хидродинамична дисперсия, L^2T^{-1} ; u_i – действителна скорост на подземните води, LT^{-1} ; q_s – разход на единица обем, отчитащ притока или оттока от различни източници или стокове, T^{-1} ; c_s – концентрация на замърсителите във влизащите или напускащите през различните източници или стокове водни количества, ML^{-3} ; n_0 – активна порестост, без дименсия; R_k – член, отчитащ химичните взаимодействия, $ML^{-3}T^{-1}$.

Предполагайки, че равновесието в химичните реакции се контролира само от процеси на сорбция и необратими реакции от първи ред (разграждане, разпад), след известни преобразувания, уравнение (5) може да се запише като

$$R_f \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}(D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j}) - \frac{\partial}{\partial x_i}(u_i c) + q_s/n_0 c_s - \gamma(c + \rho_b/n_0 \bar{c}), \quad (6)$$

където: \bar{c} – концентрация на замърсителите, сорбирани от твърдата фаза, MM^{-1} ; ρ_b – обемна плътност, ML^{-3} ; γ – коефициент на необратимо елиминиране, T^{-1} ; R_f – забавящ фактор, който се определя от израза

$$R_f = 1 + (\rho_b/n_0) \cdot (\partial \bar{c} / \partial c). \quad (7)$$

Уравнение (5) описва движението на замърсители в пореста среда с отчитане на конвективния пренос, дисперсията и някои химични взаимодействия със средата – равновесна линейна или нелинейна сорбция, необратимо елиминиране от първи порядък или биодеградация. При създаването на MT3D-MS е използвана подобна на програма Modflow модулна структура, за да се интегрира лесно с нея и да я ползва за изчисляване елементите на подземния поток. След като филтрационната задача е решена, MT3D-MS моделира движението на замърсителите като използва изчислените и записани с Modflow напори. При съставянето на миграционните модели върху концентрационното поле е възможно да се симулира въздействието на външни за системата източници/стокове (реки, кладенци, дренажи, резервоари, инфилтрационно подхранване, евапорация и др.), в това число и

замърсявания от точкови, линейни и площни източници с различно по продължителност и интензивност действие.

Заклучение

Предложеният общ методичен подход през последните две десетилетия доказва своята ефективност при научните и приложените изследвания в областта на управлението на водните ресурси и опазването на околната среда в Република България. Това се потвърждава не само от големия брой публикации по темата, но и при разрешаването на редица практически казуси, пряко свързани с изпълнението на националните законови и нормативни документи, както и на европейските директиви в тази сфера.

Благодарности.

Настоящото изследване е проведено във връзка с изпълнението на Национална научна програма (ННП) „Опазване на околната среда и намаляване на риска от неблагоприятни явления и природни бедствия“, одобрена с Решение на МС № 577/17.08.2018 г. и финансирана от МОН (Споразумение № Д01-27/06.02.2024).

Литература

- Стоянов, Н. (2015). Математически моделни изследвания за оценка на защитния ефект от глинения изолационен екран и задържащата способност на геоложката основа на депа за битови отпадъци, *Год. на МГУ, т.58 – 58-ма Международна научна сесия*, 20.10.2015, София, България (стр. 184-189). ISSN 1312 1820.
- Стоянов, Н. (2019). *Математическо моделиране в хидрогеологията*. ИК “В. Недков”, София, 246 стр. ISBN 978-619-194-045-5.
- Anderson, M., Woessner, W., Hunt, R. (2015). *Applied groundwater modeling: simulation of flow and advective transport* (2nd ed.). Elsevier, Academic press, 720 p. ISBN: 978-0-12-058103-0.
- Antonov, D., Kotsev, Ts., Benderev, A., Van Meir, N., Gerginov, P., Stoyanova, V., Tcherkezova, E. (2019). Estimating the moisture regime in variably saturated arsenic contaminated alluvial sediments by using HYDRUS-1D with daily meteorological data. *European Journal of Geography*, 10 (2), 42-55.
- Antonov, D., Tsvetkova, M., Karastanev, D. (2020). Preliminary modelling of radionuclide migration in the argillaceous sediments of the Sumer Formation (Northwestern Bulgaria). *Geologica Balcanica*, 49 (3), 13-18. <https://doi.org/10.52321/GeolBalc.49.3.13>
- Dahan, O. (2020). Vadose Zone Monitoring as a Key to Groundwater Protection. *Frontiers in Water*, 2, Article 599569. <https://doi.org/10.3389/frwa.2020.599569>

- Gerginov, P., Antonov, D., Benderev, A., Stoyanova, V., Kotsev, T. (2020). Analysis and prognosis of the aqueous migration of arsenic based on complex study of Ogosta River valley's hydrogeological elements. *Comptes rendus de l'Académie bulgare des Sciences*, 73 (10), 1409-1415. <https://doi.org/10.7546/CRABS.2020.10.10>
- Harbaugh, A. (2005). Modflow-2005, The USGS modular ground-water model - the ground-water flow process: *U.S. Geological Survey Techniques And Methods 6-A16*, 253 p. <https://doi.org/10.3133/tm6A16>.
- Healy, R. (1990). Simulation of solute transport in variably saturated porous media with supplemental information on modifications to the U.S. Geological Survey's Computer Program VS2D: *U.S. Geological Survey Water-Res. Investig. Report 90-4025*, 125 p., <https://doi.org/10.3133/wri904025>
- Healy, R., & Ronan, A. (1996). Documentation of computer program VS2DH for simulation of energy transport in variably saturated porous media – modification of the U.S. Geological Survey's computer program VS2DT: *U.S. Geological Survey Water-Res. Investig. Report 96-4230*, 36 p., <https://doi.org/10.3133/wri964230>
- Healy, R. & Essaid, H. (2012). VS2DI: model use, calibration, and validation. *Transactions of the ASABE 55 (4)*, 1249-1260. <https://doi.org/10.13031/2013.42238>
- Hsieh, P., Wingle, W., & Healy, R. (2000). VS2DI - A graphical software package for simulating fluid flow and solute or energy transport in variably saturated porous media: *U.S. Geological Survey Water-Res. Investig. Report 99-4130*, 16 p., <https://doi.org/10.3133/wri994130>
- Lappala, E., Healy, R., & Weeks, E. (1987). Documentation of computer program VS2D to solve the equations of fluid flow in variably saturated porous media: *U.S. Geological Survey Water-Res. Investig. Report 83-4099*, 184 p., <https://doi.org/10.3133/wri834099>
- Oostrom, M., Truex, M.J., Last, G.V., Strickland, C.E., Tartakovsky, G.D. (2016). Evaluation of deep vadose zone contaminant flux into groundwater: Approach and case study. *Journal of Contaminant Hydrology*, 189, 27-43. <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2016.03.002>
- Šimůnek, J., van Genuchten, M.Th., Šejna, M. (2016). Recent Developments and Applications of the HYDRUS Computer Software Packages. *Vadose Zone Journal*, 15 (7), 1-25. <https://doi.org/10.2136/vzj2016.04.0033>
- Zheng C., Wang, P. (1999). *MT3DMS: A modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater systems; documentation and user's guide*. – Contract Rep. SERDP-99-1, Department of geol. sciences, Univ. of Alabama, 221 p., 1999. <http://hdl.handle.net/11681/4734>
- Zheng C., Bennet, G. (2002). *Applied contaminant transport modeling* (2nd ed.). J&WS, NY, 621 p., 2002 (2 Ed.). ISBN: 0-471-38477-1