

УСЛОВИЯ ЗА МИГРАЦИЯ НА НЕСОРБИРУЕМИ ЗАМЪРСИТЕЛИ В НЕВОДОНАСИТЕНАТА ЗОНА НА ПАЛЕОГЕНСКИТЕ ВУЛКАНИТИ В РАЙОНА НА ГРАД ХАСКОВО. ЧАСТ 2. МАТЕМАТИЧЕСКИ МОДЕЛ

Николай Стоянов

Минно-геоложки университет "Св. Иван Рилски", София 1700; asmg.bg@gmail.com

РЕЗЮМЕ. Посредством математически модел са симулирани условията за миграция на несорбируеми замърсители в неводонаситената зона на палеогенските вулканити. Използван е детерминистичен подход за моделиране на установените в масива ниско рангови хидрогеоложки единици. Всяка единица е представена като двумерен обект с дефинирани граници и характеристики. Моделът отчита конвективния пренос на вещество, обратимото елиминирание (сорбция-десорбция), хидродинамичната дисперсия, молекулярната дифузия и смесването. С него е направена прогноза за развитието на миграционните процеси до дълбочина 80 m при продължително действащ повърхностен източник на замърсяване и е оценена естествената защитеност на палеогенските вулканити.

MASS TRANSPORT CONDITIONS FOR NONSORPTIVE POLLUTANTS IN THE UNSATURATED ZONE OF PALEOGENE VOLCANICS IN THE HASKOVO CITY REGION. PART 2. MATHEMATICAL MODEL

Nikolay Stoyanov

University of Mining and Geology "St. Ivan Rilski", 1700 Sofia; asmg.bg@gmail.com

ABSTRACT. Mass transport conditions for nonsorptive pollutants in the unsaturated zone of Paleogene volcanics are simulated by a mathematical model. A deterministic method is used for modeling the differentiated low range hydrogeological units in the massif. Each unit is presented as a 2-D object with defined boundaries and characteristics. The model involves convective mass transport, sorption, hydrodynamic dispersion, molecular diffusion, and mixing. The developed model is used for prognosticating the progress of migration processes down to a depth of 80 m under the conditions of a continuously active surface source of pollution and for estimating the natural protection to the Paleogene volcanics.

Методичен подход

Основната задача на проведените математически моделни изследвания е да се направи количествена оценка на условията за разпространение на повърхностни замърсители в неводонаситената част на изследвания скален масив. За тази цел е разработен двумерен (2D) математически модел, с който е симулирано поведението на бързоподвижните замърсители в зоната на аерация по примера на хлоридните йони (Cl^-). На тази база е направена прогноза за развитието и възможния обхват на процесите на замърсяване в подповърхностното пространство за период от 300 години и са оценени самопречистващите способности на палеогенските вулканити.

При математическото моделиране на условията за движение на замърсители в зоната на аерация се решават две основни задачи: филтрационна и миграционна. Първата задача е свързана с определянето на стойностите на потока във всяка точка на полето с променлива водонаситеност. Втората задача включва същинското моделиране на движението на замърсителите. За решаването на тези две задачи е използвана

компютърната програма VS2DTI (Variably Saturated 2D Interface), която е разработена от Геоложката служба на САЩ (USGS). Програмата включва три основни модула: VS2DTI – симулира филтрационния поток и преноса на вещество; VS2HI – симулира филтрационния поток и топлинния пренос и VS2DPOST – за визуализация на резултатите от предходните две програми (Lappala et al., 1987; Healy, 1990; Hsieh et al., 2000; и др.).

Математическият 2D модел е съставен с програмния пакет VS2DTI, алгоритъмът на който използва числов модел по крайните разлики за решаване на уравнението на потока и на конвективно-дисперсионното уравнение (Richards, 1931, Philip, 1958; Bear, 1979; и др.). Пакетът предлага няколко възможни схеми за моделиране на връзката между всмукващия потенциал, влажността и коефициента на влагопроводност посредством функциите, предложени от van Genuchten (1980), от Brooks and Corey (1964) и от Haverkamp et al (1977), или чрез таблични стойности. Началните хидравлични условия се специфицират със статичен равновесен профил, със зададен всмукващ потенциал или със зададена влагонаситеност. По границите на моделната област е

възможно да се задават стойностите на всмукващия потенциал или общия напор, разхода, инфилтрационното подхранване, евапорацията, транспирацията и гранични елементи с възможно протичане. Преносът на вещество се описва при отчитане на конвективния пренос, дисперсията, обратното елиминиране (адсорбция и йонен обмен) и необратимото елиминиране (Bear, 1979; и др.).

