

МАТЕМАТИЧЕСКИ МОДЕЛИ ЗА ПРОГНОЗИРАНЕ НА ЗАМЪРСЯВАНЕТО НА ПОДЗЕМНИТЕ ВОДИ В РАЙОНА НА АГРОБИОХИМ, СТАРА ЗАГОРА ЧАСТ 2. МИГРАЦИОННИ МОДЕЛИ ЗА ПРОГНОЗИРАНЕ НА ЗАМЪРСЯВАНЕТО НА КВАТЕРНЕР-НЕОГЕНСКИЯ ВОДОНОСЕН ХОРИЗОНТ

Николай Т. Стоянов, Чавдар П. Гюров

Минно-геоложки университет "Св. Иван Рилски", 1700 София, nts@mgu.bg, cg@mgu.bg

РЕЗЮМЕ. За прогнозиране на процесите на замърсяване на подземните води в района на Агробихим, Стара Загора са разработени два миграционни модела. Решенията са базирани на полученото със съставения хидродинамичен модел пространствено разпределение на градиентите и скоростите в основната хидрогеоложка единица в района - кватернер-неогенския водоносен хоризонт. Математическите модели разглеждат два гранични случая. Първият модел симулира поведението на несорбируемите замърсители (по примера на хлоридните йони), които се разпространяват практически със скоростта на филтрационния поток. Вторият модел описва движението на сорбируемите замърсители (по примера на амониите йони), които се движат по-бавно и маркират зоните на най-силно и практически необратимо замърсяване на подземните води. Приложените изчислителни схеми отчитат конвективния пренос на вещество, сорбцията, хидродисперсия и смесването.

MATHEMATICAL MODELS FOR PROGNOSTICATING GROUNDWATER POLLUTION IN THE REGION OF AGROBIOCHIM, STARA ZAGORA. PART 2. MASS TRANSPORT MODELS FOR PROGNOSTICATING GROUNDWATER POLLUTION IN THE NEOGENE-QUATERNARY AQUIFER COMPLEX

Nikolay T. Stoyanov, Chavdar P. Gyurov

University of Mining and Geology "St. Ivan Rilski", 1700 Sofia, nts@mgu.bg, cg@mgu.bg

ABSTRACT. Two mass transport models are developed in order to prognosticate the processes of groundwater pollution in the region of Agrobiochim, Stara Zagora. The solutions are based on the spatial distribution of gradients and velocities, obtained by the developed principal flow model of the main hydrogeological unit in the region – the Neogene-Quaternary aquifer complex. The mathematical models reflect two boundary conditions. The first model simulates the behaviour of nonsorptive highly mobile pollutants (for example chloride ions), which, in practice, migrate with the flux velocity. The second model describes the movement of the sorptive pollutants (for example ammonium ions), which migrate slower and mark the zones of total and permanent groundwater pollution. The applied calculation schemes take into account not only advection as the main mechanism of pollutants spread, but also the influence of the processes of sorption, hydrodynamic dispersion and mixing.

Методика и инструменти на математическото моделиране

При същинското моделиране на миграцията на замърсителите в района на Агробихим, Стара Загора са използвани разработеният в Част 1 основен хидродинамичен модел на кватернер-неогенския водоносен хоризонт и програмният продукт MT3DMS. Програмата решава частното диференциално уравнение, описващо тримерния пренос (транспорт) на вещество в пореста среда (Javandel et al., 1984; Grove and Stollenwerk, 1984 и др.):

$$R_f \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) + \frac{q_s}{n_0} C_s - \lambda \left(C + \frac{\rho_b}{n_0} \bar{C} \right) \quad (1)$$

където: C – концентрация на замърсителите в подземните води, $[ML^{-3}]$; $\bar{C}$ – концентрация на замърсителите, сорбирани от филтрационната среда, $[MM^{-1}]$; t – време, $[T]$;

x_i – разстояние по съответната координатна ос, $[L]$; D_{ij} – тензор на хидродисперсия, $[L^2T^{-1}]$; u_i – действителна скорост на подземните води, $[LT^{-1}]$; q_s – разход на единица обем, отразяващ притока или оттока към/от моделната област, $[T^{-1}]$; C_s – концентрация на замърсителите в постъпващите или в напускащите моделната област водни количества, $[ML^{-3}]$; n_0 – активна порестост на средата $[-]$; ρ_b – обемна плътност на средата, $[ML^{-3}]$; λ – коефициент на необратимо елиминиране, $[T^{-1}]$; R_f – забавящ фактор, който се определя от израза

$$R_f = 1 + \frac{\rho_b}{n_0} \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} \quad (2)$$

