

МЕТОДЫ ОХРАНЫ ПОДЗЕМНЫХ ВОД

ОТ ЗАГРЯЗНЕНИЯ
И ИСТОЩЕНИЯ



МЕТОДЫ ОХРАНЫ ПОДЗЕМНЫХ ВОД от загрязнения и истощения

Под редакцией д-ра геол.-минер. наук
проф. И. К. ГАВИЧ



МОСКВА „НЕДРА” 1985

Методы охраны подземных вод от загрязнения и истощения/ Под ред. И. К. Гавич.— М.: Недра, 1985.— 320 с., ил.

Подготовлена специалистами СССР и НРБ. Изложены методика исследований естественной регенерации бытовых стоков в аридной зоне, гидрогеохимические аспекты процессов загрязнения, полевые и лабораторные методы определения фильтрационных и миграционных параметров. Анализируется влияние постепенной заилённости инфильтрационного сооружения на восполнение запасов подземных вод. Приведена методика оптимизации работы водозабора и управления режимом этих вод. Даны рекомендации по планированию и проведению опытно-миграционных исследований.

Для специалистов, работающих в области динамики и геохимии подземных вод, водоснабжения, охраны окружающей среды.

Табл. 50, ил. 94, список лит.— 47 назв.

Рецензент: *Н. А. Плотников*, д-р техн. наук (Всесоюзный научно-исследовательский институт гидрогеологии и инженерной геологии)

МЕТОДЫ ОХРАНЫ ПОДЗЕМНЫХ ВОД ОТ ЗАГРЯЗНЕНИЯ И ИСТОЩЕНИЯ

Редакторы издательства *И. В. Венгерцева, Р. В. Добровольская*
Переплет художника *И. А. Слюсарева*
Художественный редактор *В. В. Шутоко*
Технический редактор *А. В. Трофимов*
Корректор *К. И. Савенкова*

ИБ № 5445

Сдано в набор 21.01.85. Подписано в печать 25.04.85. Т-10910. Формат 60×90^{1/16}. Бумага книжно-журнальная. Гарнитура «Литературная». Печать высокая. Усл.печ. л. 20,00. Усл. кр.-отт. 20,50. Уч.-изд. л. 21,10. Тираж 4800 экз. Заказ 174/125—2. Цена 1 р. 50 к.

Ордена «Знак Почета» издательство «Недра», 103633, Москва, К-12,
Третьяковский проезд, 1/19

Ленинградская типография № 4 ордена Трудового Красного Знамени Ленинградского объединения «Техническая книга» им. Евгении Соколовой Союзполиграфпрома при Государственном комитете СССР по делам издательств, полиграфии и книжной торговли. 191126, Ленинград, Социалистическая ул., 14.

ПРЕДИСЛОВИЕ

Инженерная деятельность человека в настоящее время является глобальным фактором, масштабы воздействия которого на природную среду стали уже соизмеримы с действием таких естественных факторов, как космические, климатические, геологические, гидрогеологические. Это влияние распространяется на все оболочки нашей планеты — атмосферу, наземную и подземную гидросферу, литосферу и особенно биосферу, названную В. И. Вернадским областью жизни. Все это указывает на возрастающую актуальность проблемы охраны окружающей природной среды, на сложность и многоплановость ее изучения. В проблеме охраны природы выделяются четыре главных направления — научно-методическое, технико-экономическое, экологическое и социально-политическое. Первое связано с разработкой новых теоретических и методических основ изучения количественной оценки поведения и управления природно-техногенными экологическими системами разного ранга, в которые гидрогеологические системы входят как подсистемы; второе — с использованием и предотвращением истощения природных ресурсов; третье — с загрязнением и предупреждением нежелательных изменений окружающей среды, а четвертое касается тех социально-правовых и других вопросов, которые требуется решать применительно ко второму и третьему направлениям в рамках как одной страны, так и сообщества стран.

Важное место в рассматриваемой проблеме занимает охрана подземных вод от загрязнения и истощения. Этим исследованиям посвящены работы Ф. М. Бочевера, В. М. Гольдберга, С. Газды, В. И. Лялько, В. А. Мироненко, Н. Н. Веригина, А. Е. Орадовской, А. А. Рошаля, Д. Фрида, В. М. Шестакова, С. Р. Крайнова, Б. Н. Рыженко, Ф. И. Тютюновой, М. М. Гыльбова, Н. А. Плотникова, Н. И. Плотникова, К. И. Сычева, В. С. Усенко и других. Инженерно-геологические аспекты проблемы охраны природной среды рассматриваются в работах Е. М. Сергеева и др. Как показал XXVII Международный геологический конгресс (Москва, 1984 г.) проблемами охраны природной среды от загрязнения и истощения занимаются ученые многих стран: этим вопросам были посвящены пленарные доклады ведущих советских и иностранных геологов, гидрогеологов, инженеров-геологов и других специалистов. В рамках ООН в последние годы разрабатывался международный проект «Охрана литосферы как компонента окружающей среды». В результате плодотворного научного сотрудничества советских и зарубежных ученых была подготовлена и издана в 1984 г. двухтомная монография «Гидрогеологические основы охраны подземных вод».

С 1978 по 1983 г. над проблемой «Методы охраны подземных вод от истощения и загрязнения» по договору о научном сотрудничестве работали коллективы преподавателей и научных сотрудников кафедры гидрогеологии и радиогидрогеологии Московского геологоразведочного института им. Серго Орджоникидзе (СССР) и кафедры гидрогеологии и инженерной геологии Софийского высшего горно-геологического института (НРБ). Результаты совместных научных исследований изложены в предлагаемой книге. В этой работе авторы постарались затронуть новые, ранее не рассматривавшиеся аспекты проблемы охраны подземных вод от загрязнения и истощения. К ним в первую очередь следует отнести новую методику интерпретации опытно-миграционных исследований с использованием ЭВМ и новые аналитические решения, описывающие конвективную и диффузионно-конвективную миграцию компонентов-загрязнителей в системе вода — порода. В работе впервые излагается новый оригинальный методический подход к изучению массопереноса, основанный на использовании молекулярно-кинетической теории водных растворов; приводятся экспериментальные данные о миграции некоторых наиболее распространенных загрязнителей, в том числе в форме комплексных соединений. Учитывая большое влияние гидромелиоративных мероприятий на изменение природной среды, в работе дается комплексное рассмотрение этого влияния и предлагается методика гидрогеохимических прогнозов изменения качества подземных вод, используемых для различных нужд, под влиянием орошения.

Рассмотрены также вопросы их рационального использования и восполнения эксплуатационных запасов подземных вод. С новых позиций в книге решаются задачи АСУ — водозабор, в частности оптимального регулирования водоотбора и управления режимом подземных вод с использованием самоорганизующихся моделей на основе метода группового учета аргументов (МГУА) и комплексных методов линейного и нелинейного программирования.

Рассмотренные вопросы проблемы охраны подземных вод от загрязнения и истощения, безусловно, не исчерпывают всех возможных путей ее изучения и решения. Однако изложенные в работе результаты исследований будут способствовать дальнейшей разработке проблемы, особенно в плане управления гидродинамическим и гидрогеохимическим режимом подземных вод с активным применением ЭВМ.

При подготовке рукописи к печати большую помощь оказали сотрудники кафедры гидрогеологии и радиогидрогеологии МГРИ, которым авторы выражают искреннюю благодарность.

Часть I. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПОДЗЕМНЫХ ВОД

Глава 1

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ (ГИДРОГЕОХИМИЧЕСКИЕ) И БИОГЕОХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ, ОБУСЛОВЛИВАЮЩИЕ МИГРАЦИЮ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ В ПОДЗЕМНЫХ ВОДАХ

ОБЩАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ ИССЛЕДОВАНИЙ

Существуют различные частные классификации основных физико-химических факторов и процессов, обуславливающие миграцию загрязнителей в подземных водах, которые приведены в работах Е. В. Пиннекера, Е. В. Посохова, Б. Великова. В предлагаемой более общей классификации процессов (табл. 1) учтены такие физико-химические факторы, как химические свойства элементов, растворимость соединений, рН и Eh, термодинамические условия (P , T), гидрогеохимические процессы, а также процессы, которые можно отнести к гидродинамическому и гидробиологическому направлениям. Такая классификация подчеркивает тесную связь между тремя видами процессов и необходимость их комплексного изучения. Поскольку основные процессы массопереноса (см. табл. 1; группы I и V) более подробно рассматриваются в последующих главах, здесь обратим внимание только на физико-химические и биогеохимические процессы (группы II, III и IV). Рассмотрим прежде всего микроорганизмы, неорганические и органические вещества, которые различными путями попадают в подземные воды. Как следствие их концентрации или действия они могут рассматриваться как мешающие или вредные для биосферы ингредиенты. Вследствие жизнедеятельности микроорганизмов в водоносных горизонтах совершаются различные биогеохимические процессы, много органических и неорганических веществ метаболизируется, что в каждом конкретном случае связано с их распадом или превращением в другие химические соединения. В результате этих процессов микроорганизмы приобретают необходимую им энергию и строительный материал для клеточных структур.

Между различными физико-химическими процессами существуют тесные связи и взаимозависимости. При этом система подземные воды — порода — газ — органическое вещество — живые организмы стремится к равновесному состоянию, т. е. к минимуму термодинамического потенциала. Это состояние связано со степенью необратимости процессов, протекающих в водоносных комплексах. Скорость (кинетика) этого перехода

Таблица 1

Классификация процессов, обуславливающих миграцию загрязнителей в подземных водах

Номер группы	Группы	Основные процессы
I	Перенос вещества	Молекулярная диффузия Диффузионно-конвективный массо-перенос
II	Элиминирование вещества из подземных вод	Гидролиз Сорбция и ионный обмен Осаждение малорастворимых соединений Фильтрование грубодиспергированного вещества Биоаккумуляция
III	Ремобилизирование задержанного вещества	Растворение и выщелачивание Десорбция
IV	Сочетание процессов элиминирования и ремобилизирования	Комплексообразование Окислительно-восстановительные и биогеохимические реакции и превращения Распад (включая радиоактивный)
V	Взаимодействие с (между) молекулами воды	Гидратация и дегидратация ионов, органического вещества и минералов Подземное испарение и вымораживание Разбавление и концентрирование Мембранные эффекты

для разных процессов различна, и прежде всего необходимо обратить внимание на те механизмы и взаимодействия, которые в совокупности определяют такую важную характеристику рассматриваемой системы, как ее самоочищающую способность. При этом необходимо учесть следующее: 1) самые существенные физико-химические и биогеохимические процессы совершаются не только (и даже не столько) в зоне насыщения, но и в зоне аэрации; 2) поскольку инертные, консервативные ингредиенты не участвуют в физико-химических и биогеохимических процессах, они почти не рассматриваются, исключая случаи, когда они косвенно (например, своей токсичностью) оказывают влияние на суммарные процессы элиминирования, метаболизирования и ремобилизирования.

Удаление веществ или организмов из водной фазы и задерживание их породой вследствие механико-физических, физико-химических и биогеохимических процессов без превращения или деградации вещества можно свести к следующим основным процессам: 1) гидролизу; 2) сорбции; 3) ионному обмену; 4) осаждению; 5) фильтрованию (задерживанию); 6) биоаккумуляции.

При этом ингредиенты подземных вод с повышенной входной концентрацией на границе стремятся, как правило, быть в равновесии между жидкой и твердой фазами и задерживаются фильтрационной средой. Задерживание (элиминирование) иногда отождествляется с сорбцией, однако первое представляет собой несколько разных процессов (правда, часто их трудно различить). Равновесие может быть нарушено, в результате чего может возникнуть обратный процесс — ремобилизование, так как все процессы более или менее обратимы. Конкретные гетерогенные или гомогенные петрохимические свойства среды и связанные с этим отдельные реакции играют важную роль в процессах элиминирования, которые накладываются на гидродинамические процессы.

Гидролиз

Обычно под гидролизом в гидрогеохимии подразумевается распад (растворение) минералов под влиянием H^+ и OH^- , получающихся при электролитной диссоциации воды. Этому процессу способствуют высокая температура, низкие значения pH и Eh , а также наличие комплексообразующих веществ.

В контексте настоящей книги необходимо подчеркнуть роль гидролиза прежде всего как процесса элиминирования (удаления) неорганических и органических веществ или во многих случаях как первую стадию суммарного механизма элиминирования или гидролитической адсорбции. Это относится и к ионам тяжелых металлов, трансуранам, полифосфатам и т. д. Хотя в широком плане гидролиз неорганических соединений часто связан с растворением одних (первичных) минералов и осаждением других (вторичных), следует обратить внимание на то, что гидролиз органических соединений скорее связан со значительным эффектом распада.

При высоком отрицательном термодинамическом потенциале ($\Delta G < 0$) при элиминировании пестицидов важное значение может иметь реакция гидролиза, где температура, pH и сила возникающих кислот играют значительную роль в кинетике элиминирования. Последняя описывается уравнением реакции первого порядка:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -KC, \quad (1)$$

где N — масса элиминирующегося вещества; C — концентрация данного вещества в водной фазе; K — скоростная константа.

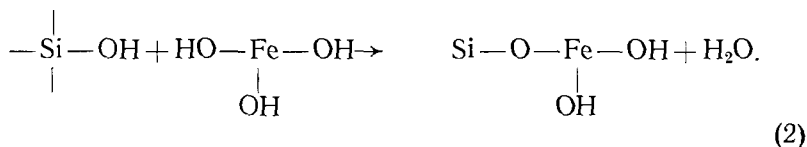
Уравнение (1) — общее кинетическое уравнение процессов полного (необратимого) элиминирования независимо от того, какой процесс является определяющим — гидролиз, необратимая (химическая) сорбция, осаждение очень трудно растворимого соединения, радиоактивный распад, задерживание в «тупиковых порах» и пристеночной пленке. Посредством реакций гидролиза из подземных вод легко удаляются пестициды типа эфиров фосфатной кислоты, фенолкарбаматов или производных фенолкарбамида. В пятой главе, посвященной экспериментальным исследованиям, приведены наши результаты в исследовании гидролизных и других процессов органических соединений.

Сорбция

Под сорбцией твердой фазой растворенных, а иногда и нерастворенных (диспергированных) ингредиентов в подземных водах обычно понимают три основных механизма элиминирования:

1) физическая адсорбция, обусловленная ван-дер-ваальсовыми и электростатическими кулоновыми силами. Дополнительные реакции могут быть связаны с физической сорбцией внутри частиц фильтрационной среды или задерживанием в очень маленьких или «тупиковых» капиллярах (ультрамикропорах);

2) химическая адсорбция, которая характеризуется образованием химических ассоциатов между ионами или молекулами в подземных водах и на поверхности частиц. Такие «поверхностные связи» или «поверхностные комплексы» образуются, например, при гидролитической адсорбции ионов тяжелых металлов в растворе, которые после гидролиза вступают в конденсационные реакции с OH⁻-группами на поверхности:



Кроме гидролиза, важный физико-химический процесс, который обычно предшествует и следует после сорбции независимо от ее природы, — это диффузия, которую необходимо учитывать;

3) ионный обмен (рассмотрен ниже).

Адсорбция характеризуется определенной степенью обратимости, т. е. вещества десорбируются иногда легко при нарушении термодинамического равновесия или вследствие реакции замещения. Это зависит от относительной их концентрации в растворе и соответствующей связи вещества и адсорбента. Так, например, электростатические связи катионов в глинистых минералах слабее, чем связи хемосорбированных фосфатных ионов на этом же адсорбенте. При хемосорбции процесс специфичнее и характеризуется большей степенью необратимости.

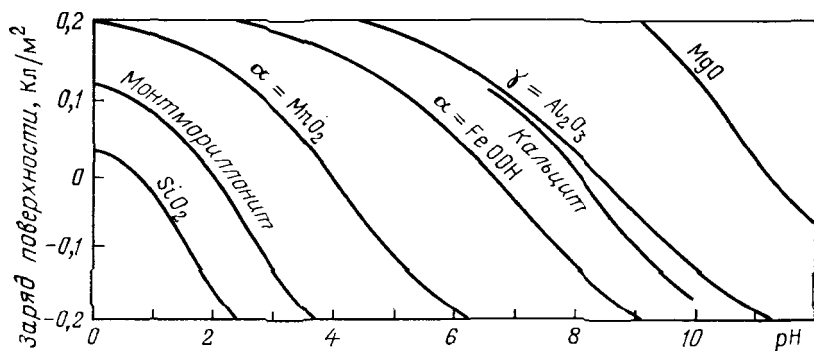


Рис. 1. Зависимость заряда поверхности неорганических частиц фильтрационной среды от pH по [49]

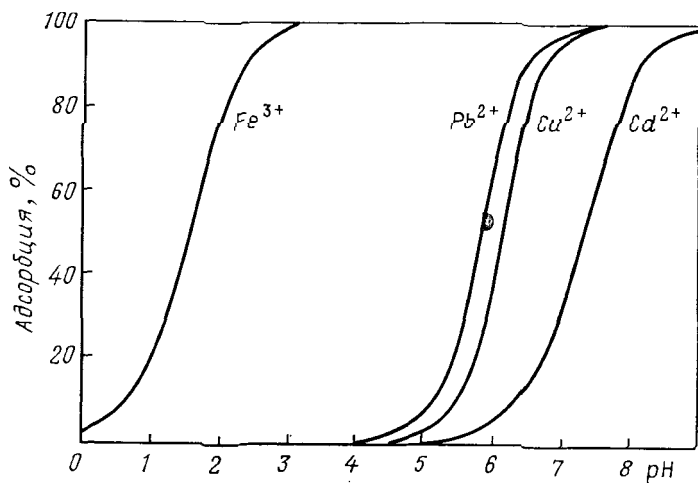


Рис. 2. Зависимость адсорбции кремнеземом ионов металлов от pH по [49]

Во всех случаях надо учитывать миграционные формы ингредиентов [36], величину и заряд поверхности, который при низких pH положительный, а при высоких pH отрицательный (рис. 1). Адсорбция миграционных форм металлов существенно зависит от pH подземных вод (рис. 2).