Подробна информация относно използвания в алгоритъма на компютърната програма VS2DTI математически апарат и методически указания за нейното прилагане са дадени в голям брой литературни източници (Lappala et al., 1987; Nealy, 1990; и др.).

Концептуален модел

Математическият модел на условията за разпространение на замърсителите и за прогнозиране на тяхното поведение в подповърхностното пространство е разработен при следните предпоставки.

Обект на разглеждане е скалният масив от палеогенски вулкани край с. Гарваново, Хасковско. В разреза са установени три ниско рангови хидрогеоложки единици: първа слабо проницаема зона (A-1), втора слабо проницаема зона (A-2) и много слабо проницаема зона (B). Пространственото положение и филтрационните характеристики на тези единици са дефинирани по данни от сондажното проучване, геолого-геофизичните изследвания и опитно-филтрационните тестове (Стоянов и др., 2010). Стойностите на величините, характеризиращи задържащата способност на средата (сорбционната порестост n_s , респ. коефициентът на разпределение K_D) са определени въз основа на проведените лабораторни индикаторни опити. За дисперсивността са зададени стойности, съобразени с цитираните в специализираната литература данни за подобен тип среда (Garabedian, Gelhar and Celia, 1988; Gelhar et al., 1992; Harpaz, 1965; Papadopoulos and Larson, 1978 и др.). Осреднените стойности на филтрационните и миграционните характеристики за всяка хидрогеоложка единица са посочени в табл. 1.

Таблица 1. Филтрационни и миграционни характеристики на хидрогеоложките единици (моделните зони)

Параметър	Хидрогеоложка единица (моделна зона)		
	A-1	A-2	B
Обща порестост n , -	0.24	0.30	0.085
Плътност на скелета ρ_d , g/cm ³	1.89	1.82	2.25
Коефициент на филтрация k , m/d	0.05	0.10	0.005
Сорбционна порестост n_s , -	0.91	0.89	0.52
Коеф. на разпределение K_D , cm ³ /g	0.47	0.45	0.21
Надлъжна дисперсивност α_L , m	1.6	2.0	0.6
Коефициент на дифузия D_m , 10 ⁻⁴ m ² /d	3.0	3.5	1.0

Приетата работна хипотеза предполага, че в продължение на 10 години от земната повърхност в скалния масив непрекъснато постъпват води с високо съдържание на хлоридни йони ($c_{Cl} = 1000$ mg/l). Предвид ниските филтрационни характеристики на геоложката основа се предполага, че само част от тези води се инфилтрират в дълбочина, а друга част се оттичат повърхностно, следвайки естествения наклон на терена. Въз основа на предварително проиграните вариантни решения със задаване на различни стойности на скоростта на инфилтрация на „замърсените“ води W_p (при равни други условия) се установи, че математическият модел е устойчив при W_p не по висока от 2.5×10^{-4} m/d.

Същевременно, в регионален план от повърхността постъпват и около 5-6 % от падналите валежи. При средна годишна сума на валежа за станция Хасково 668 mm, за скоростта на инфилтрация на валежните води е приета стойността $W = 1 \times 10^{-4}$ m/d. Съдържанието на хлоридни йони в тези води е нищожно малко ($c_{Cl} = 0$ mg/l). В модела е прието още, че след десетата година от земната повърхност в масива постъпват единствено чисти валежни води ($c_{Cl} = 0$ mg/l) със скорост $W = 1 \times 10^{-4}$ m/d.