Между забавящия фактор R_f , коефициента на разпределение K_d и често използвания параметър сорбционна порестост n_s съществува пряката връзка

$$n_s = n_0 R_f = n_0 + \rho_b K_d \quad (3)$$

Забавящият фактор R_f и сорбционната порестост n_s са бездименсионни величини, а коефициентът на разпределение K_d има размерност $[L^3M^{-1}]$

Тензорът на хидродисперсия е функция на параметрите: коефициент на молекулярна дифузия – D_m $[L^2T^{-1}]$; надлъжна дисперсивност – α_L $[L]$; напречна (хоризонтална и вертикална) дисперсивност – α_{TH} и α_{TV} $[L]$.

Ще поясним, че първият член от дясната страна на уравнение (1) отразява процесите на хидродисперсия (молекулярна дифузия и механична дисперсия), вторият член описва конвективния пренос на замърсителите, третият член представя масата на разтворените компоненти във влизащите и напускащите водоносната структура водни количества, а четвъртият член – масата на необратимо елиминираното вещество.

Компютърната програма MT3DMS е съвместна разработка и е стандартизирана от U.S. Geological Survey и Environmental Protection Agency, USA. Подробна информация относно използвания в алгоритъма на програмата математически апарат и методически указания за нейното прилагане са дадени в голям брой литературни източници (Zheng and Bennett, 1995; Zheng and Wang, 1998 и др.).

Композиране на миграционните модели

Миграционните модели представляват тримерна симулация на условията за движението на замърсителите в кватернер-неогенския водоносен хоризонт в района на Агробιοхим, Стара Загора. Те са разработени с програма MT3DMS при използването в хидродинамичния модел пространствената дискретизация.

Решението на миграционната задача е базирано на полученото с основния хидродинамичен модел пространствено разпределение на градиентите, на скоростите и на водните количества в границите на моделната област. Приложената изчислителна схема отчита конвективния пренос на вещество, обратното елиминиране (сорбцията), молекулярната дифузия, механичната дисперсия и смесването.

Съставени са два миграционни модела, с които са обхванати следните гранични случаи:

- миграция на несорбируеми замърсители (по примера на хлоридните йони), които се движат на практика със скоростта на филтрационния поток;
- миграция на сорбируеми замърсители (по примера на амониите йони), които се задържат частично в пласта и мигрират по-бавно.

Основните замърсители на подземните води (СПЕ, канал 1 и канал 2) са симулирани като постоянни източници на замърсяване. Зададените в тях съдържания на хлоридните и на амониите йони, както и началните (фоновите) концентрации в моделните пластове и по границите на моделната област са приети въз основа резултатите от мониторинговите наблюдения върху химичния състав на повърхностните и подземните води в района на Агробιοхим за периода 1993-97 (Здравков и

Урумов, 1997). Използвани са и непубликувани данни от направените хидрохимични опробвания и определения в рамките на проведеното през есента на 2004 година хидрогеолошко проучване. Следва да отбележим все пак, че поради липса на достатъчно подробни данни за съдържанието на хлоридните и на амониите йони в основните замърсители и в подземните води, има известна условност в зададения в моделите концентрационен товар на симулираните източници на замърсяване, а също и в приетите в моделните пластове начални концентрации на тези компоненти.

За съжаление, в района на обекта все още не са правени специални изследвания (индикаторни опити) за установяване на миграционните характеристики на водоносните пластове. Ето защо, за задържащата способност на филтрационната среда, може да се съди единствено по резултатите от миграционни изследвания, проведени в аналогични условия. В моделите са използвани осреднени стойности за активната и сорбционната порестост, дисперсивността и коефициента на дифузия, получени от индикаторни опити с хлоридни и амониите йони в глинесто-песъчливи и песъчливо-чакълести седименти. Данните са взети от публикациите на различни автори (Papadopoulos and Larson, 1978; Naymik and Barcelona, 1981; Gelhar and Axness, 1983; Adams and Gelhar, 1992; Gelhar et al., 1992; Гълъбов и др., 1999; и др.). Тъй като кватернер-неогенският разрез е твърде близък с този в района на ДТБО Пловдив, са използвани и някои от резултатите от миграционните полеви и лабораторни експерименти, представени в (Стоянов, 2003).