Для описания адсорбционных процессов при постоянных температуре, объеме и равновесном состоянии получено много уравнений адсорбционных изотерм, которые в первом приближении согласуются с опытными данными. Для физической адсорбции электрически нейтральных частиц при условии мономолекулярного занятия ими адсорбционных центров, эквива-

лентности и ограниченном числе этих центров используют обычно выражение Лангмюра:

$$N = N_p \frac{K_L C}{1 + K_L C}, \quad (3)$$

где N — количество адсорбированного вещества; N_p — равновесное (максимальное) количество адсорбированного вещества; K_L — константа изотермы Лангмюра; C — концентрация адсорбируемого вещества. Для кинетики процесса можно упрощенно записать

$$\frac{\partial N}{\partial t} = K C f(N_p - N_t), \quad (4)$$

где K — скоростная константа, N_t — адсорбированное количество в момент t .

При очень малых концентрациях адсорбента в подземных водах для линейной изотермы используют закон Генри:

$$N = K_G C, \quad (5)$$

где K_G — константа Генри.

Так как допущения Лангмюра часто практически невыполнимы, используют эмпирическое уравнение Фрейндлиха:

$$N = K_\Phi C^n, \quad (6)$$

где K_Φ — константа изотермы Фрейндлиха; n — ее степенной показатель. Хотя эта изотерма при очень низких и очень высоких концентрациях недействительна, ею предпочитают пользоваться вследствие простоты экспериментальной проверки и возможности интерпретации опытных результатов в двойном логарифмическом масштабе. Кроме вышеупомянутых, имеются и другие способы термодинамического описания адсорбционных процессов, изложенных в работах [9].

Полезным количественным параметром, характеризующим сорбционные процессы в подземных водах, является так называемый коэффициент распределения κ , который определяется как отношение между равновесными концентрациями вещества в твердой и жидкой фазах. Обычно при низких концентрациях он предполагается равным константе Генри (5) и определяется разными статическими и динамическими методами [2, 4, 28, 36].

При использовании параметра κ кинетика обратимой сорбции описывается выражением

$$\frac{\partial N}{\partial t} = K \left(C - \frac{1}{\kappa} N \right). \quad (7)$$

Адсорбционные процессы вызывают элиминирование из водной миграции и задерживание в фильтрационной среде очень стойких соединений. Особенно это наблюдается в зоне активной

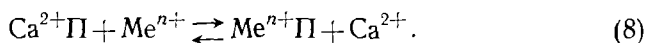
биологической деятельности, поскольку постоянно образующаяся органическая материя предоставляет большую поверхность для адсорбции. Кроме погибших клеток, это прежде всего осажденные и нерастворимые гуминовые вещества, характеризующиеся большой сорбционной емкостью. Подобно действуют и окиси, и гидроокиси марганца и железа, элиминирующее действие которых по отношению к тяжелым металлам хорошо известно [20, 36].

Ионный обмен

Составные части пористой среды, особенно глинистых минералов, аморфных кремниевых кислот и многих органических соединений, могут отнимать ионы из водной среды и отдавать эквивалентное число других ионов в природные растворы. При этом совершаются как анионообменные, так и катионообменные процессы. В реальной фильтрационной среде, однако, анионообменные процессы совершаются реже (например, ОН-ионы в каолините с фосфатными, арсенатными и боратными ионами). Чаще происходит специфический катионный обмен, который связан с наличием отрицательно заряженных функциональных групп, с которыми связаны положительно заряженные ионы.

Сумма обменных катионов (включая H^+) дает обменную емкость, выражаемую обычно в мг·экв/100 г фильтрационной среды при $pH=7$. В глинистых минералах обменная емкость увеличивается от каолинита к монтмориллониту с уменьшением размеров частиц и связанным с этим увеличением их поверхности. Решающая для процесса ионного обмена сила сцепления обмениваемых катионов на ионообменнике (фильтрационная среда — порода) увеличивается с повышением валентности катионов (как правило, в ряде щелочных и щелочноземельных элементов) и понижением их диаметра в гидратированном состоянии. Число обменных катионов растет и с повышением концентрации водного раствора. Ионообменники, находящиеся в равновесии с двумя разновалентными катионами, предпочитают катионы с более высокой валентностью, и это проявляется тем интенсивнее, чем меньше ионная сила подземных вод.

Ионообменные процессы между растворенными загрязнителями (например, ионы тяжелых металлов M) и связанные на ионообменнике (порода — P) ионами обратимы и описываются следующим выражением:



Как при процессе адсорбции, и здесь для характеристики равновесия используется ряд изотерм [30], а связь между начальной концентрацией катионов в водной среде C_0 и концен-

трацией C по достижении равновесия можно выразить предположенной в 1927 г. Вейджинером и Дженни зависимостью

$$C_0 - C = K \left(\frac{C}{C_0 - C} \right)^{1/p}, \quad (9)$$

где K и p — константы. Коэффициент распределения κ для иона A можно найти из уравнения Никольского:

$$\kappa_A = K_{A,B}^{z_A} \left(\frac{N_B}{C_B} \right)^{z_A z_B}, \quad (10)$$

где $K_{A,B}$ — коэффициент ионообменной сорбции; N_B — равновесное содержание ионов B в породе (или в другом ионообменнике); C_B — их равновесная концентрация в подземных водах; z_A и z_B — валентности соответственно A и B .

Как следствие уже упомянутых разных сил сцепления ионообменно действующие составные части пород могут сорбировать селективно. Так, например, органическим субстанциям присуща высокая селективность по отношению к двухвалентным ионам по сравнению с одновалентными. При этом и здесь в зависимости от ионного потенциала получается соответствующий ряд элиминирования: $Pb^{2+} > Cu^{2+} > Ni^{2+} > Co^{2+} > Zn^{2+} > Mn^{2+} > Ba^{2+} > Ca^{2+} > Mg^{2+} > NH_4^+ > K^+ > Na^+$, а для цеолитов и глинистых минералов, по У. Форстнеру и Д. Мюллеру, $Cu^{2+} > Pb^{2+} > Ni^{2+} > Ag^+ > Zn^{2+} > Hg^{2+} > Cd^{2+}$.

На основании геохимического состава фильтрационной среды (особенно в зоне аэрации и почвенном покрове) и подземных вод можно заключить, что обмениваются катионы Ca^{2+} , Mg^{2+} , Na^+ , K^+ . При этом элиминируются ионы тяжелых металлов и катионогенные органические соединения (например, некоторые гербициды), в результате чего жесткость сформированных подземных вод иногда увеличивается.

Осаждение

Миграция ингредиентов в загрязненных подземных водах нередко сопровождается процессом осаждения, т. е. образуются малорастворимые соединения — прежде всего гидроксиды, карбонаты, сульфиды, основные соли и другие — в зависимости от pH и Eh подземных вод и наличного ионного состава. В результате взаимодействий вода — порода, смешения разного типа вод, изменения газосодержания, особенно при движении подземных вод в вертикальном направлении, проявляются разные барьеры — окислительные, восстановительные, сульфатные, карбонатные, сульфидные, щелочные, кислые и прочие, благодаря которым элиминируется ряд токсичных загрязнителей (например, тяжелые металлы из водной миграции, по Е. Пенчевой, Е. Павловой).

Микробиологическая активность также может вызывать локальные изменения в среде по отношению к pH и Eh и способствовать образованию соответствующих барьеров, что, например, проявляется в окислении Fe^{2+} в Fe^{3+} , при котором отлагается нерастворимый осадок. При анаэробном микробиологическом образовании H_2S отлагаются осадки труднорастворимых сульфидов. Подробно эти процессы рассматриваются Ф. И. Тютюновой и В. Матте.

Термодинамическая проверка возможности осаждения каких-либо соединений проводится путем сопоставления произведений активности ионов, составляющих эти соединения в подземных водах, с произведением растворимости (ПР) соединений при данной температуре. Следует отметить, что из-за большой энергии активации, необходимой главным образом для создания зародышей новой фазы, снижение термодинамического потенциала является только необходимым, но недостаточным условием.

В зависимости от миграционных форм и качественного состава осадков кинетика их образования описывается одним из следующих уравнений:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = K_1 C_{\text{ос}}, \quad (11)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = K_2 (C_{\text{ос}} - C_{\text{ос}}^{\text{н}}), \quad (12)$$

где $C_{\text{ос}}$ — концентрация миграционных форм, участвующих в процессе осаждения; $C_{\text{ос}}^{\text{н}}$ — концентрация насыщения миграционных форм; K_1 и K_2 — скоростные константы. Как и в других гетерогенных процессах, зависимость этих констант от температуры позволяет уточнить, обуславливается ли весь механизм скоростью диффузии или скоростью химической реакции. Уравнение (11) характерно для менее растворимых соединений ($\text{pПР}^* > 4,8$), а уравнение (12) — для осадков ($\text{pПР} < 4,8$).

Сравнительно реже проявляются процессы соосаждения и окклюзии — прежде всего при элиминировании тяжелых металлов, например при соосаждении с окислами и гидроокислами. В этих случаях практически невозможно установить разницу, например, между соосаждением и сорбцией.

Фильтрация

Под фильтрованием подразумевается задерживание нерастворенных (отложенных) коллоидно- или чаще грубодиспергированных органических или неорганических веществ фильтрационной средой, что связано прежде всего с ее пористостью.

* pПР — отрицательный десятичный логарифм произведения растворимости.

Точное описание этого процесса затрудняется тем, что, наряду с разными процессами переноса неистинно растворенных миграционных форм (например, гидродинамическими, диффузией, гравитационной седиментацией), проявляются разные механизмы отложения, такие как действие сил Ван-дер-Ваальса, электростатические взаимодействия, химические реакции. В зоне насыщения, где можно предполагать невысокие скорости движения воды, основные механизмы переноса — это седиментация и диффузия.

В зоне аэрации при инфильтрации поверхностных вод, также как и в зоне насыщения при высоких скоростях движения, перенос частиц совершается, главным образом, водным потоком, а их собственное движение имеет подчиненное значение. Поэтому отложение идет только по контактными поверхностям зерен*, тогда как на остальной поверхности зерен отложение затруднено вследствие высокой скорости движения вод. Для массы задерживаемого вещества N с единицы объема фильтрационной среды процесс фильтрования описывается следующим выражением:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial x}, \quad (13)$$

где x — координата; t — время; v — скорость фильтрации; C — концентрация грубодиспергированного вещества. Для первой фазы фильтрования, когда в фильтрационной среде еще ничего не задержано, для изменения концентрации грубодиспергированного вещества по длине фильтрационного пути в зависимости от его начальной концентрации C_0 можно написать

$$-\frac{\partial C}{\partial x} = \zeta C \quad \text{или} \quad C = C_0 e^{-\zeta x}, \quad (14)$$

где ζ — параметр фильтрационной среды; C — конечная концентрация диспергированного вещества.

Задерживание фильтрационной средой грубодиспергированного (реже коллоидно-диспергированного) вещества вначале вызывает улучшающее действие, которое со временем исчезает. Наступают закупорка пор, уменьшение проницаемости и коагуляция. В природе это явление ускоряется в зависимости от скорости протекающих физико-химических и биогеохимических процессов. При этом изменяются и гидродинамические условия вследствие образования и отложения в поровом пространстве нерастворимых коллоидов, соединений железа, марганца и кальция, микроорганизмов со стойкими клеточными стенками, газовых пузырьков при процессе химического распада и т. д.

* Здесь рассматривается общий случай для фильтрационной среды, например песок с достаточной пористостью.

Поэтому необходимо изучение задерживания ионов полупроницаемыми мембранами, в качестве которых иногда могут действовать глинистые минералы.

Биоаккумуляция

Биоаккумуляция предполагает вхождение компонентов подземных вод в живые организмы и представляет собой особый случай, поскольку и при этом процессе возможна полная необратимость элиминирования. Однако когда жизненно необходимые концентрации (например, микроэлементов) превышаются и при этом появляется токсический эффект, рост организмов затормаживается и выход может быть летальным. Нередко в таких случаях аккумулярованное перед этим вещество может высвободиться, ремобилизоваться в водную миграцию.

Для подземных водных организмов аккумулярование данного вещества прямо пропорционально наличию его в водной среде. Для количественного описания равновесия используется так называемый фактор аккумуляции f_a :

$$f_a = \frac{C_{(\text{в организмах})}}{C_{(\text{в воде})}}. \quad (15)$$

Практически иногда бывает трудно отличить действительное вхождение в ячейки от адсорбции на стенках клеточных структур, поэтому внутриклеточное аккумулярование является спорным.

ПРОЦЕССЫ РЕМОБИЛИЗИРОВАНИЯ

Изменение гидрохимических условий часто вызывает ремобилизование уже элиминированных загрязнителей, и кинетика соответствующих процессов описывается уравнениями, аналогичными (1), (7), (12), но со знаком минус в правой части. Можно выделить следующие основные причины, вызывающие ремобилизование и вторичное загрязнение подземных вод.

1. Уменьшение рН подземных вод локально вследствие микробиологической активности или вблизи рудных залежей, при инфильтрации загрязненных промышленных вод и регионально — в бедных по содержанию карбоната почвах и породах зоны аэрации и при кислых осадках, причем растворяются прежде всего карбонаты и гидроокислы ионов металлов и увеличивается десорбция ионов металлов из-за замены их H -ионами.

2. Уменьшение Eh вследствие исчезновения кислорода при прогрессирующей микробиологической деятельности, причем растворяются окиси и гидроокиси железа и марганца.

3. Повышение E_h при окислении сульфидно связанных ионов металлов, причем последние освобождаются.

4. Наличие или ввод в водоносный комплекс естественных (или техногенных) комплексообразующих веществ.

5. Повышение минерализации (солености) подземных вод вследствие интрузии морских вод или смешивания с глубинными водами, причем повышается растворимость ряда малорастворимых соединений, например, за счет образования комплексов с Cl^- , а также совершается десорбция ионов тяжелых металлов за счет конкуренции других катионов. Иногда и понижение ионной силы вследствие, например, инфильтрации «свежих» поверхностных вод дает тот же эффект.

6. Вымирание живых организмов, освобождающих аккумулярованные перед этим загрязнители.

7. Изменение температуры подземных вод, что сказывается главным образом на растворимости осадков.

Часто эти причины действуют комбинированно, иногда тем самым еще больше усложняя прогнозирование.

Принципиально можно использовать некоторые из этих процессов ремобилизования для контролируемого быстрого очищения загрязненного водоносного горизонта.

ПРОЦЕССЫ СОЧЕТАНИЯ ЭЛИМИНИРОВАНИЯ И РЕМОБИЛИЗИРОВАНИЯ

Биогеохимические процессы превращения и распада

Биологический распад органических и превращение неорганических веществ в подземных водах представляет совокупность одиночных и групповых реакций, которые являются более сложными и неизученными по сравнению с процессами элиминирования. Хотя окислительно-восстановительные реакции могут совершаться и без участия живых организмов, необходимо подчеркнуть большую роль именно биогеохимических реакций при увеличении емкости элиминирования подземных водоносных комплексов. Следует отметить, что биогеохимические процессы не связаны с изменением направления отдельных (протекающих и без участия организмов) реакций, которые определяются термодинамическими условиями для каждой отдельной системы, но обычно создают кинетически благоприятную обстановку.

При изучении биогеохимических процессов возникают некоторые трудности проведения гидрохимического анализа, поскольку из присутствующих в подземных водах, например, органических веществ можно идентифицировать и количественно определить только 5—10 %.

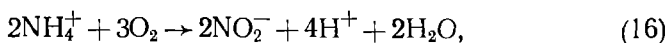
Некоторые представления в рассматриваемой области можно систематизировать следующим образом: метаболизирование органических веществ аэробным и анаэробным микробио-

логическим распадом; метаболизирование неорганических веществ аэробным и анаэробным микробиологическими превращениями.

Метаболизирование органических веществ. Аэробное микробиологическое метаболизирование органических веществ предполагает наличие достаточного количества кислорода для биогеохимических реакций, совершаемых гетеротрофными микроорганизмами. Если это условие не выполняется и в подземных водах имеются восстановимые соединения, то органические уголь-серо-фосфор- и азотсодержащие вещества могут быть вполне минерализованы до их конечных продуктов: CO_2 , SO_4^{2-} , NO_3^- , PO_4^{3-} , воды и других подобных. При этом распад высокомолекулярных соединений (например, пептидов, полисахаридов, крахмала и пр.) совершается внеклеточно в присутствии энзимов, в то время как низкомолекулярные окисляются внутриклеточно. Это означает, что когда содержание органических веществ больше, чем кислорода, необходимого для их распада (максимально 10,05 мг O_2 на 1 л воды при давлении 10^5 Па и 15°C), то микроорганизмы атакуют и другие источники кислорода (например, гидроокиси, нитраты или сульфаты). Изменения окислительно-восстановительных потенциалов E_h и обусловленные продуктами распада изменения pH, связанные с восстановлением кислородсодержащих ингредиентов, имеют существенное влияние на процессы элиминирования.

Минерализация органической материи в анаэробных условиях происходит, если кислотная и нейтральная ферментации (иногда вместо последней — щелочная) протекают полностью и находятся в равновесии между собой. При кислотной ферментации образуются продукты распада глюкозы: молочная кислота \rightarrow уксусная \rightarrow углекислый газ и вода. Хотя аэробные процессы распада, как правило, протекают быстрее и полнее, однако для некоторых соединений (например, хлорированных углеводов) анаэробный распад эффективнее.