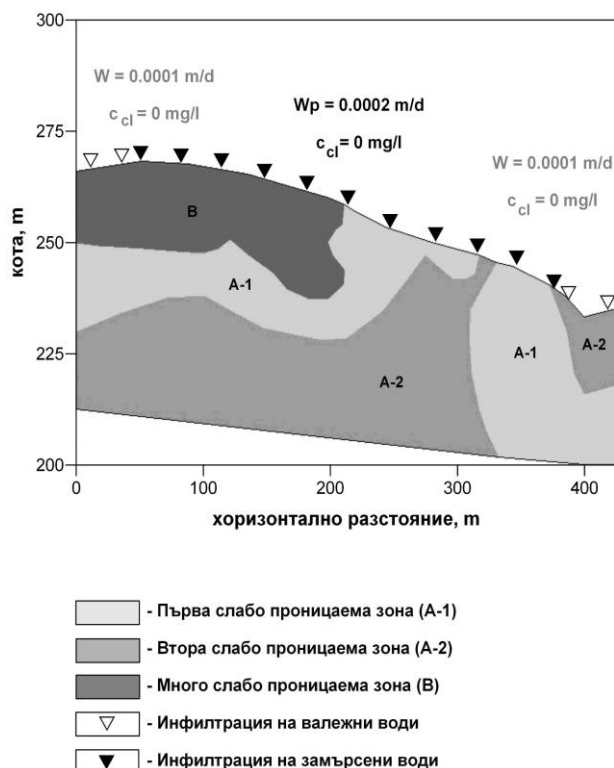
Прогнозата за разпространение на бързоподвижните замърсители (по примера на Cl^-) в подповърхностното пространство е направена в различни моменти от време за период от 300 години.

Композиране на математическия модел

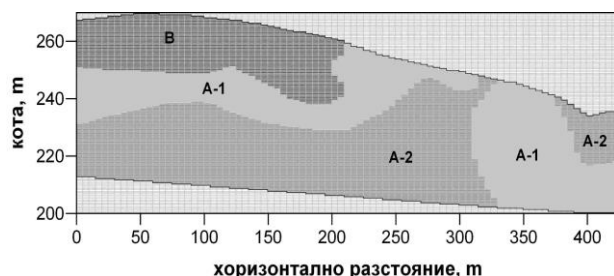
При композирането на модела са използвани програма VS2DTI и основните положения, представени в концептуалния модел.

Математическият модел е двумерен. Трите ниско рангови хидрогеоложки единици са симулирани с три моделни зони (фиг. 1). Всяка зона е зададена с геометрия, филтрационни и миграционни характеристики, отговарящи на реалните (вж. табл. 1). Връзката между всмукващия потенциал, съдържанието на влага и коефициента на влагопроводност е моделирана с помощта на функциите на van Genuchten. В случая за параметрите RMC, α и β са използвани посочените в специализираната литература стойности за подобен тип геоложка среда. За моделиране на реакциите между течната и твърдата фаза е използвана линейната изотерма на Henry.

В математическия модел времето за симулация е разделено на 300 стрес периода. Всеки период е с дължина 1 година. През първите 10 стрес периода се приема, че от повърхността постъпват замърсени води със скорост на инфилтрация $W_p = 2.5 \times 10^{-4}$ m/d. Входната концентрация на хлоридните йони е $c_{Cl} = 1000$ mg/l (фиг. 1). В следващите стрес периоди (от 11 до 300) постъпването на хлоридни йони от повърхността е прекратено и по цялата граница е зададено гранично условие $W = 1 \times 10^{-4}$ m/d и $c_{Cl} = 0$ mg/l, т.е. че в масива се инфилтрират единствено чисти валежни води. При дискретизацията на моделната област е използвана ортогонална мрежа с размери на клетките 0.5 x 5.0 m (фиг. 2).



Фиг. 1. Граници на хидрогеоложките единици (моделните зони). Гранични условия



Фиг. 2. Моделна мрежа. Граници на моделните зони

Прогнозни решения

С разработения математически модел на условията за движение на бързоподвижните замърсители е направена прогноза за обхвата и степента на замърсяване в палеогенските вулканити в края на всеки стрес период.