Зададените в двата миграционни модела стойности на параметрите, характеризиращи процесите на хидродисперсия в горния и долния водоносен пласт (коефициент на дифузия и дисперсивност) са посочени в табл. 1. Тъй като в литературните източници се цитират главно данни за надлъжната дисперсивност (α_L), стойностите на напречната (хоризонтална и вертикална) дисперсивност (α_{TH} и α_{TV}) са определени от широко прилаганото при решаването на подобни задачи съотношение $\alpha_L = 10 \alpha_{TH} = 100 \alpha_{TV}$.

Таблица 1

Средни стойности на коефициента на молекулярна дифузия и на надлъжната дисперсивност

Моделен пласт	Водоносен пласт	Коеф. на дифузия D_m , m^2/d	Надлъжна дисперсивност α_L , m
1	Горен	3×10^{-4}	1.25
2	Долен	1×10^{-4}	0.95
3	Долен	1×10^{-4}	0.95

Модел 1

Модел 1 симулира поведението на притежаващите голяма подвижност замърсители по примера на хлоридните йони (Фиг. 1-6).

Зададените в моделните пластове стойности на обемната плътност ρ_b и на активната порестост p_0 са

представени в табл. 2. Тъй като хлоридните йони са практически несорбируеми (не взаимодействат с филтрационната среда), в използваната изчислителна схема се приема, че забавящия фактор R_f е равен на 1.

Таблица 2

Средни стойности на обемната плътност и на активната порестост

Моделен пласт	Водоносен пласт	Обемна плътност ρ_b , cm^3/g	Активна порестост n_0 , -
1	горен	1.7	0.05
2	долен	1.9	0.15
3	долен	1.9	0.15

Началната (фоновата) концентрация в трите моделни пласта е 35 mg/l . Същата стойност е присвоена и за водите в двете реки, както и на подземния поток по северната и югоизточната граница на модела. Концентрацията на хлоридните йони във водите, постъпващи в подповерхностното пространство от СПЕ, от канал 1 и от канал 2 е зададена като постоянна величина. Стойностите са съответно: СПЕ – 500 mg/l , канал 1 – 300 mg/l и канал 2 – 80 mg/l .

Модел 2

Модел 2 описва движението на слабоподвижните амониеве йони, имащи много високо съдържание в СПЕ и каналите (Фиг. 7-12).

При съставянето на модела във всеки моделен пласт за обемната плътност ρ_b са зададени посочените в табл. 2 стойности, както и дадените в табл. 3 средни стойности на сорбционната порестост n_s , респ. на коефициента на разпределение K_d .

Таблица 3

Средни стойности на сорбционната порестост и на коефициента на разпределение

Моделен пласт	Водоносен пласт	Сорбционна порестост n_s , -	Коеф. на разпределение K_d , cm^3/g
1	горен	1.50	0.853
2	долен	0.85	0.368
3	долен	0.85	0.368

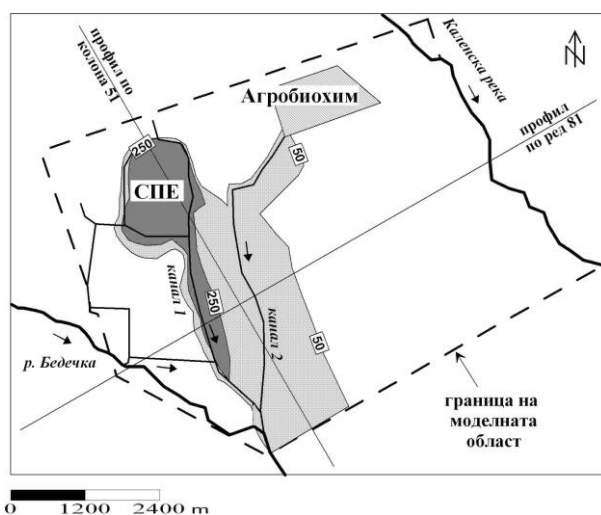
Началната концентрация на амониевите йони, зададена в моделната област, по нейните граници и в двете реки, е 0.0 mg/l . Симулираните постоянни източници на замърсяване са включени в модела, като съдържанието на амониеве йони в постъпващите от техните граници водни количества е съответно: СПЕ – 250 mg/l , канал 1 – 180 mg/l и канал 2 – 40 mg/l .