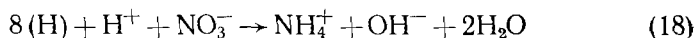
Метаболизирование неорганических веществ. Неорганические соединения тоже могут использоваться разными бактериями как в аэробных, так и в анаэробных условиях для обеспечения их энергетических потребностей. В аэробных условиях полученный в результате распада азотсодержащих органических веществ аммиак превращается далее в нитрат. Первый этап связан с деятельностью бактерии *Nitrosomonas*:



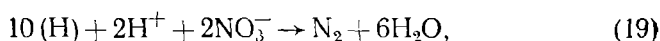
Группа бактерий *Thiobacillus* окисляет серосодержащие соединения до SO_4^{2-} , а железобактерии этой группы окисляют

(особенно в кислой обстановке) Fe^{2+} до Fe^{3+} , причем железо элиминируется из водной миграции.

При стабильных анаэробных условиях в водоносном горизонте формируется бактериальная флора, которая использует неорганические соединения в качестве протон-акцептора. К характерным биогеохимическим реакциям можно причислить амонификацию нитрата



или его денитрификацию с выделением молекулярного азота или двуазотной окиси



а также восстановление сульфатов с образованием H_2S (формированием сульфидных элиминирующих барьеров). Менее известна денитрификация в подземных водоносных комплексах, связанная с окислением пирита как серосодержащего субстрата бактериями *Thiobacillus denitrificans*.

Все биогеохимические реакции связаны с изменениями pH и Eh и, как следствие, с влиянием процессов элиминирования (сорбция, ионный обмен, осаждение, гидролиз). При понижении pH и Eh эти процессы в результате выделения продуктов микробиологической деятельности (например, винная кислота, лимонная кислота, бренцкатехин, салициловая кислота, салициловый альдегид и др.) обычно затруднены. В большинстве случаев не имеется достаточно данных для анализа всех реакций, механизмов и определений параметров, которые позволили бы с достаточной точностью прогнозировать и моделировать биогеохимические реакции. Поэтому при оценке влияния органических веществ приходится пользоваться упрощенными обобщенными параметрами.

Роль комплексообразования, форм миграции и связывания

Изучение миграционных форм ингредиентов имеет большое научно-практическое значение. Поэтому при изучении этих форм необходимо учитывать тот факт, что аналитические (суммарные) концентрации ингредиентов в подземных водах не отражают действительного состояния соответствующих компонентов и соотношения между отдельными формами в зависимости от физико-химических и биогеохимических факторов, а также их влияния на поведение компонентов при процессах элиминирования, самоочищения и др. В некоторых случаях даже невозможно точное аналитическое определение данного ингредиента в силу незнания его миграционных форм.

Данные, полученные Г. А. Соломиним, и наш опыт показывают, что компоненты мигрируют, главным образом, в одной

из следующих форм: 1) простые (гидратированные) и комплексные ионы; 2) истинно растворенные незаряженные комплексы и молекулы; 3) коллоиды и суспензии труднорастворимых соединений; 4) адсорбированные соединения на диспергированных частицах других веществ; 5) окклюдированные соединения в труднорастворимых кусках породы и вторичных минералах; 6) как составная часть живых организмов; 7) спонтанные газовые молекулы и совокупности.

Влияние гидратации на миграционные формы при процессах элиминирования (и при самоочищении) можно оценить, основываясь на представлениях О. Я. Самойлова и его школы [31]. Так, труднее элиминируются те миграционные формы данного ингредиента, которые характеризуются отрицательной энергией гидратации (анионные формы или ионы с меньшим ионным потенциалом) вследствие того, что они разрушают структуру воды. Термодинамически для них выгоднее оставаться в водной фазе. Положительно гидратирующиеся миграционные формы (прежде всего катионы и ионы с большим ионным потенциалом) увеличивают прочность водородных связей и укрепляют структуру воды вне поля иона; поэтому, как правило, они элиминируются легче. При однотипных по гидратации и валентности ионах из подземных вод легче элиминируются (например, сорбцией) те формы, энергия гидратации которых (т. е. ионный потенциал) меньше.

Отсюда вытекает необходимость дальнейших исследований, связанных с влиянием растворенных неорганических и органических веществ на молекулярно-кинетические свойства подземных вод, а также на миграцию и элиминирование химических элементов и соединений (см. гл. 2).

Для определения миграционных форм обычно ведут параллельно экспериментальные и расчетные исследования. В процессе экспериментов отдельные формы разделяют фильтрованием, диализом и пропусканием водного раствора через разные ионообменники [5, 26]. При расчетах учитываются активность соответствующих ингредиентов (комплексообразователей и лигандов) при данной ионной силе μ , константы устойчивости β_n ($n \leq 2$) и критерий С. А. Брусиловского, предложенный им в 1963 г., для гидрохимически значимых комплексных миграционных форм. Кроме того, уточняется возможность осаждения данного компонента в виде малорастворимого соединения в зависимости от состава его миграционных форм, pH, Eh (главным образом для элементов с временной валентностью), температуры и др.

Теоретические и экспериментальные исследования состава миграционных форм (прежде всего комплексов) позволяют уточнить основные физико-химические параметры, характеризующие миграцию загрязнителей, коэффициенты распределения и комплексованности [23], скоростные константы осаждения, растворения, сорбции, радиоактивного и биогеохимического

распада и др., иногда и коэффициент гидродинамической дисперсии.

Коэффициент комплексованности определяется по формуле

$$\varphi = C'/C_0, \quad (20)$$

где C' — концентрация миграционных форм ингредиента, участвующих в соответствующем физико-химическом (биогеохимическом) процессе; C_0 — суммарная равновесная концентрация в жидкой фазе (подземных водах). Так, например, в процессах сорбции для большинства ионов металлов характерны только положительно заряженные простые и комплексные формы, а для таких компонентов, как As, P, S, Se, F, — отрицательные формы, для органических соединений (ароматические, нефтяные, гуминовые, фульвокислоты, пестициды) коэффициент комплексованности, как правило, равен 1.

Необходимость точного определения этих параметров (называемых иногда вместе с коэффициентом гидродисперсии миграционными параметрами) объясняется тем, что они входят в уравнение баланса и кинетики. Кроме того, они используются для построения изотерм гетерогенных реакций, в которых участвуют определенные ингредиенты, более точно (адекватно) отражающие перенос вещества при взаимодействии их миграционных форм в системе подземные воды — порода — газ — органическое вещество — живые организмы. Не останавливаясь подробно на этом вопросе, приведем в качестве примера кинетическое уравнение, описывающее одновременный процесс осаждения и сорбции (растворения и десорбции), при этом учитываются поверхностное осаждение и связь между C и N по уравнению (5).

$$\frac{\partial N}{\partial t} = K(\varphi C_{oc} - C_{oc}^n) + K_1\left(\varphi_1 C - \frac{1}{\kappa} N\right). \quad (21)$$

Новое в этом выражении то, что процессы комплексообразования здесь учтены с помощью коэффициентов комплексованности φ для осаждения (растворения) и φ_1 — сорбции (десорбции). Так как по определению $0 < \varphi_i < 1$, очевидно, что скорость осаждения и сорбции может понизиться более чем в два раза по сравнению со скоростью, которая определяется по кинетическим уравнениям, используемым в настоящее время.

Кроме того, процесс комплексообразования можно учесть и при использовании коэффициента φ для коррекции параметров, вычисленных без учета миграционных форм. Например, при сорбции или ионном обмене соответствующий коэффициент распределения изменится следующим образом:

$$\kappa_{ск} = \varphi \kappa, \quad (22)$$

где $\kappa_{ск}$ — коэффициент распределения скорректированный; κ — коэффициент распределения, вычисленный без учета комплексо-

образования по уравнениям (5) или (10) для соответствующих моделей массопереноса.

Хотя радиоактивный распад можно представить как сочетание процессов элиминирования и ремобилизирования, его подробно не рассматриваем, поскольку, за исключением элиминирования данного радиоактивного изотопа, через определенное его периодом полураспада время в остальном его поведение существенно не отличается от поведения стабильных изотопов.

По-видимому, целесообразно различать формы миграции и формы связывания (удерживания) данного ингредиента с породой, образующиеся в результате процесса элиминирования его из подземных вод. Формы связывания более стабильны, поэтому элиминирование имеет большую продолжительность и зависит от степени необратимости приведших к тому процессов. И наоборот, определение форм связывания загрязнителей позволяет прогнозировать возможную опасность после их ремобилизирования для живых организмов (вторичное загрязнение). Как показано в работах У. Форстнера, Г. Витмана, И. Шоера, Б. Великова, Ф. Фриммела, эти формы обычно определяются экстрагированием с разными реагентами. На основании проведенных экспериментов для тяжелых металлов и радионуклидов можно рекомендовать следующую последовательность экстракционных ступеней: 1) обменные катионные формы и легкорастворимые соединения — $1\text{ M NH}_4\text{OOCCH}_3$; 2) карбонатсвязанные формы — $1\text{ M NaOOCCH}_3 + 1\text{ M CH}_3\text{COOH}$; 3) легковосстанавливаемые формы — $0,1\text{ M NH}_2\text{OH} \cdot \text{HCl} + 0,01\text{ M HNO}_3$; 4) средне- и трудновосстанавливаемые и хемосорбированные формы — $0,2\text{ M (COONH}_4)_2 + 0,2\text{ M (COOH)}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$; 5) органически связанные формы — $30\% \text{ H}_2\text{O}_2 + 1\text{ M NH}_4\text{OOCCH}_3$; 6) очень крепко связанные (внедренные в решетку минералов породы) формы — $\text{K} \cdot \text{HCl} + \text{K} \cdot \text{HNO}_3$.

При упрощенных расчетах иногда вместо пяти ступеней экстракции достаточно ориентировочно определить легкорастворимые соединения и обменные катионные формы с помощью 1 M BaCl_2 с последующим использованием 1 M HCl для извлечения труднорастворимых и хемосорбированных форм, а затем выполнить ступень 5.

Так как при лабораторных опытах основная часть ионов задерживается в нижней части колонок (где при пропускании воды снизу вверх отмечается самое интенсивное взаимодействие воды и породы), пробы фильтрационной среды обычно берут из этой части. При полевых экспериментах надо брать пробы на разных глубинах, но недалеко от пусковой скважины.

Хотя по результатам использованной методики можно сделать определенные выводы о развитии процессов самоочищения и возможного ремобилизирования, необходимо заметить, что она не отличается особой селективностью и специфичностью по отношению к формам, а подготовка проб фильтрационной

среды и проведение опытов должны быть очень тщательными. Еще труднее точно оценить связь между определенными формами связывания и их доступностью для освоения живыми организмами (см. гл. 5).

Ремобилизующая способность комплексообразующих веществ, как и их стабилизирующее действие на миграционные формы ряда ингредиентов подземных вод, ведет к некоторым следствиям. Кроме вышеупомянутого влияния на процессы элиминирования, изменяется и действие загрязняющих веществ на живые организмы. Например, токсичность некоторых тяжелых металлов усиливается при комплексообразовании с одними комплексообразующими реагентами (метил-ртутные соединения) и ослабевает с другими (ЭДТА). Вследствие комплексообразования сильно затрудняются некоторые технологические процессы, например флокуляция (коагуляция), применяемые для улучшения качества вод. Для практической количественной оценки ремобилизирования как следствия комплексообразования. В. Хубером предложен так называемый показатель ремобилизирования — отношение количества ремобилизуемого металла из малорастворимого соединения (например, фосфат меди) к молярной концентрации комплексообразующего вещества, находившегося в водной пробе.

Не следует забывать, что иногда комплексообразующие вещества (прежде всего органические) могут элиминироваться на твердую фазу и образуют комплексные соединения гетерогенно (например, ионы тяжелых металлов) [45].

Из гидрохимических методов наибольший интерес для исследования комплексообразования в подземных водах представляет вольтамперметрия — единственный метод, позволяющий характеризовать миграционные формы ингредиентов вплоть до концентраций порядка микро- и нанограмм на литр. К сожалению, эта возможность реализуется только для систем с точно установленными условиями. Интересны и современные модификации этого метода — дифференциальная импульсная вольтамперметрия и дифференциальная импульсная инверсионная вольтамперметрия с предварительным накоплением (см. гл. 4).

* * *

Все вышеизложенное и анализ материалов, опубликованных У. Шоттлером, И. Хиггинсом, Р. Бернсом, Г. Липером и Д. Евреттом, позволили сгруппировать важнейшие процессы самоочищения в системе подземные воды — порода — газ — органическое вещество — живые организмы (табл. 2). Выбраны самые распространенные загрязнители, которые следует изучать при моделировании миграции. При этом необходимо отметить, что в конкретных случаях нужно выбирать гидрохимически значимые (релевантные) ингредиенты, и, принимая во внимание действие возможных процессов, устанавливать, какими парамет-

Таблица 2

Важнейшие физико-химические и биогеохимические процессы самоочистения в подземных водах для некоторых релевантных групп загрязнителей

Загрязнители	Свойства загрязнителей		Отношение загрязнителей к ремобилизации		Процессы при загрязнении							
	Инертность	Стойкость	Ремобилизуемые (комплексобразованием)	Ремобилизующие	Фильтрация	Сорбция	Ионный обмен	Осаждение	Гидролиз	Биоаккумуляция	Аэробный распад	Анаэробный распад
Грубодиспергированное неорганическое вещество					++	++	++		++			
Аммоний						++	++				++	++
Токсичные металлы		++	++		++	++	++	++	++	++	++	+
Железо и марганец		++	++		++	++	++	++	++	++	++	
Радионуклиды		++	++		+	++	++	++	+	+		у
Мышьяк		+	++		+	++	++	++				
Хлорид	++			++								
Сульфат	++											
Нитрат	++										++	++
Фосфаты	+		+	+		++		++	+	++	+	+
Фторид				++		+				++		
Цианид				+						++	++	++
Углеводы			+	+	++	+				++	++	++
Детергенты	+		++	++	+	++				++	++	++
Полициклические углеводы		++	++	++	+	++				++	++	++
Фенолы			++	++	+	++			+	++	++	++
Органические углеродсодержащие соединения	+	++	++		+	++				++	++	+
Пестициды		++	+			+				++	++	++
Бактерии			+	++	++	++			о	++	++	++
Вирусы						++			о	+		

Примечание. ++ — преобладающее действие; + — частичное действие; у — радиоактивный распад; о — автолиз.

рами и моделями можно наилучшим образом описать количественно и прогнозировать загрязнение подземных вод. При этом, как показывают наши и другие исследования, неизбежны ограничения и генерализации. Все указывает на необходимость совершенствования методов моделирования и прогноза миграции загрязнителей в подземных водах и требует дальнейших исследований и глубокого внимания к роли физико-химических и биогеохимических процессов.

САНИТАРНО-ГИГИЕНИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ИЗУЧЕНИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЗАГРЯЗНЕНИЙ В ПОДЗЕМНЫХ ВОДАХ *

Все возрастающий рост городов и объемы промышленного производства обуславливают потенциальную опасность загрязнения не только поверхностных, но и подземных вод. Основными путями попадания антропогенных загрязнений в подземные воды являются: миграция из открытых водоемов при наличии гидравлической связи их с подземными водами, фильтрация через грунт хвосто- и шламохранилищ, полей фильтрации, а также на водозаборах с искусственным пополнением подземных вод за счет поверхностных.

Изучение закономерностей распространения микробных и химических загрязнений в подземных водах имеет важное значение для обоснования мероприятий по санитарной охране подземных вод, разработке научных основ прогнозирования их качества в различных санитарных и гидрогеологических условиях и определения протяженности границ зон санитарной охраны подземных водозаборов.

Закономерности распространения и выживания микроорганизмов в подземных водах

Дальность и скорость распространения микроорганизмов в подземных водах определяются, с одной стороны, гидрогеологическими условиями, с другой — временем выживания и сохранения вирулентности патогенных микроорганизмов. При этом при движении воды в мелкопористых породах дальность распространения микроорганизмов в значительной степени определяется процессами адсорбции, а в трещиноватых и гравийно-галечниковых отложениях, обладающих незначительной адсорбционной способностью, — выживаемостью микроорганизмов в воде.

Вместе с тем данные о выживаемости патогенных и санитарно-показательных энтеробактерий в водонасыщенных грунтах крайне ограничены.

Так, время выживания *E. Coli* составляет (в сут), по данным Е. И. Гончарука, 190—200, Я. И. Вайсмана — 210,

* Раздел написан совместно с Е. И. Моложавой.

Б. М. Кудрявцевой — около 100, И. Келлера — 90, Х. Фоурхелла и Е. Дея — 70.

С целью научного обоснования гигиенических критериев, определяющих степень микробного самоочищения подземных вод, Е. И. Моложавая, Н. В. Чугунихина и М. И. Афанасьева в 1978—1979 гг. провели исследования по изучению выживаемости, адсорбции и дальности распространения в водонасыщенных грунтах различных видов санитарно-показательных и патогенных энтеробактерий и энтеровирусов: кишечной палочки, энтерококка, возбудителей брюшного тифа, паратифа, дизентерии, фага кишечной палочки, вируса полиомиелита, а также споровых форм бактерий.

Выживаемость микроорганизмов изучалась в статических условиях: стеклянные сосуды емкостью 10 л заполнялись различными грунтами и водой, содержащей заданную концентрацию изучаемых микроорганизмов.

Исследования проводили с использованием различных вод: артезианской, дехлорированной водопроводной, речной и ее фильтрата при температуре воды от 4 до 20 °С и плотности исходного заражения от 10^2 до 10^8 м.т./л (микробных тел на 1 л). Водой заполнялись породы различного состава: пески, ракушечник, галечники и известняки. В процессе вегетирования изучались морфологические, биохимические и серологические свойства, вирулентность сальмонелл и шигелл по сравнению с исходными показателями.