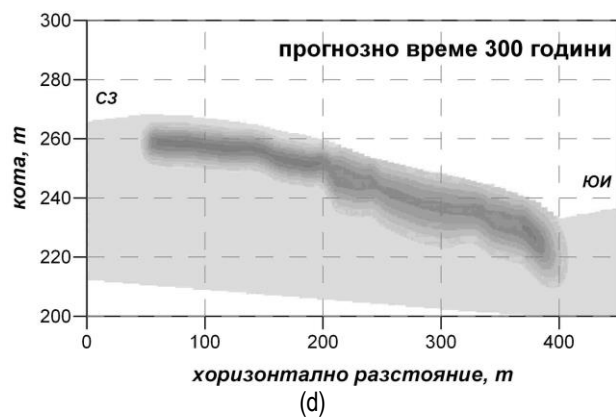
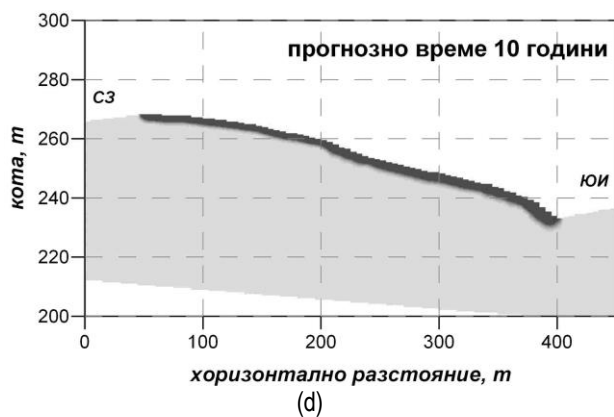
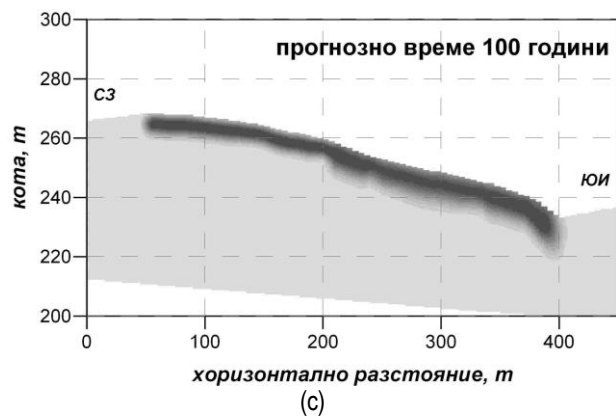
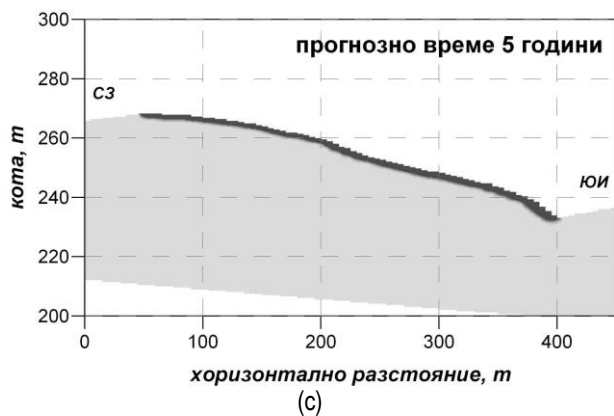
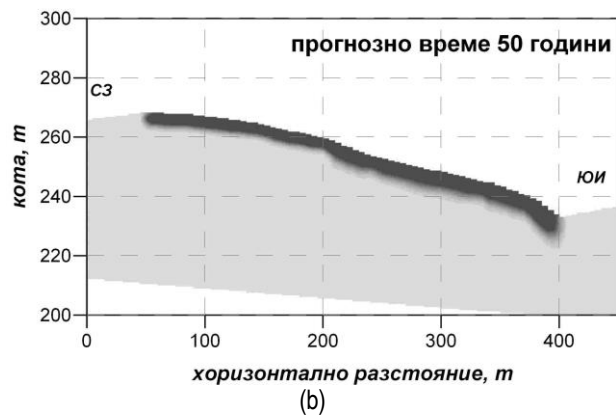
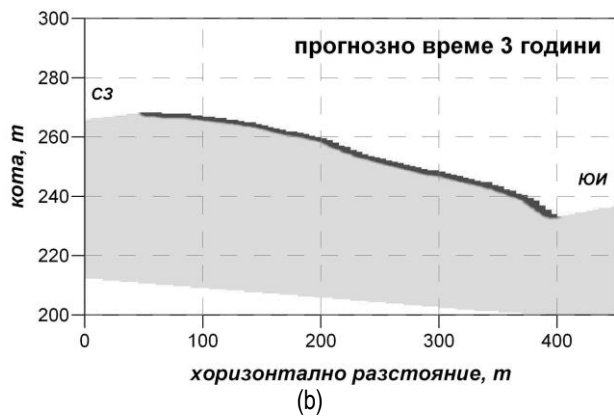
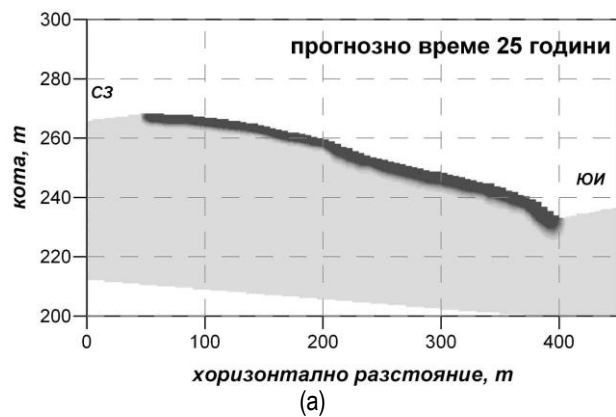
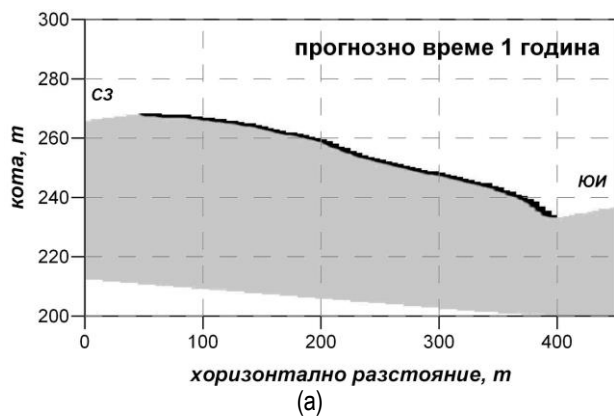
За илюстрация на получените резултати на фиг. 3 са представени четири вертикални карти по съдържание на хлоридни йони. Те дават много добра представа за настъпилите промени в концентрационното поле в подповерхностното пространство в изчислителни моменти 1, 3, 5 и 10 години, т.е. в условията на непрекъснато постъпване на замърсители от повърхността.