Резултати от моделните изследвания

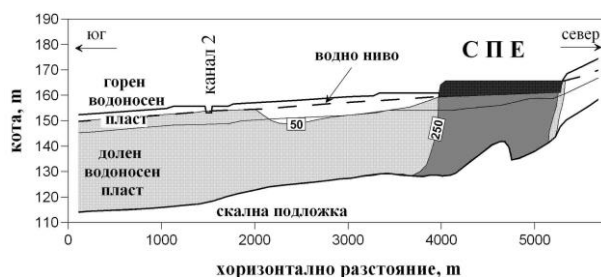
С миграционните модели може да се направи сравнително точна прогноза относно развитието на процесите на замърсяване на подземните води при условие, че хидрогеоложката и екологичната обстановка в

района на Агробихим се запази непроменена. Моделните решения дават тримерното разпределение на концентрациите на хлоридните и амониевите йони в кватернер-неогенския водоносен хоризонт във всеки момент от време за период от 100 години.

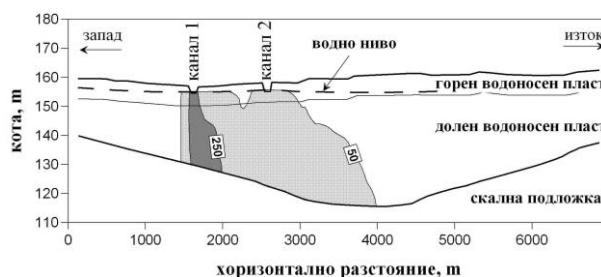
За илюстрация на пространствените размери и степента на замърсяване на подземните води за прогнозни моменти 50 и 100 години след началото на математическата симулация са представени четири площни и осем вертикални карти на изоконцентрациите. Площните карти дават информация за замърсяването в долния водоносен хоризонт (моделен пласт 2), а вертикалните карти – за настъпилите промени в концентрационното поле по два профила в пълния разрез на водоносния хоризонт. Първият профил е разположен по направление на подземния поток (по колона С-51), а вторият – напречно на потока (по ред R-81).



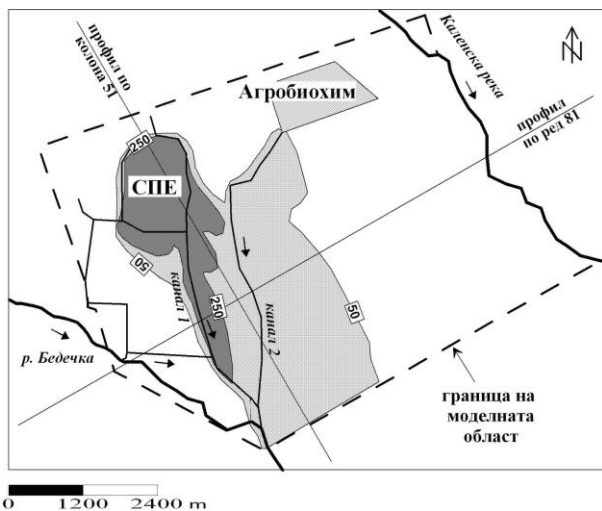
Фиг. 1. Модел 1. Разпространение на хлоридните йони в долния водоносен пласт след 50 години.



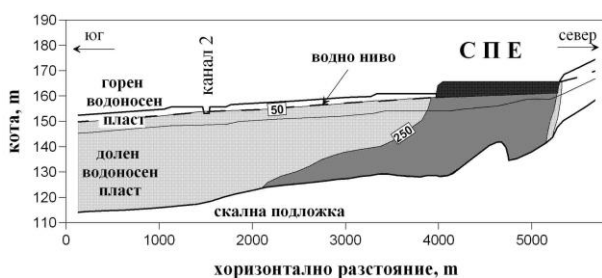
Фиг. 2. Модел 1. Разпространение на хлоридните йони в кватернер-неогенския хоризонт след 50 години (профил по колона С-51).