Исследования по изучению адсорбции и дальности распространения микроорганизмов в водонасыщенных грунтах проводились на модельных установках — фильтрационных колоннах (диаметр — 10 см, высота — 100 см), заполненных фильтрующим песчаным грунтом ($d_{\text{эф}} = 0,2$ мм), которые при последовательном соединении составили путь фильтрации 20 м. Исследования проводили при различной скорости фильтрации (0,1—2 м/сут). Вода подавалась из напорной емкости, фильтрация осуществлялась сверху вниз и по горизонтали. В натурных условиях была изучена дальность распространения микроорганизмов в различных гидрогеологических условиях залегания подземных вод, приуроченных к песчаным, гравийно-галечниковым и трещиноватым породам на экспериментальных створах наблюдательных скважин. Исследования показали, что наиболее благоприятные условия для выживания (время выживания составило от 30 до 400 сут) микроорганизмов в зависимости от их вида, плотности заражения, химического состава и температуры воды имеются в водонасыщенных песках и ракушечниках.

При низких температурах (4—8 °С) выживаемость сальмонелл брюшного тифа при плотности заражения 10^2 м.т./л составляла 50—56 сут, в то время как при плотности заражения 10^4 —120 сут. Отмирание сальмонелл паратифа В в этих условиях происходило медленнее: при плотности заражения воды 10^2 м.т./л выживаемость их достигала 220 сут, а при 10^4 , в

Таблица 3

Выживаемость микроорганизмов в водонасыщенных грунтах при температуре от 4 до 8 °С*

Микроорганизмы	Плотность заражения воды	Время выживания (в сут)	
		в песках	в известняках
Сальмонеллы брюшного тифа	10^2 м. т./л	50—56	—
То же	10^4 м. т./л	До 120	—
Сальмонеллы паратифа В	10^2 м. т./л	До 220	40
То же	10^4 — 10^5 м. т./л	От 74 до 400**	40—85
Шигеллы (дизентерия Зонне и Флекснера)	10^2 м. т./л	До 174	—
То же	10^4 м. т./л	Более 300	—
Вирус полиомиелита	10^3 БОЕ/мл	До 116	38—65
Фаг <i>E. Coli</i>	10^3 БОЕ/мл	До 400	—
Кишечная палочка и энтерококки	10^5 — 10^8 м. т./л	100—400	120

* Эксперименты проводились совместно с Н. В. Чугунихиной, М. И. Афанасьевой.
 ** В зависимости от штамма и состава воды.

зависимости от штаммовой принадлежности и состава воды, от 74 до 400 сут. При температуре воды 18—20 °С сальмонеллы паратифа В сохранялись от 34 до 140 сут. Установлено, что максимальное время выживания шигелл Зонне и Флекснера приблизительно одинаково и составляет при плотности заражения воды 10^2 м. т./л 174 сут, а при 10^4 около 300 сут. Условия для выживания микроорганизмов в известняках были менее благоприятны, чем в песках и ракушечнике: сальмонеллы паратифа В в зависимости от состава известняка сохранялись от 40 до 85 сут.

При длительном вегетировании в водонасыщенных грунтах сальмонеллы брюшного тифа и паратифа В сохраняли вирулентность для белых мышей, возбудители дизентерии в течение 2 мес вегетирования полностью ее утрачивали. Исследования показали, что вирус полиомиелита выживает в водонасыщенных песках до 116 сут, в известняках до 65 сут, а фаг *E. Coli* — около 400 сут при исходном заражении воды 10^3 БОЕ/мл. Что касается санитарно-показательных бактерий кишечной палочки и энтерококка, время сохранения их жизнеспособности составляло от 100 до 400 сут при плотности заражения от 10^4 до 10^8 м. т./л в песчаных грунтах и до 120 сут — в известняках (табл. 3).

Меньшая продолжительность выживания микроорганизмов в водонасыщенных известняках, чем в песках, объясняется, видимо, изменением рН среды, а также тем, что в адсорбированном состоянии в песчаных грунтах существуют более благоприятные условия вегетирования микроорганизмов, чем в поровой воде.

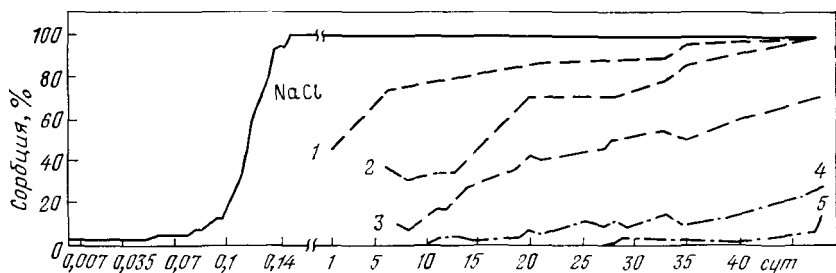


Рис. 3. Кинетика сорбции Esh. Coli и фага E. Coli (ms_2) в водонасыщенных грунтах с диаметром частиц 0,25—0,5 мм и скоростью фильтрации 1 м/сут на фоне несорбируемого компонента NaCl.

Длина пути фильтрации (в см): NaCl — 60; Esh. Coli: 1 — 20, 2 — 40, 3 — 60; E. Coli (ms_2): 4 — 20, 5 — 40.

При прогнозировании микробного самоочищения подземных вод в зависимости от массивности источника загрязнения и температуры воды рекомендуется использовать максимальное время выживания патогенных и санитарно-показательных микроорганизмов от 200 до 400 сут.

В подземных водах, залегающих в песчаных грунтах, помимо отмирания микроорганизмов, существенным фактором самоочищения является адсорбция (адгезия). Установлено, что степень адсорбции различных микроорганизмов в песчаных грунтах неодинакова и колеблется от 20 до 90 %. Отмечены также штаммовые и видовые различия в степени адсорбции как патогенных, так и санитарно-показательных микроорганизмов, что объясняется не только размерами, но и особенностями ультраструктур микробной клетки.

Дальность распространения различных микроорганизмов в песчаных грунтах неодинакова: при скорости движения воды от 0,1 до 2 м/сут в мелко- и среднезернистых песках вирус полиомиелита полностью задерживается на пути фильтрации в 30—50 см. В тех же условиях фаг T_1 E. Coli адсорбируется несколько хуже, полная задержка отмечается на пути фильтрации от 2 до 25 м в зависимости от его концентрации.

Дальность распространения споровых форм бактерий (споры атракоида и клостридий) в песчаных грунтах достигает 1 м. В тех же условиях различные штаммы E. Coli могут распространяться на расстояние от 3 до 10 м. Для бактерий группы кишечных палочек и энтерококка в натурных условиях установлена максимальная дальность распространения (в м): в мелкозернистых песках — 30—40, в среднезернистых — до 200, в гравийно-галечниковых и трещиноватых породах — 500—1000.

Различная дальность распространения микроорганизмов объясняется их количественным соотношением, неодинаковым временем выживания и адсорбционными свойствами. При

оценке качества подземных вод показателем степени микробного самоочищения подземных вод может быть количество бактерий группы кишечных палочек, фаг *E. Coli* является надежным индикатором самоочищения подземных вод от энтеровирусов.

Изучение кинетики и параметров адсорбции микроорганизмов в фильтрационном потоке на фоне несорбируемого компонента хлоридов показало, что скорость продвижения микробных тел значительно меньше скорости движения воды, при этом в каждом сечении потока концентрация микроорганизмов во времени постепенно увеличивается, вплоть до насыщения сорбционной емкости грунта (рис. 3). Полученные данные свидетельствуют о том, что для прогнозирования дальности распространения ($x_{\bar{C}}$) микроорганизмов при фильтрации воды в песчаных грунтах возможно использование уравнения нелинейной кинетики сорбции, учитывающего влияния основных действующих факторов: состава грунтов, степени заражения воды, времени выживания и параметров сорбции микроорганизмов с таким расчетом, чтобы время движения загрязненного потока превышало время выживания патогенных микроорганизмов:

$$x_{\bar{C}} = \kappa \ln \left(1 + \frac{1 - \bar{C}}{\bar{C}} e^{\alpha t} \right), \quad (23)$$

где κ — коэффициент распределения, равный $\kappa = 1/\beta$, здесь β — параметр сорбции, зависящий от скорости фильтрации и предельной сорбционной емкости грунта; \bar{C} — относительная концентрация микроорганизмов в воде, равная $\bar{C} = C/C_{\text{вх}}$, здесь $C_{\text{вх}}$ и C — концентрация микроорганизмов в начале и конце пути фильтрации; t — время выживания микроорганизмов; α — параметр сорбции, зависящий от исходной концентрации микроорганизмов:

$$\alpha = \frac{1}{t_2 - t_1} \ln \left(\frac{\bar{C}_2(1 - \bar{C}_1)}{\bar{C}_1(1 - \bar{C}_2)} \right); \quad (24)$$

$$\beta = \frac{1}{x_{\bar{C}}} \ln \left(1 + \frac{1 - \bar{C}}{\bar{C}} e^{\alpha t} \right), \quad (25)$$

где C_1 и C_2 — концентрация микроорганизмов в начале и конце пути фильтрации к моменту времени t_2 и t_1 .

Параметры α и β определяются экспериментальным путем или по данным натурных исследований качества воды в наблюдательных скважинах.

Изучение условий миграции химических загрязнений в водонасыщенных грунтах

Наиболее опасными химическими загрязнителями подземных вод являются поступающие из различных накопителей

промышленных сточных вод трудноокисляющиеся органические и неорганические соединения, а также сельскохозяйственные пестициды.

Е. И. Моложавой в 1978—1980 гг. проведены исследования по изучению условий распространения нефтепродуктов, канцерогенов, детергентов, пестицидов и солей металлов при фильтрации в водонасыщенных грунтах как на модельных установках, так и в натурных условиях на экспериментальных створах наблюдательных скважин.

Эксперименты проводились на фильтрационных колоннах (диаметр 10 см высота 100 см), заполненных песчаным грунтом ($d_{\text{эф}} = 0,2—0,5$ мм) при скорости фильтрации 0,5—1 м/сут. В колонны из напорной емкости подавалась вода (водопроводная, речная и городская сточная после биологической очистки), содержащая заданные концентрации (5—10 ПДК) химических веществ. Результаты исследований показали, что постоянная фильтрация загрязненной воды через песчаные грунты не обеспечивает надежной очистки от органических и неорганических веществ. При пути фильтрации 1 м сульфенол НП-1 задерживался на 10—23 %, 3,4-бензпирен — на 92—100 %, эмульгированные нефтепродукты на 12—100 %, фенолы на 23—50 %, хлорорганические и фосфорорганические пестициды: дихлордифенил трихлорметилметан (ДДТ), гексахлорциклогексан (ГХЦГ), линдан, полихлорпирен, хлорофос, дихлордивенилфосфат (ДДВФ), симазин — на 11—93 % в зависимости от исходной концентрации и скорости фильтрации.

При фильтрации воды происходит постепенное накопление загрязнений в фильтрующем грунте. Вместе с тем, параллельно накоплению идут процессы разложения органических веществ в грунтах. Так, нефтепродукты с концентрацией 20 мг/л разлагаются при температуре 18—20 °С в течение 10 сут, а при температуре 4—6 °С — 40 сут; 3,4-бензпирен при концентрации 0,005—0,007 мкг/л разлагается в условиях различных температур в течение 10 сут, фенол (карболовая кислота) при концентрации 10 мг/л в тех же условиях разлагается более интенсивно (в течение 2 сут). Через 30 сут после прекращения фильтрации воды концентрация нефтепродуктов и 3,4-бензпирена в песке снижается в 10 раз. Одновременное присутствие в воде детергентов в концентрации 5 мг/л снижает степень сорбции и замедляет скорость разложения органических загрязнений, а также улучшает условия десорбции их из фильтрующего грунта.

Экспериментально были изучены особенности миграции в фильтрационном потоке ионов различных металлов (цинка, свинца, никеля, меди, хрома, кобальта, ванадия). Установлено снижение концентрации металлов в различных точках по пути фильтрации и замедление скорости их продвижения по сравнению со скоростью движения воды. Однако при непрерывной фильтрации загрязненной воды концентрация металлов в филь-

трате возрастала, происходило насыщение грунтов и продвижение загрязнений далее по пути фильтрации.

Для прогнозирования изменения концентрации компонентов в воде были изучены кинетика и параметры миграции (коэффициент распределения K и дисперсии D) в фильтрационном потоке нефтепродуктов, фосфорорганических пестицидов (ДДВФ), фенолов и солей металлов (никеля, хрома, свинца, цинка, меди, кобальта, ванадия) на фоне кинетики миграции хлора как несорбирующегося компонента. Коэффициент распределения, отражающий взаимосвязь гидродинамических параметров и интенсивности сорбции для ионов хрома, растворенной нефти, фенола (карболовой кислоты) и ДДВФ, приближается к 1, что характерно для слабосорбирующихся соединений, а для эмульгированной нефти 333,4, ионов никеля 143, что свойственно интенсивно сорбирующимся веществам.

Прогнозирование качества инфильтрационных вод с учетом физико-химических процессов в водоносном пласте возможно только на основе теории массопереноса с использованием гидродинамических уравнений выражающих количественное соотношение полученных параметров миграции компонентов в водоносном пласте [2, 4, 30, 41].

Результаты экспериментов согласуются с данными натурных исследований Е. И. Моложавой, Н. В. Чугунихиной, М. И. Афанасьевой, Н. А. Горячевой и Л. С. Кануниниковой, проведенных в 1983 г. и показавших, что при опытном нагнетании загрязненных вод в водоносный горизонт самоочищение инфильтрационных вод от нефтепродуктов, канцерогенов, детергентов и хлорорганических ядохимикатов (ГХЦГ) не происходит даже на пути фильтрации 1500 м. Через 50 сут после прекращения нагнетания концентрация полярных углеводов и нефтепродуктов в воде на расстоянии 220 м от места нагнетания снизилась на 50 %, на расстоянии 1500 м — на 82 %; через 180 сут углеводороды в воде опытных скважин не были обнаружены. Динамика изменения концентрации углеводов коррелировала с динамикой бихроматной окисляемости, которая может быть интегральным показателем наличия трудноокисляющихся органических веществ в воде.

Полученные данные могут быть использованы при прогнозировании завершения процесса самоочищения подземных вод при их загрязнении углеводородами.

ОСОБЕННОСТИ ГИДРОГЕОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ МИГРАЦИИ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ В ПОДЗЕМНЫХ ВОДАХ С ПОЗИЦИЙ МОЛЕКУЛЯРНО-КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

ОСНОВНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНО-КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

Загрязняющие вещества в подземных водах в растворенном состоянии представлены либо молекулами неэлектролитов, либо ионами. Эти частицы, участвуя в конвективном массопереносе, так же как молекулы воды, совершают тепловые движения (колебания и скачки из одного положения равновесия в другое). Тепловые перемещения частиц существенно влияют на концентрирование и перемещение вещества в объеме воды, в том числе и в потоке, часто не согласуясь с его направлением. Тепловые движения тесно связаны с процессом гидратации взаимодействием с молекулами воды. В результате может резко измениться тепловая подвижность частиц, которая в подземных водах в значительной мере зависит от взаимодействия с поверхностью водовмещающих пород. Наконец, адсорбция также существенно зависит от тепловой подвижности частиц загрязняющего вещества.

Тепловые перемещения частиц раствора происходят в соответствии с его структурой, поэтому остановимся на главнейших особенностях структуры воды и водных растворов.

Тетраэдрический характер *структуры воды* установлен в 1933 г. Д. Берналом и Р. Фаулером и развит в дальнейшем в работах Д. Моргана и Б. Уоррена, Г. Бреди и В. Романова, В. И. Яшкичева и О. Я. Самойлова и других ученых в виде структурной теории. Структура воды определяется строением ее молекулы: три атомных ядра образуют равнобедренный треугольник, расстояние $O-H$ в среднем равно 0,1 нм, а угол $H-O-H$ составляет примерно 105° и практически равен тетраэдрическому; из 8 электронов (2 водородных и 6 кислородных) 4 обеспечивают ковалентную связь ядер кислорода и водорода, а 4 являются неподеленными (принадлежат только ядру кислорода в данной молекуле) и обеспечивают водородную связь с другими молекулами воды и катионами водного раствора. Эти же электроны обеспечивают связь адсорбированной молекулы воды с атомами Si и Al, находящимися на поверхности алюмосиликатов, играющих роль адсорбента. Направления орбит двух неподеленных пар электронов расположены в плоскости, проходящей через ядро кислорода и перпендикулярной к плоскости $H-O-H$, и образуют угол, близкий к тетраэдрическому. Наглядная модель молекулы воды в виде тетраэдра с центром в ядре атома кислорода и электрическими зарядами, сосредото-

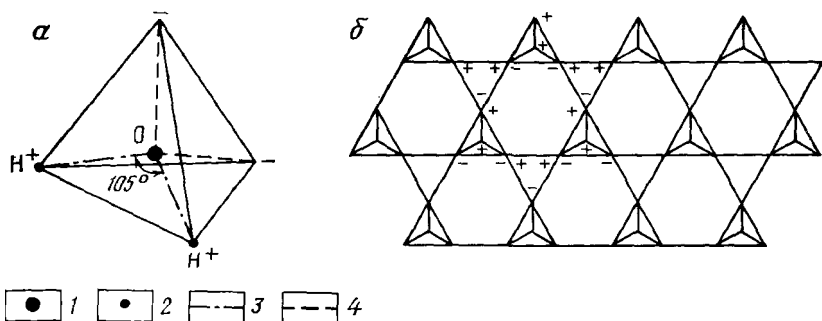


Рис. 4. Структура молекулы воды (а) и льда (б).