На фиг. 4 са представени други четири карти – за моменти 25, 50, 100 и 300 години след елиминиране на повърхностния източник на замърсяване. Тези карти илюстрират възможното последващо разпространение на замърсителите в палеогенските вулканити при условие, че от повърхността се инфилтрират единствено чисти валежни води.

Анализ на резултатите от комплексното изследване на условията за миграция на замърсители в палеогенските вулканити

Обработката, систематизацията и сравнителният анализ на резултатите от проведените геоложки, геоелектрични, хидрогеоложки и математически моделни изследвания позволяват да се направят следните обобщения и изводи относно условията за миграция на замърсители в неводонаситената зона на палеогенския скален масив.

- (1) Скалният масив се характеризира с еднообразен геоложки строеж. Изграден е главно от два вида вулкански скали: пирокластични (туфи) и вулканити (латити). Преобладаващо присъствие в масива имат пирокластитите, а вулканитите са в подчинено положение.
- (2) Вулканските скали до дълбочина 50-60 m са засегнати в различна степен от изветрителни процеси и от други по-късни промени. Наблюдаваните изменения засягат най-силно матрикса на пирокластитите, докато късовете от латити са много слабо променени. В резултат на това в скалния масив са се формирали зони с различни физико-механични, филтрационни и миграционни характеристики.
- (3) В неводонаситената част на масива се детерминират три ниско рангови хидрогеоложки единици (зони): първа слабо проницаема зона (зона A-1); втора слабо проницаема зона (зона A-2) и много слабо проницаема зона (зона B).
 - Първата слабо проницаема зона е формирана в участъците от масива, в които съотношението между скалните късове и матрикса е около и под 50 %. Тази зона притежава относително ниска водопропускливост и голяма способност да сорбира вещество.
 - Втората слабо проницаема зона се установява в участъците с 60-70 % и повече свързващо вещество между скалните късове (матрикс), в силно изветрелите латити и в зоните със силно променен матрикс в дълбочина. Тя се характеризира с малко по-висока водопропускливост и приблизително същата задържаща способност.
 - Много слабо проницаема зона попада в границите на разпространение на неизветрелите, плътни латити и в част от незасегнатите от вторична промяна пирокластични. В тази зона вулканитите са здрави, плътни и много слабо водопропускливи. Раздробеният материал, запълващ ограничените по размер и количество пукнатини, се характеризира с относително висока сорбционна порестост.
- (4) Геоморфоложките и хидрогеоложките условия в района предполагат доста ограничени възможности за инфилтрация на води в подповерхностното пространство. Дори в условията на непрекъснато изтичане на големи водни количества върху значителна площ от изследваната територия, само малка част от тях ще се инфилтрират в дълбочина, а останалата ще се оттича повърхностно, следвайки естествените релефни форми.



концентрация на хлоридните йони, mg/l

0 50 100 150 200 250

концентрация на хлоридните йони, mg/l

0 50 100 150 200 250

Фиг. 3. Разпространение на замърсителите при непрекъснато постъпване на замърсени води от повърхността

Фиг. 4. Разпространение на замърсителите след елиминиране на повърхностния източник на замърсяване

(5) Сравнителният анализ на представените на фиг. 3 и фиг. 4 моделни решения дава основание да се направи следния коментар за възможните размери и динамика на процесите на замърсяване на скалния масив и за самопречистващата способност на палеогенските вулкани:

- Слабата водопроницаемост и голямата задържаща способност на палеогенския масив предполагат, че инфилтрирането на повърхностни замърсители в него ще е твърде ограничено. Моделните изследвания показват, че дори при наличие на постоянен и продължително действащ повърхностен замърсител за период от 10 години замърсяването ще засегне само горната част на масива до дълбочина 6-7 m (фиг. 3). Следователно най-бързите замърсители (Cl^-) ще мигрират със скорост около 0.5 m/аг. При това замърсените части в много слабо проницаемата зона (зона В) ще бъдат с около два пъти по-малък обхват от този в слабо проницаемите зони (А-1 и А-2). Същевременно, най-интензивното замърсяване ще е в приповърхностната част от разреза (до дълбочина 2-3 m), където концентрацията на Cl^- ще е около 750 mg/l. Тяхната концентрация в другите части на вече замърсената зона ще бъде под 400 mg/l. Най-често тя ще е около 250 mg/l, т.е. четири пъти по-ниска от тази в постъпващите от повърхността замърсени води.

- Поради ниските филтрационни характеристики на палеогенския масив, конвективният пренос на вещество в него е ограничен. Определящо значение за движението на замърсителите имат молекулярната дифузия и дисперсията. Това е причината и за твърде забавена динамика на миграционните процеси в масива. Прогнозните изчисления показват, че след ликвидиране на повърхностния замърсител, замърсената вече зона ще продължи макар и с по-бавни темпове да се разширява и да напредва в дълбочина и латерално, а концентрацията на Cl^- в нея ще започне постепенно да намалява (вж. фиг. 4). Може да се очаква, че след 100 години замърсяването в слабо проницаемите зони (А-1 и А-2) ще достигне до дълбочина 16-18 m, като концентрацията на Cl^- ще е под 200 mg/l, но най-често около 150 mg/l. В много слабо проницаемата зона (В) замърсената част ще заема подповърхностното пространство до дълбочина 8-9 m от терена, но тук концентрациите ще са все още високи – в диапазона 250-300 mg/l. В хоризонтална посока замърсяването ще е ограничено в много тясна ивица с ширина 10-15 m.