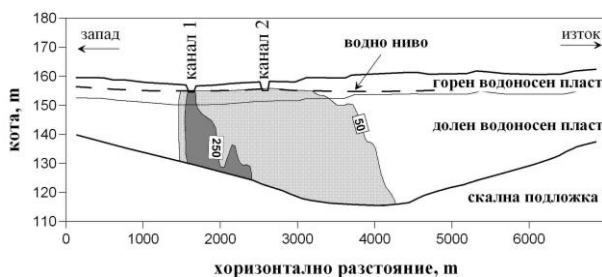
Фиг. 3. Модел 1. Разпространение на хлоридните йони в кватернер-неогенския хоризонт след 50 години (профил по ред R-81).



Фиг. 4. Модел 1. Разпространение на хлоридните йони в долния водоносен пласт след 100 години.



Фиг. 5. Модел 1. Разпространение на хлоридните йони в кватернер-неогенския хоризонт след 100 години (профил по колона C-51).

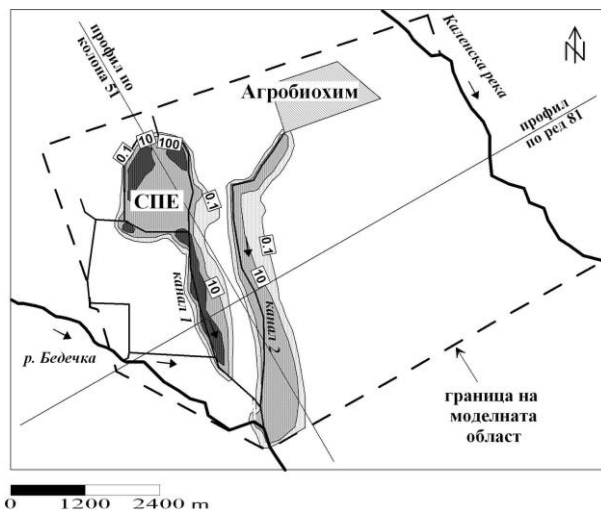


Фиг. 6. Модел 1. Разпространение на хлоридните йони в кватернер-неогенския хоризонт след 100 години (профил по ред R-81).

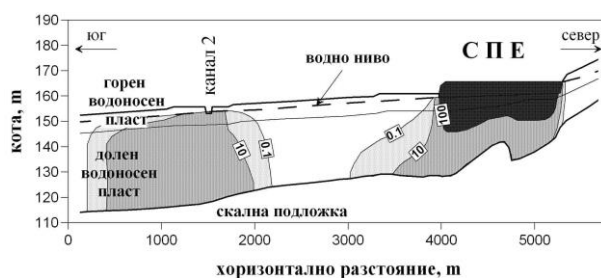
Обсъждане на резултатите от моделните изследвания

Въз основа на резултатите от представените моделни решения ще направим следния коментар относно възможния обхват и степен на замърсяване на кватернер-неогенския водоносен хоризонт в района на Агробихим.

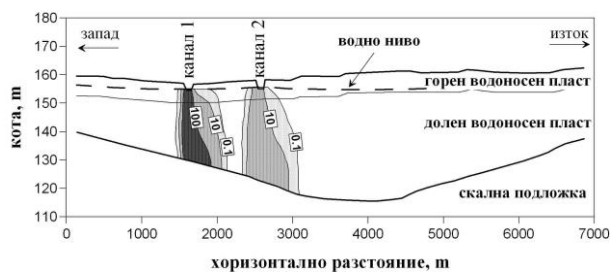
Хидравличната връзка на СПЕ и каналите с подземните води е причина за безпрепятствено и твърде интензивно навлизане на замърсени (промишлени) води във водоносните пластове. Съдържащите се в тези води различни по вид и количество замърсители постепенно мигрират в дълбочина. Процесът се контролира от концентрационните, респ. от плътностните разлики между вече замърсените подземни води в горната част на разреза и незамърсените води на по-ниски хипсометрични



Фиг. 7. Модел 2. Разпространение на амониевите йони в долния водоносен пласт след 50 години.



Фиг. 8. Модел 2. Разпространение на амониевите йони в кватернер-неогенския хоризонт след 50 години (профил по колона C-51).