Ядро: 1 — кислорода, 2 — водорода; 3 — направление связи О—Н; 4 — направление неподеленных пар электронов

ченными в вершинах этого тетраэдра на расстоянии 0,1 нм от ядра кислорода, показана на рис. 4, а.

Молекула воды, являясь диполем, имеет электроотрицательное и электроположительное направления и благодаря тетраэдрическому строению может участвовать в четырех водородных связях. Этим объясняются многие особенности структуры льда и воды. Каждая молекула воды стремится быть окруженной, так же как и во льду, четырьмя соседними молекулами, тремя того же слоя и одной соседнего, что приводит к существованию в воде льдоподобного каркаса (см. рис. 4, б), размытого и искаженного тепловым движением молекул. В структурной теории О. Я. Самойлова подчеркивалось, что наличие молекул воды, находящихся в двух различных состояниях (каркасные и пустотные), представляет собой важнейшую особенность воды. Отметим, что если молекулы воды во льду в основном совершают тепловые колебания около временного положения равновесия, то в жидкой фазе они, кроме колебаний (примерно $8 \cdot 10^{11}$ колебаний в секунду при $t = 25^\circ \text{C}$), скачкообразно перемещаются по пустотам структуры из одного временного положения равновесия в растворе в другое ($\sim 5,9 \cdot 10^8$ скачков в секунду при $t = 25^\circ \text{C}$), совершая трансляционное движение.

Структурная теория водных растворов была разработана О. Я. Самойловым [31]. Наиболее важные положения ее приведены ниже.

Любая частица раствора, как и молекула воды, совершает колебательные движения и трансляционные перемещения по пустотам структуры. Частицы растворенного в воде вещества гидратированы, т. е. взаимодействуют с молекулами воды раствора. Наибольшее значение имеет ближняя гидратация, которая связана с взаимодействием частицы растворенного вещества с молекулами воды, составляющими ее ближайшее окру-

жение. Расположению молекул воды ближайшего окружения частицы свойственна определенная упорядоченность. Структура воды вокруг частицы растворенного вещества, так же как структура «чистой» воды, имеет динамический характер, т. е. в каждый момент времени одни молекулы воды, совершая трансляционное движение, выходят из области ближайшего окружения, а другие входят в эту область. По существу это положение было высказано еще в 1887 г. Д. И. Менделеевым. Говоря о характере соединений между частицами растворенного вещества и частицами воды, он указывал, что при обыкновенной температуре эти соединения происходят, при ней и разрушаются. Частицы растворителя, в этот момент находящиеся в состоянии взаимодействия с растворенным телом, в следующий момент могут сделаться свободными, чтобы опять вступить в согласное движение с частицами растворенного. Такой обмен молекулами воды происходит при условии, что в среднем около данной частицы число молекул воды ближайшего окружения постоянно. Трансляционное движение молекул воды происходит главным образом по пустотам структуры. Ажурность структуры воды (наличие пустот) имеет большое значение и для трансляционного движения частиц веществ, растворенных в воде. Подвижность их зависит от энергии связи частиц с молекулами воды, ближайшего окружения. Чем эта энергия больше, тем менее подвижна частица растворенного вещества и наоборот. Очевидно, что и подвижность молекул воды около частиц зависит от указанной энергии. Ближняя гидратация изменяется под влиянием давления, температуры, наличия в растворе других заряженных частиц и т. д. По О. Я. Самойлову и Т. Н. Носовой, при уменьшении гидратации происходит *обозвоживание*, при увеличении — *оводнение*.

При изучении процессов соле- и влагопереноса мы имеем дело с многофазной системой. На поверхности твердой фазы, породе имеется слой адсорбционно-связанной воды. Некоторые исследователи считали, что этот тип воды неподвижен. Однако последние экспериментальные данные свидетельствуют, что даже у поверхности глинистых минералов, обладающих наибольшей адсорбционной способностью, молекулы воды обладают высокой подвижностью [35]. Результаты работ, выполненных методами ядерного магнитного резонанса (ЯМР) на ядре ^{17}O , с импульсным градиентом поля и спектроскопии рассеяния медленных нейтронов показывают, что вода на поверхности глинистых минералов, даже при толщине ее слоя в два молекулярных диаметра, по своей подвижности гораздо ближе к нормальной жидкой воде, чем к твердой фазе (льду). Учитывая эти данные, Г. П. Алексеенко с сотрудниками [35] делают вывод, что адсорбционно-связанная вода при температуре выше области фазового перехода несомненно является жидкостью, хотя и весьма специфичной. Влияние поверхности глинистых минералов уменьшает подвижность адсорбированных молекул

воды в несколько раз. Эти выводы справедливы для практически любых минералов, слагающих водоносные породы, так как в их кристаллической структуре у поверхности всегда имеются заряженные частицы — центры адсорбции.

Таким образом, как следствие из общей структурной теории водных растворов можно сформулировать следующие положения для многофазной системы (порода — вода в различных состояниях).

1. Молекулы воды и частицы раствора, находящиеся на поверхности породы, совершают колебательные движения и трансляционные перемещения по пустотам структуры раствора.

2. Молекулы воды гидратируют как частицы минералов (ионы кристаллической решетки), находящиеся ближе всего к поверхности раздела фаз, так и частицы растворенного в воде вещества, находящиеся на поверхности минералов (в сорбированном состоянии). Расположению молекул воды на поверхности породы свойственна определенная упорядоченность.

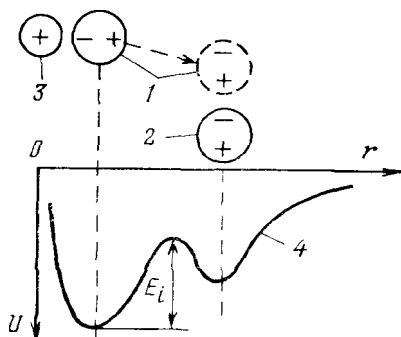
3. Структура воды у поверхности породы, как и в любом участке раствора, имеет динамический характер. Одни молекулы воды и частицы растворенного вещества в каждый момент времени входят в приповерхностный слой, совершая трансляционное движение, а другие выходят. Такой обмен происходит при условии, что в среднем около каждой частицы поверхности твердой фазы число частиц растворенного вещества (например, обменных катионов) и молекул воды остается постоянным.

4. Подвижность молекул воды зависит от энергии их связи с центрами адсорбции (полюсами кристаллической решетки) на поверхности минералов, а также от энергии связи с частицами растворенного вещества.

Энергия связи любой частицы раствора с молекулами воды и другими частицами ближайшего окружения определяется величиной потенциального барьера (энергии активации), преодолеваемого частицей при ее смещении из временного положения равновесия. На рис. 5 показаны некоторый ион (катион) в растворе, молекула воды 1^* ближайшего окружения иона, молекула воды 2, не входящая в область ближайшего окружения иона. Здесь же приводится кривая 4 изменения потенциальной энергии U молекулы воды 1 в зависимости от расстояния r этой молекулы от иона 3. Молекула 1 у иона ориентирована в соответствии с зарядом этого иона **. Как известно, положение равновесия какой-либо частицы около другой соответствует минимуму энергии. Молекула 1 имеет минимум энергии в положении равновесия у иона (левый минимум, см. рис. 5). В рас-

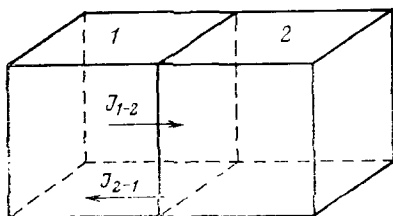
* Здесь и далее условно будем изображать молекулу воды в виде сферы, имеющей электроотрицательную и электроположительную стороны, которые соответствуют отрицательному и положительному (Н—Н) ребрам тетраэдра (см. рис. 4).

** В равной степени можно было взять и анион, тогда молекула 1 была бы ориентирована к иону своей электроположительной стороной.



← Рис. 5. Схема взаимодействия иона с молекулой воды ближайшего окружения

Рис. 6. Схема трансляционных потоков частиц 1



творе удаление одной частицы (молекулы 1) от данного иона означает в то же время приближение ее к другой частице (молекуле воды 2). Положению равновесия молекулы воды 1 у молекулы воды 2 соответствует второй минимум (правый) на кривой потенциальной энергии молекулы 1. Максимум энергии между минимумами, соответствующими положениям равновесия молекулы 1, называется *потенциальным барьером* E . На величину потенциального барьера данной молекулы оказывают влияние другие молекулы воды и ионы (в том числе входящие в кристаллическую решетку поверхности минералов). В соответствии с представлениями о тепловом движении частиц в жидкостях, развитыми Я. И. Френкелем еще в 1945 г., переход молекулы воды из временного положения равновесия около иона в другое происходит, если она обладает энергией большей или равной E . Последняя характеризует прочность связи молекулы воды с ионом. Чем больше E , тем труднее разрывается связь и меньше подвижность этого иона в водном растворе.

О. Я. Самойлов и Д. С. Соколов [32] рассмотрели влияние величины E на концентрацию ионов. На рис. 6 изображены два элементарных объема 1 и 2, отличающиеся условиями трансляционного движения рассматриваемых ионов. Существуют два потока ионов — $I_{1 \rightarrow 2}$ (из участка 1 в участок 2) и встречный поток $I_{2 \rightarrow 1}$. Потоки ионов пропорциональны их числу (концентрациям ионов) * в участках 1 и 2 (c_1 и c_2), а также средним числам активированных (трансляционных) скачков, совершаемых каждым ионом в тех же участках (j_1 и j_2). Следовательно, $I_{1 \rightarrow 2} = 1/6 k c_1 j_1$, $I_{2 \rightarrow 1} = 1/6 k c_2 j_2$, где k — коэффициент пропорциональности. Стремление раствора к равновесному состоянию приводит к тому, что $I_{1 \rightarrow 2} \approx I_{2 \rightarrow 1}$, т. е. процесс асимптотически стремится к выравниванию встречных потоков частиц. Следовательно,

$$c_1 j_1 = c_2 j_2. \quad (26)$$

* Рассматривая процессы на молекулярном уровне, под термином «концентрация» удобнее понимать число частиц в объеме или сечении.

Легко показать, что для цепочки участков 1, 2, 3, 4, ..., n открытой термодинамической системы равновесие характеризуется равенством $c_1 j_1 = c_2 j_2 = c_3 j_3 = c_4 j_4 = \dots = c_n j_n$. В то же время равновесный поток частиц i из любого участка будет

$$I_i = k c_i j_i, \quad (27)$$

где k — коэффициент пропорциональности (включающий числовой множитель $1/6$); c_i , j_i — концентрация и подвижность частиц i в данном участке.

В соответствии с (26) концентрация рассматриваемых ионов c_i в двух граничащих участках раствора, отличающихся своими параметрами, будет обратно пропорциональна средним числам активированных скачков (подвижности) этих ионов j_i^* . Величина j находится в зависимости от параметров, определяющих состояние раствора (близость поверхности твердой фазы, минерализация воды, температура, давление и т. д.)**.

Итак, при изучении миграции какого-либо компонента раствора необходимо установить характер связи между j для частиц данного компонента и параметрами, определяющими состояние подземного раствора.

В соответствии с законом Аррениуса

$$j = j_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right), \quad (28)$$

где j_0 — предэкспоненциальный коэффициент подвижности, связанный с частотой колебания частицы около временного положения равновесия в растворе; E — энергия активации или потенциального барьера; R — газовая постоянная; T — температура по Кельвину.

Рассмотрим, как влияет интенсивность гидратации, характеризваемая величиной E , на концентрацию данных частиц в растворе. Подставим в равенство (26) выражение (28)

$$c_1 j_0 \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right) = c_2 j_0 \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right);$$

$$c_1 = c_2 \exp\left(\frac{E_1 - E_2}{RT}\right). \quad (29)$$

Если в участке 2 относительно преобладает процесс обезвоживания, а в участке 1 более оводняющие условия, то $E_1 > E_2$, отсюда $E_1 - E_2 > 0$ и в соответствии с (29) $c_1 > c_2$. Следовательно, в участках с оводняющими для данных частиц условиями наблюдается увеличение концентрации этих частиц. В таких участках они обладают меньшей подвижностью (подставив $c_1 > c_2$ в формулу (26), получим $j_2 > j_1$) и сюда перемещаются частицы из

* Можно провести с известными оговорками аналогию между величиной подвижности и феноменологическим коэффициентом активности.

** Отметим, что $j = 1/\tau$, где τ — время пребывания данной частицы во временном положении равновесия около другой частицы.

участков с менее оводняющими (обезвоживающими) условиями, т. е. перемещаются из участка 2 в участок 1.

Все сказанное в равной мере относится и к молекулам неэлектролитов (например, к молекулам органических веществ), только механизм взаимодействия у них с водой несколько иной. Как показал О. Я. Самойлов [34], молекулы неэлектролитов обладают гидратацией второго рода. С ними связан так называемый «эффект препятствия»: они заполняют пустоты в ажурной структуре водных растворов и представляют препятствие для активированных перемещений молекул воды. Последние задерживаются у молекул неэлектролитов и в свою очередь препятствуют им совершать трансляционные перемещения. В результате уменьшается величина j и тех и других, что равносильно усилению гидратации. Одним из интересных следствий этого процесса является падение подвижности и ионов в присутствии неэлектролитов, что ведет к их оводнению и накоплению.

МИКРОЗОНАЛЬНОСТЬ ПОРОВОГО ПРОСТРАНСТВА ВОДОНОСНЫХ ПОРОД В СООТВЕТСТВИИ С ОСОБЕННОСТЯМИ ТЕПЛОВОГО ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦ РАСТВОРА

Частицы природного водного раствора, подземных вод, включая частицы загрязнителей, находятся в большей или меньшей степени под влиянием воздействия поверхности твердой фазы, водонасыщающих пород. Практически все исследователи признают существование пристеночного эффекта, т. е. вода и растворенные в ней вещества вблизи поверхности пород находятся в особом состоянии. Используется термин *связанная* вода, который отражает взаимодействие воды с горной породой. Известно, что связанная вода удерживается на поверхности частиц давлением от $3 \cdot 10^4$ до 10^5 Па; ее плотность значительно превышает 1; она обладает большой вязкостью и замерзает при температуре значительно ниже нуля (-78°C). Особенно большое значение имеет связанная вода в тонкодисперсных песчано-глинистых породах. Однако по вопросу о границах воздействия пристеночного эффекта единого мнения нет. Более того, Л. И. Кульчицкий [21] указывает, что нет четкого представления о разграничении воды глин и свободной воды. Торможение в потоке вязкой жидкости — воды — передается слой за слоем в участки, весьма удаленные от твердой поверхности. Г. П. Алексеенко с соавторами [35] понимают под связанной водой слой воды с измененными свойствами, активно взаимодействующий с адсорбционными центрами поверхности глинистых пород. Есть и другие определения. В этом разнообразии точек зрения проявляется крайне сложное воздействие, которое оказывает твердая фаза — порода на находящуюся с ней в контакте воду. Есть силы, которые проявляются лишь на расстоянии от твердой фазы, измеряемом нанометрами, но есть силы

взаимодействия воды и породы, проявляющиеся на макрорасстояниях. Миграция вещества в подземных водах находится в тесной зависимости от этих сил. Поэтому рассмотрим подробнее, в каком состоянии находятся вода в породах и частицы растворенных в ней веществ.

В песчано-глинистых водовмещающих породах на поверхность глинистых частиц приходится значительная доля всей поверхности раздела между жидкой и твердой фазами. В связи с этим важно учесть структуру и поверхностные свойства глинистых минералов. Поверхность водовмещающих пород характеризуется наличием центров адсорбции [21, 35], в качестве которых выступают координационно-ненасыщенные атомы кремния и алюминия, связывающие воду по донорно-акцепторному механизму, и вода становится адсорбированной. Энергия этой связи составляет 95—105 кДж/моль (энергия связи двух молекул воды в «чистой» воде равна 17,92 кДж/моль [33]). На поверхности, особенно глинистых частиц, адсорбируются обменные катионы, которые превращаются по отношению к воде в центры адсорбции второго типа (например в монтмориллонитах). Третьим типом являются уже адсорбированные по координационному механизму молекулы воды («гроздевидная адсорбция») или ОН-группы поверхности минералов. Все три удерживают адсорбционно-связанную (прочносвязанную и гигроскопическую) воду. Это внутренняя часть двойного электрического слоя (ДЭС), слой Гельмгольца. Прочносвязанная вода глинистых минералов энергетически неоднородна. Наиболее прочную связь имеет вода углов и сколов поверхности кристаллической решетки; энергетически слабее связь воды ближней гидратации ионов (преимущественно катионов), образованной в результате электростатических (ион-дипольных) сил, возникающих между ними и молекулами воды. Наконец, наименее прочно связана вода базальных граней глинистых минералов, имеющая водородные связи со структурными группами ОН и О их поверхности. В неглинистых — она более однородна, это, в основном, вода, адсорбированная на углах и сколах кристаллов. По Ю. И. Тарасевичу и Ф. Д. Овчаренко, структура прочносвязанной воды характеризуется образованием аквакомплексов типа $[\text{Ca}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ и $[\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_6]^+$. Следует отметить, что прочносвязанная вода может полностью заполнить межслоевые пространства глинистых минералов и вызвать их набухание. Несмотря на высокий энергетический уровень связи, молекулы прочносвязанной воды обладают трансляционной подвижностью, хотя и резко замедленной по сравнению со свободной водой. В результате трансляционного обмена в зону прочносвязанной воды, кроме ионов, могут проникать и молекулы неэлектролитов (молекулы органических веществ) и, будучи связанными гидратацией второго рода, могут накапливаться. Указанные процессы имеют большое значение при изучении миграции загрязнителей в водоносных пластах.