- В края на симулационния период (след 300 години) замърсяването ще обхваща вулканския масив до дълбочина не по-голяма от 25-30 m и на не повече от 20-25 m в хоризонтална посока (вж. фиг. 4d). Същевременно, в така очертаните граници съдържанието на Cl^- ще бъде в диапазона от 10 до 150 mg/l, но най-често около 30-40 mg/l.

- Направените прогнози дават основание да се предполага, че в резултат на процеси на обратимо елиминиране (сорбция), молекулярна дифузия, дисперсия, конвективен пренос и смесване за един много по-дълъг период палеогенският масив постепенно ще се изчисти от постъпилите в него подвижни и относително консервативни замърсители.

В заключение може да се обобщи, че изследваният скален комплекс от палеогенски вулкани край с. Гарваново се характеризира с много добра способност да задържа постъпващите от повърхността замърсители. При наличие на постоянен и продължително действащ повърхностен замърсител възможното замърсяване на масива ще е дълготрайно, но с доста ограничени размери.

Литература

- Стоянов, Н. 2003. *Оценка и прогнозиране на замърсяването на подземните води от депозити за твърди битови отпадъци*. Дисертация, С., МГУ, 215 с.
- Стоянов, Н., Б., Банушев, С. Димовски, С. Неделчева. 2010. Условия за миграция на несорбируеми замърсители в неводонаситената зона на палеогенските вулкани в района на Хасково. Част 1. Детерминиране на ниско рангови хидрогеоложки единици. – *Год. МГУ, св. I, Геол. и геофиз.* (под печат).
- Bear, J. 1979. *Hydraulics of Groundwater*. McGraw-Hill, New York, 569 p.
- Brooks, R. H., A. T. Corey. 1964. Hydraulic properties of porous media. *Fort Collins, Colorado State University Hydrology Paper* 3, 27 p.
- Garabedian, S. P., L. W. Gelhar, M. A. Celia. 1988. Large-scale dispersive transport in aquifers. – *Field experiments and reactive transport theory. Rep. 315*, Ralph M. Parsons Lab. for Water Resour. and Hydrodyn., Mass. Inst. of Technol., Cambridge.
- Gelhar, L. W., C. Welty, K. R. Rehfeldt. 1992. A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers. – *Water Resour. Res.*, 28, 7, 1955-1974.
- Harpaz, Y. 1965. Field experiments in recharge and mixing through wells. – *Underground Water Storage Study Tech. Rep. 17*, Publ. 483, Tahal-Water Plann. for Israel, Tel Aviv.
- Haverkamp, R., M. Vaudin, J. Tovina, P. J. Wierenga, G. Vachaud. 1977. A comparison of numerical simulation models for one-dimensional infiltration. – *Soil Science Society of America Proceedings*, 41, 285-294.
- Healy, R. W. 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. – *USGS, Water-Resour. Inv. Rep. 90-4025*, 125 p.
- Hsieh, P. A., W. Wingle, R. W. Healy. 2000. VS2DI - A graphical software package for simulating fluid flow and solute or energy transport in variably saturated porous media. – *USGS, Water-Resour. Inv. Rep. 99-4130*.
- Lappala, E. G., R. W. Healy, E. P. Weeks. 1987. Documentation of computer program VS2D to solve the equations of fluid flow in variably saturated porous media. – *USGS, Water-Resour. Inv. Rep. 83-4099*, 184 p.
- Papadopoulos, S.S., S.P. Larson. 1978. Aquifer storage of heated water. – *Ground Water*, 16, 4, 242-248.
- Philip, J. R. 1958. Theory of infiltration. – *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 83, 5-6; 84, 2-3-4.
- Richards, L. A. 1931. Capillary conduction of liquids through porous mediums. – *Physics*, 1, 5, 318-333.
- van Genuchten, M. Th. 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. – *Soil Sci. Soc. Am. Proc.*, 44, 5, 892-898.

Препоръчана за публикуване от
Катедра "Хидрогеология и инженерна геология", ГПФ