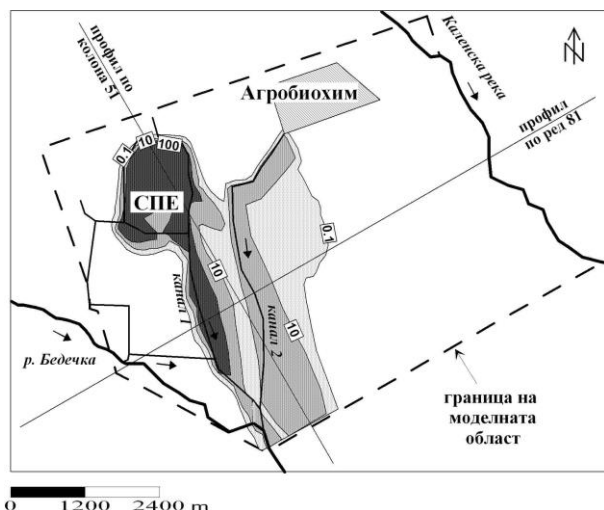


Фиг. 9. Модел 2. Разпространение на амониевите йони в кватернер-неогенския хоризонт след 50 години (профил по ред R-81).

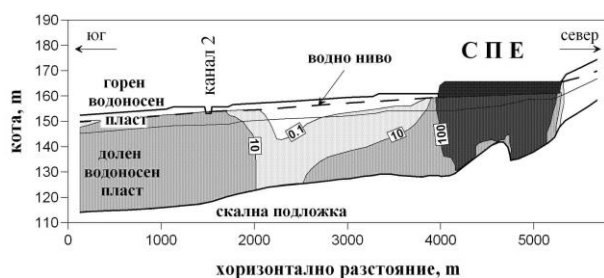
нива. Достигайки до долния водоупор на кватернер-неогенския водоносен хоризонт, замърсителите започват да се движат латерално като следват релефа на скалната подложка. Така те, макар и бавно, напредват на изток-югоизток и засягат все по-големи пространства в най-дълбоките части на водоносната структура. Все пак, фронтът на замърсяване се придвижва най-бързо на югоизток, следвайки посоката на подземния поток.

По описаната миграционна схема за 100 години замърсяването обхваща значителна част от водоносната структура (около 10 km²). Най-силно замърсени са подземните води в района на СПЕ и в една тясна ивица около канал 1. Това от една страна се обяснява с доста по-високия концентрационен товар на постъпващите замърсители, а от друга – с ниските скорости на филтрация в долния водоносен пласт. Около канал 2 и на изток от него замърсената зона заема една обширна

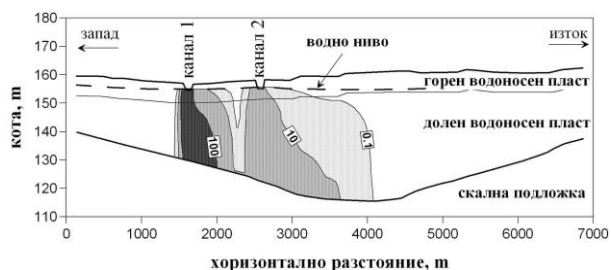
територия, но тук концентрациите са с 1-2 порядъка по-ниски.



Фиг. 10. Модел 2. Разпространение на амониевите йони в долния водоносен пласт след 100 години.



Фиг. 11. Модел 2. Разпространение на амониевите йони в кватернер-неогенския хоризонт след 100 години (профил по колона С-51).



Фиг. 12. Модел 2. Разпространение на амониевите йони в кватернер-неогенския хоризонт след 100 години (профил по ред R-81).

Ще отбележим, че в тези най-общо очертани рамки на замърсяването на подземните води различните замърсители демонстрират съществени различия в своето поведение.

Несорбируемите хлоридни йони са изключително подвижни, поради което определените с Модел 1 граници на замърсените подземни води са твърде динамични и обхващат площи с по-големи размери. Тяхното присъствие, обаче, не крие реални опасности за водоносния хоризонт. В резултат на смесването на замърсените води с незамърсени пластови води концентрациите на хлориди остават в приемливи граници – под 50-100 mg/l. Единствено в непосредствена близост до СПЕ и канал 1 се запазват по-високи концентрации – около 250-500 mg/l. В случая опасността се крие в

потенциалната възможност, че наред с хлоридните йони в очертаните с Модел 1 граници присъстват и други несорбируеми и слабосорбируеми замърсители – нитрати, сулфати, фенол, някои видове нефтопродукти и др.