Наконец, отметим, что слой прочносвязанной воды по результатам измерения диэлектрической проницаемости может достигать толщины приблизительно до 2 нм, что соответствует примерно 8 молекулярным диаметрам воды (0,27 нм) [21]. При большей толщине наступает достаточно резкое возрастание диэлектрической проницаемости, что указывает на уменьшение структурированности воды и увеличение ее подвижности.

Более удаленный от поверхности твердой фазы слой воды (рыхлосвязанная, пленочная или осмотическая вода) имеет меньший уровень энергетической связи, чем прочносвязанная вода, и удерживается поверхностными силами, а также силами внутренних слоев связанной воды. Притяжение молекул рыхлосвязанной воды внутренними (находящимися ближе к породе) слоями воды имеет большое значение. Оно расширяет сферу действия «грозедевидной адсорбции». Структура воды ослабляется, так как сильное ион-дипольное взаимодействие в слое прочносвязанной воды постепенно уступает в рыхлосвязанной воде более слабому диполь-дипольному взаимодействию.

Рыхлосвязанная вода характеризуется большей трансляционной (диффузионной) подвижностью молекул воды и обменных катионов (это внешняя часть двойного электрического слоя, диффузный слой или слой Гюи). Важно отметить, что между рыхлосвязанной водой и другими формами связанной воды существует активный обмен ионов и молекул воды, на что указывают А. В. Краснушкин и И. В. Язынина [38]. Среднее количество активированных скачков диссоциированных обменных катионов глинистых минералов в направлении к глинистой частице будет больше, чем в обратном направлении [21]. Если воспользоваться формулой (26) и считать, что c_1 и j_1 — концентрация и подвижность (количество активированных скачков) частиц в прочносвязанной воде, а c_2 и j_2 — в рыхлосвязанной, то $j_2 > j_1$ и $c_1 > c_2$. Последнее неравенство характеризует падение концентрации ионов в слое рыхлосвязанной воды по сравнению с прочносвязанной. Таким образом, в результате понижения уровня энергии связи в рыхлосвязанной воде и роста подвижности всех частиц ослабляется гидратация не только частиц электролитов, но и неэлектролитов. Отсюда следует, что и эти вещества будут накапливаться в рыхлосвязанной воде в меньшей степени, чем в прочносвязанной. Важно отметить, что рыхлосвязанная вода в глинистых минералах образуется не только внутри более или менее крупных пор, но и в межпакетных пространствах. С помощью рентгеновского анализа обнаружен факт набухания монтмориллонита вплоть до образования двойного электрического слоя на поверхности каждого элементарного слоя с разделением их друг от друга на расстояние порядка 10 нм. В связи с этим выделяются две стадии набухания монтмориллонита: кристаллическая и осмотическая. Кристаллическая стадия (за счет прочносвязанной воды) продолжается до увеличения межбазисного расстояния приблизи-

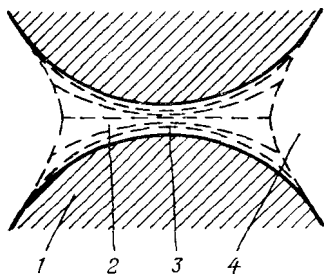


Рис. 7. Микроструктура песчано-глинистой породы на стыке частиц скелета.

1 — пылеватая или песчаная частица; участок коагуляционной структуры глины с межпакетным расстоянием; 2 — максимальным ($d_{001} \approx 10$ нм), 3 — минимальным ($d_{001} < 2$ нм); 4 — открытая макропора

тельно до 2,2 нм, осмотическая стадия (за счет рыхлосвязанной воды) — до 10 нм. Последнюю величину, согласно Л. И. Кульчицкому, можно принять за среднюю толщину двойного электрического слоя.

Было бы неправильным сделать вывод из всего вышесказанного, что прочносвязанная вода заполняет лишь ультрамикроскопические поры с радиусом менее 2 нм, а рыхлосвязанная — поры с радиусом менее 10 нм. Важно учесть процесс диссоциации глинистых минералов, в результате которого отдельные глинистые частицы переходят в раствор в виде коллоидных мицелл, окруженных двойным электрическим слоем. Вследствие коагуляции отдельные глинистые частицы в водонасыщенном состоянии отделены друг от друга более или менее толстыми по сравнению с молекулярными размерами прослойками воды [21]. Очевидно, в порах песчано-глинистых пород может возникать коагуляционная структура. Поэтому сравнительно крупные поры (до 0,1 мм) между песчаными и пылеватыми частицами могут быть частично или полностью заполнены коагулятом — сложной системой, для которой характерно чередование глинистых частиц и расклинивающих слоев связанной воды. Таким образом, макропоры оказываются частично или полностью заполненными прочно- и рыхлосвязанной водой. Кроме того, в стыках жестких песчанистых или пылеватых частиц, где давление вышележащих пород передается в большей степени, могут быть глинистые частицы, а рыхлосвязанная вода между ними может частично или полностью отсутствовать. Следует ожидать, что в сторону центра макропоры (рис. 7) межпакетные расстояния между глинистыми частицами должны увеличиваться (до 10 нм), а в сторону стыка эти расстояния должны уменьшаться до 1—2 молекулярных слоев воды (в зависимости от влагонасыщенности).

В крупных порах внешние по отношению к поверхности породы слои воды постепенно переходят в свободную (гравитационную) воду, которая весьма слабо, но испытывает влияние сил взаимодействия. Их эффект усиливается действием вязкого (ньютоновского) течения, в результате чего эпюра распределения скоростей в идеальной трубчатой поре при ламинарном

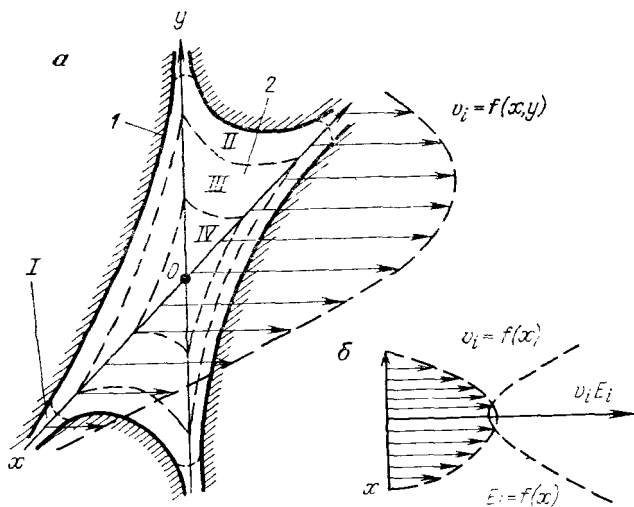


Рис. 8. Схема (модель) усредненного порового пространства (а) и эпюры распределения скорости движения и энергии связи частицы (б).

1 — поверхность твердой фазы; 2 — поровое пространство (зоны I—IV)

режиме течения представляет собою параболу* [41]. От центра к стенкам трубы скорость воды падает. В этом проявляется взаимодействие практически всех слоев потока со стенками трубы, т. е. поток всегда в большей или меньшей степени испытывает тормозящее влияние твердой поверхности. Тем более, это тормозящее влияние проявляется в порах водоносных пород, каковы бы ни были их размеры.

Таким образом, в соответствии с дифференциацией состояния молекул воды и частиц растворенных веществ существует микрозональность порового пространства водовмещающих пород (рис. 8, а зоны I, II, III, IV).

1. Внутренняя зона. Здесь межпакетные пространства глинистых минералов заполнены 1—2 слоями молекул прочно-связанной воды, а также частицами растворенных веществ (электролитов и неэлектролитов). Пристеночный эффект действует с двух сторон и перекрывается (рис. 9, а; см. рис. 8, а). Это зона наиболее структурированной жидкости и наибольшего энергетического уровня связи с твердой фазой.

Из формулы (27) с учетом (28) следует

$$c_i = \frac{I_i}{k j_0} \exp \frac{E_i}{RT}. \quad (30)$$

* Имеется в виду параболическое распределение среднестатистических скоростей частиц по линиям тока. Рассматривая процесс на молекулярном уровне, логично понимать под скоростью в данной линии тока среднюю скорость поступательного перемещения частиц, условно относимых к этой линии. В любой линии тока часть частиц может двигаться и с очень большой, и с очень малой скоростями.

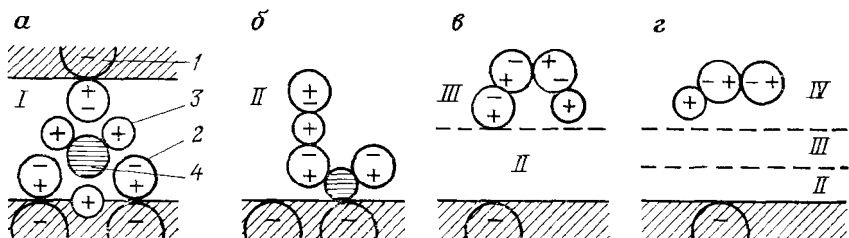


Рис. 9. Схема структурных взаимоотношений в поровом пространстве.

1 — адсорбционный центр породы (кислород кремнекислородных тетраэдров или гидроксильная группа); 2 — молекула воды; 3 — катион; 4 — молекула неэлектролита; I, II, III, IV — зоны порового пространства

Величина E_i в I зоне приближается к максимально возможной в данной системе и, следовательно,

$$\frac{I_i}{k j_0} = \text{const}; \quad c_i^I \rightarrow c_{i \max}; \quad j_i^I \rightarrow j_{i \min}.$$

II. Зона активной адсорбции (слой Гельмгольца). Это слой прочносвязанной воды, пристеночный эффект здесь действует только с одной стороны (см. рис. 8, а; 9, б). Для этой зоны характерны молекулы воды, непосредственно не связанные с твердой фазой, но достаточно строго ею ориентированные. Зона менее структурирована и $E_i^{II} < E_i^I$. Система стремится к термодинамическому равновесию: $I_i^I = I_i^{II} = I_i^{III} = \dots = I_i = \text{const}$. Следовательно, учитывая (30) и (27), имеем

$$c_i^{II} < c_i^I; \quad j_i^{II} > j_i^I.$$

III. Переходная зона (диффузный слой, слой Гюи). Это рыхлосвязанная вода (см. рис. 8, а; 9, в), энергетический уровень связи испытывает дальнейшее падение: $E_i^{III} < E_i^{II}$, следовательно,

$$c_i^{III} < c_i^{II}; \quad j_i^{III} > j_i^{II}.$$

IV. Зона свободной воды. Здесь влияние твердой фазы проявляется практически лишь в некотором торможении потока. Молекулы воды чаще всего ориентированы как угодно (см. рис. 8, а; 9, г). Энергетический уровень связи стремится к минимуму:

$$E_i^{IV} < E_i^{III}; \quad E_i^{IV} \rightarrow E_{\min}; \quad c_i^{IV} \rightarrow c_{i \min}; \quad j_i^{IV} \rightarrow j_{i \max}.$$

Получаем общую закономерность для частиц воды и частиц растворенных веществ:

$$c_i^{IV} < c_i^{III} < c_i^{II} < c_i^I$$

и

$$j_i^{IV} > j_i^{III} > j_i^{II} > j_i^I. \quad (31)$$

Таким образом, *термодинамическое равновесие в поровом пространстве характеризуется резким увеличением концентрации частиц по мере приближения к поверхности твердой фазы.* Этот перепад концентрации связан с соответствующим ростом энергии связи E_i по направлению к твердой фазе. Для частиц воды рост концентрации означает рост плотности и соответствующее увеличение вязкости.

ОСНОВНЫЕ РАСЧЕТНЫЕ ФОРМУЛЫ МИГРАЦИИ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ В ПОДЗЕМНЫХ ВОДАХ С ПОЗИЦИЙ МОЛЕКУЛЯРНО-КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

В настоящее время общепринята диффузионно-конвективная теория миграции вещества в подземных водах [43 и др.] и соответствующие ей математические модели, основанные на балансе мигрирующего вещества. Важным достоинством этой теории является создание методологического аппарата исследований процесса массопереноса, на базе которого возможно практическое прогнозирование загрязнения или очистки подземных вод в естественных и искусственных условиях. Вместе с тем, обнаруживаются и определенные недостатки указанного подхода: 1) упрощенно учитывается физическая сущность сорбции. Сорбируемое вещество ассоциируется с твердой фазой (порода), а под сорбцией понимается удаление растворенного вещества из жидкой фазы и из порового пространства; 2) упрощенно понимается процесс диффузии и в математических моделях вместо химического потенциала μ в расчетах участвуют концентрации вещества в жидкой фазе C и в твердой фазе N . Остановимся подробнее на этом допущении.

Ж. Фрид [43], признавая, что молекулярная диффузия возникает при наличии градиента химического потенциала, считает возможным заменить его концентрацией вещества. Можно согласиться с такой заменой лишь в случае физически гомогенной (однородной) системы и для весьма разбавленных растворов, близких к идеальным. В реальных смесях необходимо вместо концентраций компонентов брать их активности a_i :

$$a_i = \gamma_i C_i,$$

где γ_i — коэффициент активности i -го компонента в данной точке системы. В этой связи Т. Эрдеи-Груз [42] указывает, что в реальных системах направление градиента активности компонента может не совпадать с направлением градиента его концентрации и компонент диффундирует из областей с более низкой концентрацией в области с более высокой концентрацией, что часто происходит в гетерогенных системах при диффузии через границу раздела двух фаз, так как требованием равновесия фаз, содержащих данное вещество, является равенство его активности в этих фазах. В этом состоит явное различие между процессами диффузии и переноса тепла, хотя они очень близки

в феноменологическом отношении. При диффузии концентрации обычно различаются с обеих сторон поверхности раздела даже при достижении равновесного состояния. Условием диффузионного равновесия является равенство химических потенциалов в каждой точке системы, и равным химическим потенциалам в разных фазах могут соответствовать значительно различающиеся концентрации.

Таким образом, математическая модель, основанная на балансе вещества на базе концентраций без учета активностей, может привести к значительным искажениям. Однако расчет активностей внутри микропор на молекулярном уровне представляет большие теоретические и практические трудности. Вместе с тем активность частиц, очевидно, коррелирует с произведением $c_j i_j$. Величина же тепловой подвижности j_i является параметром энергетического состояния частицы в данной точке термодинамической системы. Можно попытаться математически описать процесс миграции вещества, используя баланс энергии частиц в различных точках системы. Математическая модель в этом случае должна по возможности удовлетворять следующим требованиям: 1) отражать физическую сущность взаимодействия частиц загрязняющих компонентов с водовмещающими породами; 2) учитывать баланс энергии частиц в различных точках порового пространства; 3) учитывать многофазный характер термодинамической системы подземная вода — порода и всю сложность границы перехода от жидкости к твердой фазе; 4) учитывать динамику потока воды в поровом пространстве; 5) отражать физическую кинетику процесса миграции загрязняющих компонентов в подземных водах; 6) давать возможность практического ее использования для расчетов параметров миграции загрязняющих компонентов в подземных водах и составления прогнозов.

Полный учет всех требований практически невозможен, однако можно наметить следующие пути приближения к точной модели с позиций молекулярной кинетики.

Особенности процесса миграции загрязнителей в подземных водах

Описанная выше физическая сущность взаимодействия частиц относится и к загрязняющим веществам. Адсорбированные частицы загрязняющих компонентов, так же как и воды, не могут отождествляться с твердой фазой, они сохраняют трансляционную подвижность и могут быть отнесены к жидкой фазе, хотя и весьма специфичной.

Каждая из рассмотренных выше термодинамических зон по существу является самостоятельной фазой, так как характеризуется особым, только ей свойственным состоянием. Это утверждение остается верным, несмотря на очень плавный переход между некоторыми зонами. Термодинамическое равновесие в по-

рах является динамичным, т. е. характеризуется постоянным переходом частиц из одной зоны в другую. Следовательно, можно утверждать, что энергия, подвижность и концентрация частиц являются во всем объеме порового пространства непрерывными функциями.

Наиболее трудной является проблема учета сложности границы перехода от жидкости к твердой фазе. Поровое пространство в породе характеризуется чрезвычайным разнообразием пор как по размерам, так и по форме. На рис. 8, а показано поровое пространство песчано-глинистой породы в виде сечения схематической модели. Она усредненно характеризует границу между поровым пространством и твердой фазой. Начало координат O расположено в центре фигуры в наибольшем удалении от поверхности породы. В зернистых песчано-глинистых породах имеется набор частиц от самых крупных, обычно наиболее округлых, до самых мелких пластинчатых глинистых частиц. Соответственно поры могут быть более или менее округлой формы между крупными песчанистыми частицами и щелевидной формы между глинистыми частицами. На рис. 8, а обобщающая поверхность твердой фазы изображена в виде кривых линий, округлых в центральной части модели и все более спрямленных по мере удаления от центра. Таким образом, центр модели как бы соответствует усредненному центру наиболее крупных пор (IV зона). По мере удаления от нулевой точки по осям x и y последовательно попадаем в III, II и, наконец в I зону, соответствующую межпакетным пространствам глинистых частиц.

Представим, что поток направлен перпендикулярно к плоскости сечения (см. рис. 8, а). Максимальная скорость движения воды наблюдается в центре символической поры, где энергия связи минимальна, а минимальная скорость — на границе с твердой фазой, где связь с ней наиболее прочная. На рис. 8, б изображена эпюра скорости потока в сечении согласно гидродинамике [41]. Она совмещена с кривой изменения энергии связи E_s . Отметим, что так как перепад энергии связи от минимума в центре до максимума на границе пор с породой характерен для любых частиц, то и эпюры скоростей для различных частиц подзмемного раствора будут аналогичны друг другу.

В поровое пространство вместе с водой поступает в растворенном виде загрязняющее вещество, частицы которого практически мгновенно распределяются в соответствии с микроэнергетической зональностью. На очень быстрое межзональное перемещение молекул H_2O указывают А. В. Краснушкин и И. В. Язынина. Очевидно, что и другие частицы также быстро совершают межзональные перемещения. Этому способствуют большой перепад энергии связи и малые расстояния от центра пор к поверхности твердой фазы. Устанавливается термодинамическое равновесие. Гидродинамический поток стремится нарушить это равновесие. Вдоль потока частицы перемещаются

с различной скоростью в зависимости от своего положения относительно твердой фазы, т. е. наблюдается так называемая механическая дисперсия (см. рис. 8). В зоне свободной воды частицы загрязнителя перемещаются быстрее и обгоняют частицы,двигающиеся в III и других зонах. Термодинамическое равновесие устанавливается в каждой точке вдоль потока. Частицы растворенных веществ, двигаясь с потоком, взаимодействуют с твердой фазой и испытывают тем самым торможение. Оно для ионов более эффективно, чем для дипольных молекул воды. В этом торможении, очевидно, и будет заключаться сорбция в динамических условиях.

Математическая модель процесса миграции загрязнителей в подземных водах

Рассмотрим вывод основных расчетных формул миграции загрязнителей в подземных водах с позиций молекулярно-кинетической теории для процесса сорбции (массообмен I типа) или, другими словами, задержки веществ из раствора при его фильтрации через породу. Ограничим рассмотрение условиями квазистационарной одномерной фильтрации. В некотором сечении (входном) водоносного пласта поступают частицы сорта i , обеспечивая в данном сечении постоянную во времени концентрацию $C_i^0 = \text{const}$. Далее частицы i перемещаются потоком на расстояние l , где находится сечение (выходное), в котором измеряется концентрация C_i ; в начальный момент времени $t=0$ и $C_i=0$, затем $t \rightarrow \infty$, а $C_i \rightarrow C_i^0$.

При движении частиц i вместе с конвективным потоком их полная энергия E распределяется на энергию преодоления сил связи с твердой фазой E_i (работу преодоления потенциального барьера) и кинетическую энергию E_k поступательного перемещения рассматриваемых частиц вместе с потоком:

$$E = E_i + E_k = \text{const}. \quad (32)$$

Важно отметить, что в различных точках в зависимости от их расстояния от поверхности твердой фазы в поровом пространстве происходит перераспределение величин E_i и E_k . Так, к поверхности твердой фазы $E_i \rightarrow E$ и $E_k \rightarrow 0$, а к центру поры $E_k \rightarrow E$ и $E_i \rightarrow 0$. Кинетическая энергия частиц i , двигающихся со скоростью v_i , будет равна

$$E_k = \frac{M v_i^2}{2}. \quad (33)$$

Отметим, что простые частицы i (катионы металлов, анионы и др.) мигрируют в более или менее сложной комплексной форме (аквакомплексы, металлоорганические комплексы

и т.п.). Поэтому уместно ввести коэффициент гидродинамической активности массы λ

$$M = \lambda m, \quad (34)$$

где m — масса простой частицы i ; M — масса комплекса, в который входит данная частица i .

Коэффициент λ является комплексным обобщающим параметром и зависит от химического состава воды, свойств водовмещающих пород и порового пространства, скорости потока и других факторов и всегда больше 1.

В соответствии с (30), используя значения энергии связи E_i из (32) и кинетической энергии из (33), имеем

$$c_i = \frac{I_i}{k j_0} \exp \left(-\frac{E - \frac{M v_i^2}{2}}{RT} \right) = \frac{I_i}{k j_0} \exp \frac{E}{RT} \exp \frac{-M v_i^2}{2RT}, \quad (35)$$

где c_i — концентрация частиц i в элементарном объеме, принадлежащем выходному сечению; v_i — скорость перемещения частиц i на расстояние l .

Для удобства вывода формул введем обозначения

$$A = \frac{I_i}{k j_0} \exp \frac{E}{RT}; \quad (36)$$

$$z_i = v_i \sqrt{\frac{M}{2RT}}. \quad (37)$$

Тогда формула (35) получит вид

$$c_i = A \exp(-z_i^2). \quad (38)$$

Выражения (35) и (38) справедливы для движения отдельных материальных точек потока подземной воды через поровое пространство. Концентрация во всем потоке (в целом по сечению) может быть получена с помощью интегральной функции

$$C_i = \int_{-\infty}^{v_i \sqrt{\frac{M}{2RT}}} c_i dz_i = A \int_{-\infty}^{v_i \sqrt{\frac{M}{2RT}}} \exp(-z_i^2) dz_i. \quad (39)$$

Если на расстоянии $l = \text{const}$ от источника поступления частиц i в подземную воду наблюдать за их накоплением в потоке, то с ростом времени t в наблюдаемом сечении накапли-

* Исходя из теории вероятностей, можно представить c_i как вероятность нахождения частиц i в данной точке сечения порового пространства (плотность вероятности), а C_i — вероятность нахождения тех же частиц по всему сечению (полная вероятность). Тогда (39) соответствует нахождению полной вероятности явления интегрированием по плотности вероятности.

ваются частицы от самых быстрых (имеющих максимум кинетической энергии) до самых медленных. Следовательно, при $v_i = l/t$, если $l = \text{const}$, $t \rightarrow \infty$, то $v_i \rightarrow 0$ и $v_i \sqrt{\frac{M}{2RT}} \rightarrow 0$. Из (39) получим

$$C_i = -A \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{v_i \sqrt{\frac{M}{2RT}}}^{\infty} \exp(-z_i^2) dz_i.$$

Учитывая, что $(2/\sqrt{\pi}) \int_{v_i \sqrt{\frac{M}{2RT}}}^{\infty} \exp(-z_i^2) dz_i = \text{erfc}\left(v_i \sqrt{\frac{M}{2RT}}\right)$

(erfc — обозначение стандартной табулированной функции), перепишем полученное выражение

$$C_i = -A \frac{\sqrt{\pi}}{2} \text{erfc}\left(v_i \sqrt{\frac{M}{2RT}}\right). \quad (40)$$

Это выражение в принципе справедливо для любого сечения потока.

Для входного сечения $C_i = C_i^0$ и $l = 0$ (граничные условия). Здесь для момента времени $t > 0$ $v_i = 0$. Для любого сечения на расстоянии $l > 0$ от входного в момент времени $t = 0$ и $C_i = 0$ (начальные условия), в этот момент $v_i = \infty$ *.

Используя формулу (40), определяем концентрацию во входном сечении:

$$C_i^0 = -A \frac{\sqrt{\pi}}{2} \text{erfc}(0) = -A \frac{\sqrt{\pi}}{2}. \quad (41)$$

Для практических расчетов и прогнозирования удобно ввести относительную концентрацию \bar{C}_i , которую получим из (40) и (41):

$$\bar{C}_i = \frac{C_i}{C_i^0} = \text{erfc}\left(v_i \sqrt{\frac{M}{2RT}}\right). \quad (42)$$

Упростим полученное выражение

$$\mu_i = \sqrt{\frac{M}{2RT}}; \quad \bar{C}_i = \text{erfc}(\mu_i v_i). \quad (43)$$

Выражения (42), (43) являются математической моделью миграции загрязнителя (частиц i) в потоке подземных вод для

* Естественно, что реальные частицы не могут двигаться с бесконечной скоростью, а выражение $v_i = \infty$ является математической абстракцией, вытекающей из начальных условий.

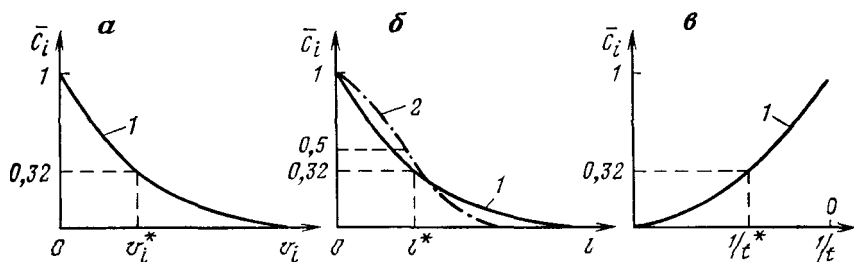


Рис. 10. Индикаторные кривые массообмена I типа (сорбции).

Индикаторные кривые в соответствии: 1 — с молекулярно-кинетической моделью; 2 — с диффузионно-конвективной моделью. Параметр $1/t$ уменьшается по направлению оси абсцисс

массообмена I типа. Формулу (43) легко преобразовать, учитывая, что $v_i = l/t$:

$$\bar{C}_i = \operatorname{erfc}\left(\frac{\mu_i}{t} l_i\right) \quad \text{при} \quad t = \text{const}, \quad (44)$$

$$\bar{C}_i = \operatorname{erfc}\left(\mu_i l \frac{1}{t_i}\right) \quad \text{при} \quad l = \text{const}. \quad (45)$$

Таким образом, мы пришли к сравнительно простой однопараметрической модели. Однако следует учитывать, что μ_i является обобщенным параметром (34) и (43); он зависит от химического состава воды, свойств водовмещающих пород и порового пространства, скорости потока, температуры и других факторов. Полученные выражения (44) и (45) следует рассматривать как базовые, которые можно использовать для практических расчетов в сравнительно простых условиях одномерной квазистационарной фильтрации при постоянстве C_i^0 и μ_i . В дальнейшем можно перейти к моделям с переменными C_i^0 и μ_i и к условиям нестационарной, многомерной фильтрации.

Графическим выражением математической модели процесса массопереноса являются индикаторные кривые (рис. 10), т. е. кривые $\bar{C}_i = f(v_i)$, $\bar{C}_i = f(l_i)$ и $\bar{C}_i = f(1/t_i)$, соответствующие выражениям (42), (44) и (45).

Представим, что во входное сечение поступает компонент i , а в выходном сечении на расстоянии l от первого измеряется его относительная концентрация. К выходному сечению частицы будут подходить пропорционально скорости v_i . Их суммарная концентрация сначала мала, но со временем она стремится в пределе к единице: $\bar{C}_i \rightarrow 1$ при $v_i \rightarrow 0$ (см. рис. 10, а). Если в определенный момент времени $t > 0$ измерить концентрацию \bar{C}_i в ряде сечений, отстоящих от входного на расстояниях $l_1, l_2, l_3, \dots, l_n$, получим кривую (см. рис. 10, б) $\bar{C}_i = f(l)$.

Наконец, если на заданном расстоянии l в течение времени t измерять концентрацию \bar{C}_i , то получим кривую (см. рис. 10, в) $\bar{C}_i = f(1/t)$, аргумент функции $1/t$ для удобства отсчета уменьшается слева направо.

Основные параметры молекулярно-кинетической модели массопереноса

Таким образом, в соответствии с молекулярно-кинетической моделью, так же как и в соответствии с диффузионно-конвективной моделью, процесс миграции вещества описывается дополнительной функцией Лапласа

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x).$$

Однако в отличие от диффузионно-конвективной модели, использующей *полную* функцию $\bar{C}_i = 0,5 \operatorname{erfc} \xi$ ($-\infty < \xi < +\infty$) [4, 41 и др.), молекулярно-кинетическая модель базируется на полуограниченной функции $\bar{C}_i = \operatorname{erfc}(\mu_i v_i)$, так как во всех случаях $v_i > 0$ и $0 < \mu_i v_i < +\infty$ (см. рис. 10).

Важным положением молекулярно-кинетической концепции процесса миграции различных компонентов в фильтрационном потоке является тот факт, что макродисперсия любого компонента водного раствора во времени и по расстоянию определяется дисперсией скорости поступательного движения частиц v_i в поперечном разрезе водопроводящих пор. В этой связи следует определить понятие феноменологической скорости любого компонента потока, включая молекулы воды. Логично понимать под феноменологической скоростью *среднеквадратичную* скорость поступательного движения частиц данного компонента v_i^* . Это утверждение базируется на среднеэнергетическом представлении скорости, а, как известно, кинетическая энергия пропорциональна *квадрату* скорости.

Для нахождения v_i^* воспользуемся свойствами часто употребляемой в теории вероятностей функции

$$\bar{\Phi}(x) = (1/\sqrt{2\pi}) \int_0^x \exp(-z^2/2) dz,$$

которая связана с функцией $\operatorname{erf}(x)$ соотношением

$$\bar{\Phi}(x) = 0,5 \operatorname{erf}(x/\sqrt{2}).$$

Среднеквадратичное значение x в функции $\bar{\Phi}(x)$ равно $\sigma_x = 1$, при этом $\bar{\Phi}(1) = 0,3413$. Следовательно,

$$\bar{\Phi}(1) = \frac{1}{2} \operatorname{erf}(1/\sqrt{2}) \approx 0,34$$

и

$$\operatorname{erf}(1/\sqrt{2}) = 0,68; \quad \text{а} \quad \operatorname{erfc}(1/\sqrt{2}) = 0,32.$$

Таким образом, среднеквадратичному значению аргумента $(\mu_i v_i)^* = 1/\sqrt{2}$ в функции $\bar{C}_i = \text{erfc}(\mu_i v_i)$ соответствует значение

$$\bar{C}_i^* = \text{erfc}(1/\sqrt{2}) = 0,32. \quad (46)$$

Заметим, что среднеквадратичному значению $(\mu_i v_i)^*$ соответствуют при $\mu_i = \text{const}$ среднеквадратичное v_i^* :

$$(\mu_i v_i)^* = \mu_i v_i^*. \quad (47)$$

По экспериментальной кривой $\bar{C}_i = f(l)$ при фиксированном t (см. рис. 10, б) находят точку, соответствующую значению $\bar{C}_i \approx 0,32$, и на оси абсцисс получают значение l^* , а затем рассчитывают v_i^* :

$$v_i^* = l_i^*/t. \quad (48)$$

По экспериментальной кривой $\bar{C}_i = f(1/t)$ при фиксированном l (см. рис. 10, в) аналогичным способом находят величину $1/t^*$, а затем v_i^* :

$$v_i^* = l(1/t_i^*). \quad (49)$$

Подчеркнем, что каждый компонент, мигрирующий в подземных водах, так же как и частицы самой воды, в данных условиях имеют свою индивидуальную среднеквадратичную скорость v_i^* , которую уместно называть *эффективной скоростью*. Для самой воды эффективная скорость есть не что иное как действительная скорость фильтрации воды u , широко используемая в гидродинамике.

Допустив наличие различных эффективных (действительных) скоростей у различных компонентов раствора, необходимо решить важную теоретическую проблему. Либо считать скорость фильтрации v для всех частиц, составляющих фильтрующийся раствор, единой, тогда неизбежно возникает представление о том, что каждый компонент имеет свою эффективную пористость:

$$n_e := v/v_i^*. \quad (50)$$

А так как v_i^* существенно изменяется, то и n_e испытывает значительные колебания. Отсюда чисто *условный* характер понятия эффективная пористость. Либо считать практически единой пористость для всех компонентов раствора, тогда неизбежно приходим к различной скорости фильтрации для этих компонентов. В этом случае, учитывая, что скорость фильтрации определяется по закону Дарси ($v = kl$), приходим к возможности существования различных коэффициентов фильтрации для различных компонентов подземных вод.

подавляющее большинство исследователей используют условное понятие — эффективная пористость. Однако вполне

правомерным и физически оправданным является второй подход, допускающий вариацию коэффициентов фильтрации для разных компонентов и основанный на том, что основные процессы взаимодействия частиц раствора с твердой фазой, с ее адсорбционными центрами протекают в *едином поровом пространстве*, характеризуемом общей пористостью. В то же время каждый компонент раствора испытывает свое тормозящее влияние твердой фазы, т. е. имеет свой коэффициент фильтрации K_i ,

$$v_i^\Phi = K_i I, \quad (51)$$

где v_i^Φ — скорость фильтрации i -го компонента; K_i — коэффициент фильтрации i -го компонента. Величина напорного градиента I характеризует общий энергетический источник движения всех компонентов раствора. Можно принять величину K_i как обобщенный параметр миграции i -го компонента в данной породе при данном исходном химическом составе воды. Более того, можно применить весь методологический аппарат исследований, разработанный на базе закона Дарси, для описания миграции компонентов в подземных водах и прогнозирования. Так, экспериментально определив и зная общую пористость n , можно определить K_i :

$$v_i^\Phi = v_i^* n, \quad (52)$$

$$K_i = v_i^\Phi / I. \quad (53)$$

Используя (46) и (47), можно записать $(\mu_i v_i)^* = \mu_i v_i^* = 1/\sqrt{2}$, а с учетом (51) и (52) будем иметь

$$\mu_i = \frac{1}{v_i^* \sqrt{2}} = \frac{n}{K_i I \sqrt{2}}. \quad (54)$$

Сравним теперь (54) со значением $\mu_i = \sqrt{M/2RT}$, тогда $\sqrt{M/2RT} = n/K_i I \sqrt{2}$. Это равенство вполне логично, если учесть, что с ростом I при данных K_i , n и T растет общий энергетический уровень потока. В этих условиях масса мигрирующих комплексных частиц будет уменьшаться, стремясь к массе m простых частиц по (34): $M \rightarrow m$, а $\lambda \rightarrow 1$.