Сорбируемите замърсители (в случая – амониевите йони) активно взаимодействат с филтрационната среда, което предопределя и ограничената им миграционна способност. Направените с Модел 2 изчисления показват, че те се разпространяват подобно на хлоридните йони, но с по-малка скорост. Въпреки малките размери на замърсената с амониев йони зона и доста по-ниските концентрации, в случая замърсяването е реално, тъй като посочените в стандарта за питейни води допустими норми са много по-ниски. При това подземните води в тази зона вероятно са замърсени и с целия спектър от сорбируеми замърсители, идващи от СПЕ и каналите (фосфати, органични съединения, тежки метали и др.).

Заклучение

Разработените математически модели дават сравнително добра представа за условията за разпространение на замърсителите и за възможното развитие на негативните процеси в кватернер-неогенския хоризонт за период от 100 години. За съжаление, обаче, направената прогноза има известна несигурност поради отсъствието на достатъчно конкретна и пълна информация за концентрационния товар на постъпващите от СПЕ и каналите замърсители, за точните параметри на концентрационното поле (към настоящия момент) и за задържащата способност (миграционните характеристики) на водоносните пластове. С оглед на това, в бъдеще е необходимо да се изпълни определен обем от специализирани изследвания, включващи подробно хидрохимично опробване на основните източници на замърсяване, на повърхностните водоеми (реки и канали) и на водоносните пластове; серия от полеви и лабораторни индикаторни опити; изследвания за изясняване на хидравличната връзка между източниците на замърсяване и подземните води; организиране и експлоатация на локална мрежа за системни наблюдения върху нивата и състава на подземните и повърхностните води и др. Допълнително събраната информация ще позволи да се внесат важни уточнения в разработените математически модели, а данните от режимните наблюдения ще дадат възможност за верифициране и вторично калибриране на тези модели, което естествено ще повиши значително тяхната устойчивост и точността на прогнозните решения.

Литература

- Гълъбов М., Н. Стоянов, М. Панайотова. 1999. Изследвания върху миграционните характеристики на някои замърсители, постъпващи от сметищата в подземните води. – Год. МГУ “Св. Ив. Рилски”, 27, Св. I, Геол., 103-108.
- Здравков, Б., Д. Урумов. 1997. Мониторинг на подземните води в района на “Агробихим”, гр. Стара

- Загора. Доклад на фирма "Здравков и Ко", фонд на община Стара Загора.
- Стоянов, Н. 2003. *Оценка и прогнозиране на замърсяването на подземните води от дела за твърди битови отпадъци*. Дисертация, С., МГУ "Св. Иван Рилски", 215 с.
- Adams, E. E., L. W. Gelhar. 1992. Field study of dispersion in a heterogeneous aquifer. 2. Spatial moments analysis. – *Water Resour. Res.*, 28, 12, 3293-3307.
- Gelhar, L. W., C. L. Axness. 1983. Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. – *Water Resour. Res.*, 19, 1, 161-180.
- 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.
- Groove, D. B., K. G. Stollenwerk. 1984. *Computer model of one-dimensional equilibrium-controlled sorption processes*. USGS Water-Resources Investigations Report 84-4059.
- Javandel, I., C. Doughty, C. F. Tsang. 1984. *Groundwater transport: Handbook of mathematical models*. American Geophysical Union Water Resources Monograph 10, 228 p.
- Naymik, T. G., M. J. Barcelona. 1981. Characterization of a contaminant plume in ground water, Meredosia, Illinois. – *Ground Water*, 19, 5, 517-526.
- Papadopoulos, S. S., S. P. Larson. 1978. Aquifer storage of heated water; II, Numerical simulation of field results. – *Ground Water*, 16, 4, 242-248.
- Zheng, C., G. D. Bennett. 1995. *Applied Contaminant Transport Modeling: Theory and Practice*. Van Nostrand Reinhold, New York.
- Zheng, C., P. P. Wang. 1998. 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*. Departments of Geology and Mathematics, University of Alabama.

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