Таким образом, основную модель сорбции можно теперь записать, используя (54) и (43),

$$\bar{C}_i = \operatorname{erfc} \left(\frac{n}{K_i I \sqrt{2}} v_i \right). \quad (55)$$

Особенности математической модели миграции загрязнителей в подземных водах для процесса десорбции

Представим теперь, что порода насыщена водой, соответствующей предельной концентрации сорбции C_i^0 ($\bar{C}_i = 1$), а во входное сечение в момент времени $t=0$ начинает поступать ра-

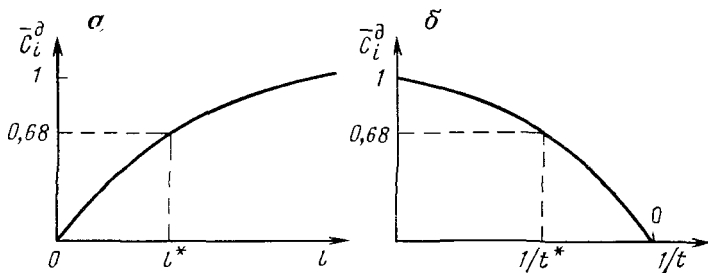


Рис. 11. Индикаторные кривые массообмена II типа (десорбции)

створ с концентрацией $C_i^d=0$. Тогда в рассматриваемом сечении, находящемся на расстоянии l от входного, в соответствии с ростом времени и уменьшением v_i будет происходить освобождение от частиц i . Суммарная концентрация в выходном сечении начнет падать, стремясь в пределе к нулю: $\bar{C}_i^d \rightarrow 0$ при $v_i \rightarrow 0$. Изменение концентрации, если нет необратимого поглощения, в рассматриваемом сечении будет происходить по тому же закону, что и для сорбции, но с отрицательным знаком, и относительная концентрация (по отношению к исходной) выразится

$$\bar{C}_i^d = \frac{C_i^0 - C_i}{C_i^0} = 1 - \frac{C_i}{C_i^0}.$$

Используя (43), получим математическую модель десорбции

$$\bar{C}_i^d = 1 - \operatorname{erfc}(\mu_i v_i) = \operatorname{erf}(\mu_i v_i). \quad (56)$$

Другое выражение модели десорбции получим с учетом (54):

$$\bar{C}_i^d = \operatorname{erf}\left(\frac{n}{K_i l \sqrt{2}} v_i\right). \quad (57)$$

Индикаторные кривые десорбции $\bar{C}_i^d = f(l)$ и $\bar{C}_i^d = f(1/t)$ показаны на рис. 11. По ним, как и по кривым сорбции, можно определить коэффициент фильтрации компонента K_i . Здесь следует иметь в виду, что среднеквадратичное значение v_i^* , соответствующее значению $\operatorname{erfc}(\mu_i v_i) = 0,32$ (46), будет получено по десорбционным кривым на уровне:

$$\bar{C}_i^d = 1 - \operatorname{erfc}(\mu_i v_i) = 1 - 0,32 = 0,68.$$

По кривым определяем величину l^* (см. рис. 11, а) и $1/t^*$ (см. рис. 11, б), соответственно по формулам (48), (49) рассчитываем значение v^* .

Очевидно, что процесс *рассоления* (растворение веществ в конвективном потоке подземных вод) будет протекать анало-

гично десорбции в случае, если скорость растворения достаточно велика по сравнению со скоростью уноса массы растворяемого компонента за счет конвективного перемещения воды и если не будет достигнут предел растворимости.

ОЦЕНКА СООТВЕТСТВИЯ МОЛЕКУЛЯРНО-КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ МИГРАЦИИ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ КОМПОНЕНТОВ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМ ДАННЫМ

Важным критерием истинности любой теории или правильности теоретической модели является их соответствие экспериментальным данным. Для оценки такого соответствия построим

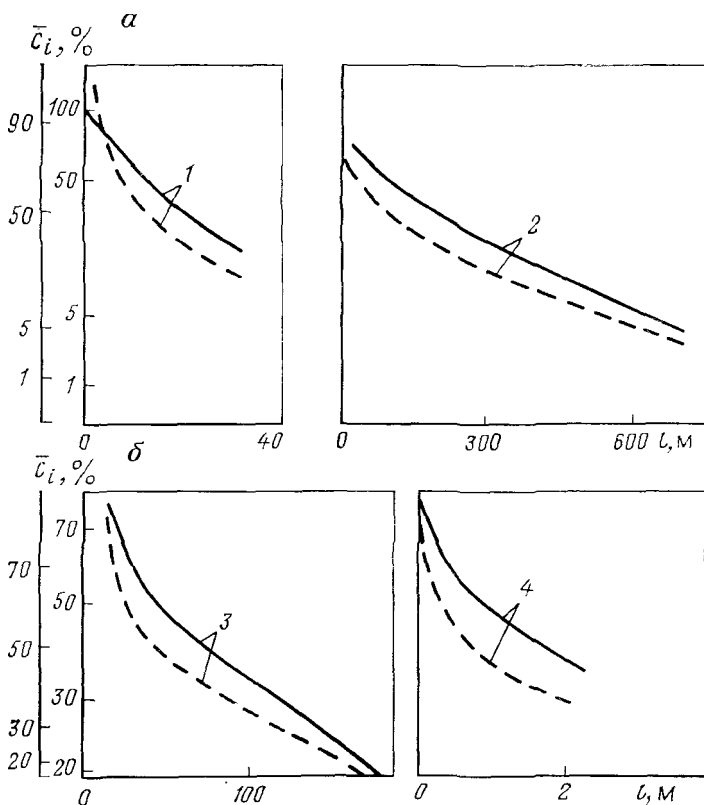


Рис. 12. Индикаторные кривые $\bar{C}_i=f(l)$ в спрямляющих координатах по [29, 43].

а — по [29, 43]; б — по [29]; кривые снижения: 1 — содержания бактерий в воде озера, фильтрующейся в песках; 2 — общего содержания солей в подземных водах; 3 — окисляемости воды озера, фильтрующейся в песках; 4 — цветности речной воды при фильтрации через песчаную загрузку. Сплошные линии (правая шкала) — кривые, построенные в координатах $l \div \operatorname{arccerfc}(\bar{C}_i)$, пунктирные (левая шкала) — в координатах $l \div \operatorname{arccerf}(1-2\bar{C}_i)$

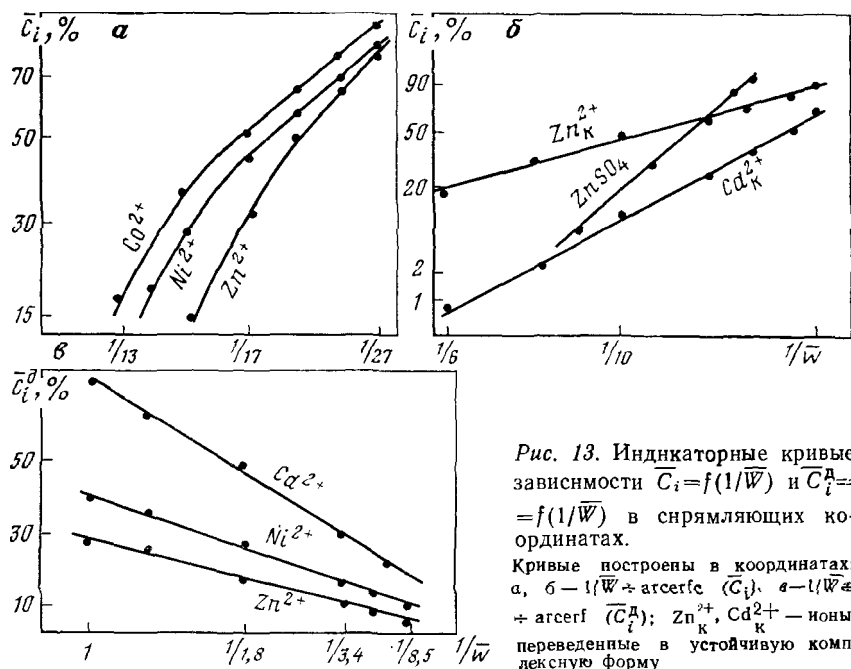


Рис. 13. Индикаторные кривые зависимости $\bar{C}_i = f(1/\bar{W})$ и $\bar{C}_i^D = f(1/\bar{W})$ в спрямляющих координатах.

Кривые построены в координатах: а, б — $1/\bar{W} \div \operatorname{arccerf} \bar{C}_i$; в — $1/\bar{W} \div \operatorname{arccerf} \bar{C}_i^D$; Zn_K^{2+} , Cd_K^{2+} — ионы, переведенные в устойчивую комплексную форму

спрямляющие диаграммы криволинейной функции $\bar{C}_i = f(\mu_i, v_i)$. В соответствии с (43) можно записать

$$\mu_i v_i = \operatorname{arccerf} \bar{C}_i, \quad (58)$$

где $\operatorname{arccerf} \bar{C}_i$ — обозначение обратной функции $\operatorname{erfc}(\mu_i v_i)$. Следовательно, если реальный процесс в эксперименте идет в соответствии с (43) и мы построим экспериментальную кривую в координатах $\mu_i v_i \div \operatorname{arccerf} \bar{C}_i$, то получим прямую линию. Отсюда, если $\mu_i = \text{const}$ и $t = \text{const}$, то и график в координатах $l \div \operatorname{arccerf} \bar{C}_i$ должен быть прямолинейным. Или, если $\mu_i = \text{const}$ и $l = \text{const}$, то график в координатах $1/t \div \operatorname{arccerf} \bar{C}_i$ должен быть прямым.

Для сравнения укажем, что в соответствии с диффузионно-конвективной моделью и ее решением имеем [38]

$$\bar{C} = 0,5 \operatorname{erfc} \xi \quad \text{или} \quad 1 - 2\bar{C} = \operatorname{erf} \xi, \quad (59)$$

$$\text{где} \quad \xi = \frac{l - (vt/n)}{2 \sqrt{Dt/n}}.$$

Следовательно, обратная функция, спрямляющая экспериментальную кривую, в этом случае может быть записана

$$\xi = \operatorname{arccerf} (1 - 2\bar{C}). \quad (60)$$

Отсюда, учитывая, что при $t = \text{const}$ ξ прямо пропорциональна l , экспериментальная кривая должна быть прямой линией в координатах $l \div \operatorname{arccerf} (1 - 2\bar{C})$.

На рис. 12 и 13 показаны спрямленные диаграммы, построенные по опубликованным экспериментальным данным различных авторов. Каждая индикаторная кривая строится дважды на одной диаграмме: в координатах для молекулярно-кинетической модели и для конвективно-диффузионной модели.

По экспериментальным данным П. Е. Богомазова [29] построены кривые снижения содержания бактерий в воде озера при фильтрации в среднезернистых песках и по данным Ж. Фрида [43] — общего содержания солей в подземных водах, связанных с полями фильтрации и приуроченных к аллювиальному горизонту, сложенному песками (см. рис. 12, а). На этих графиках кривые, построенные в соответствии с молекулярно-кинетической моделью, будут более спрямленными. По данным Н. А. Плотникова [29] построены кривые снижения окисляемости воды озера при фильтрации в среднезернистых песках и изменения цветности речной воды за 20 сут при фильтрации через песчаную загрузку (см. рис. 12, б). И в этих случаях кривые, построенные по молекулярно-кинетической модели, более спрямлены.

На рис. 13, а приведены перестроенные автором кривые, полученные Б. Великовым в серии опытов для миграции тяжелых металлов. На рис. 13, б приведены кривые, построенные по данным Б. Великова, для цинка и кадмия в комплексной форме и кривая, построенная по данным В. С. Голубева, для опыта, проведенного в 1978 г., по фильтрации $ZnSO_4$ через загрузку из дробленого стекла (зерна 1—2 мм). Безразмерная величина \bar{W} , используемая на рис. 13, представляет собой число водообменов, что пропорционально времени t . В целом кривые, построенные на рис. 13 в соответствии с молекулярно-кинетической моделью, являются хорошо спрямленными. Чрезвычайно интересным является тот факт, что почти идеально в соответствии с молекулярно-кинетическим механизмом миграции ведут себя в потоке подземных вод цинк и кадмий, переведенные в комплексную форму специальным комплексообразователем. В этом случае форма миграции компонентов чрезвычайно устойчивая, тем самым обеспечивается постоянство массы мигрирующих частиц M и параметра μ_i . Отклонение экспериментальных кривых от расчетных по молекулярно-кинетической модели (небольшие искривления графиков на рис. 12 и 13), очевидно, связаны с некоторым изменением массы комплексных частиц в процессе фильтрации за счет перераспределения комплексов.

Была также проведена оценка соответствия экспериментальных данных молекулярно-кинетической модели процесса десорбции. В этом случае, исходя из формулы (56), имеем $\mu_i v_i = \operatorname{arccerf}(\bar{C}_i^d)$. Следовательно, при $\mu_i = \text{const}$ и $l = \text{const}$ экспериментальная кривая десорбции, построенная в координатах $l/t \div \operatorname{arccerf}(\bar{C}_i^d)$, должна спрямляться. Такая диаграмма построена (см. рис. 13, в) по данным, полученным Б. Великовым для массооб-

мена II типа. Графики оказались близкими к прямолинейным, что может свидетельствовать об устойчивости формы миграции компонентов после перехода из твердой фазы в жидкую.

ЛАБОРАТОРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНО-КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Задачи исследований и постановка опытов

Предложенная модель сорбции (43) и десорбции (56) компонентов является однопараметрической и определяется комплексным параметром μ_i . Как видно из выражений (54) и (43), он зависит от ряда факторов. Величина напорного градиента I характеризует запас гидродинамической энергии потока, в котором движется частица компонента i . Коэффициент фильтрации компонента K_i зависит от «тормозящего действия» пористой среды, иными словами, ее структуры. В то же время, как следует из (42), величина μ_i зависит от комплексной массы M i -й частицы, которая, как видно из (34), в свою очередь, прямо пропорциональна величине λ , характеризующей взаимодействие i -й частицы с твердой фазой пористой среды и с компонентами, входящими в жидкую фазу. Таким образом, параметр μ_i зависит от структуры пористой среды, минералогического состава породы, скорости движения потока и химического состава фильтрующейся воды. Модель справедлива для одномерного потока при условии мгновенного изменения концентрации на входе в начальный момент времени и последующего постоянного ее значения для всего времени фильтрации компонента i , поступающего во входное сечение, что отвечает граничному условию $x=0$, $C_{i,0,t}=C^0=\text{const}$. При этом исследуемый i -й компонент в начальный момент распределен в пористой среде равномерно, т.е. начальное условие при $t=0$, $C_{i,x,0}=C_0=\text{const}$, или, как частный случай, $C_0=0$.

Как будет показано далее, в практических задачах не обязательно знать величину параметра μ_i . В качестве основных параметров молекулярно-кинетической модели в лабораторных исследованиях (полевые исследования здесь не рассматриваются) определяют: эффективную скорость компонента v_i^* и его коэффициент фильтрации K_i , которые можно назвать параметрами миграции i -го компонента. При этом показатели v_i^* и K_i являются обобщенными и характеризуют физическую адсорбцию, хемосорбцию, ионный обмен и другие физико-химические процессы, и применяются только в тех условиях, в которых они определяются (однородная данного состава среда, одномерный стационарный или квазистационарный поток воды определенного химического состава).

Опыты ведутся как и в случае применения дисперсионной модели, в высоких колоннах, заполненных исследуемой породой,

так и на образцах с ненарушенной структурой*. На входное сечение подается раствор с постоянной концентрацией. В течение всего эксперимента скорость фильтрации воды должна поддерживаться постоянной. Единственным отличием в проведении опытов по молекулярно-кинетической модели является режим отбора проб (или их частота) при постоянной длине образца. Так как концентрация \bar{C}_i зависит от времени $1/t_i$, то для фиксации наибольших изменений концентраций, которые наблюдаются в первые моменты времени, необходимо в начале опыта отбирать пробы наиболее часто, а затем увеличивать интервал между пробами соответственно величине $1/t$.

Определив для разных компонентов отвечающие им значения K_i при определенных скоростях v_i^* , можно прогнозировать распространение этих загрязняющих компонентов и их удаление из раствора (сорбцию) или извлечение из породы (десорбцию). Рассмотрим несколько примеров обработки данных лабораторных исследований.

Определение эффективной скорости и коэффициента фильтрации компонента

Обобщенный параметр миграции компонента K_i можно рассчитывать по формулам (52) и (53), но для этого следует вначале определить эффективную скорость компонента v_i^* . По результатам экспериментальных работ строятся индикаторные кривые в координатах $\bar{C}_i = f(l)$ или $\bar{C}_i = f(1/t)$. По этим кривым находят значения l_i^* , если строилась зависимость $\bar{C}_i = f(l)$, или $1/t_i^*$, если строилась зависимость $\bar{C}_i = f(1/t)$, отвечающие значению $\bar{C}_i = 0,32$. Затем по формулам (48) и (49) рассчитывают значение v^* .

Однако способ определения v_i^* по криволинейному графику не позволяет провести проверку на соответствие опыта принятой модели. К тому же криволинейный график трудно проводить по точкам, имеющим случайный разброс. Поэтому целесообразно строить графики в координатах $\text{arcsrf}(\bar{C}_i)$ от $1/t(l)$ для процесса сорбции и $\text{arcsrf}(\bar{C}_i^D)$ от $1/t(l)$ для процесса десорбции (рис. 14). Отметим, что вместо значений функции $\text{arcsrf}(\bar{C}_i)$ или $\text{arcsrf}(\bar{C}_i^D)$ можно использовать значения относительной концентрации \bar{C}_i , что удобно для быстрого построения графиков.

В качестве примера проведем обработку по рассмотренной схеме результатов лабораторных исследований, выполненных Б. Великовым (см. гл. 4). Возьмем данные опыта 3 из 1 серии

* Длина колонны не ограничивается, но на слишком коротких (меньше 0,5 м) колоннах труднее уловить эффект отставания растворенных частиц от молекул воды.

Рис. 14. График определения эффективной скорости v^*_i

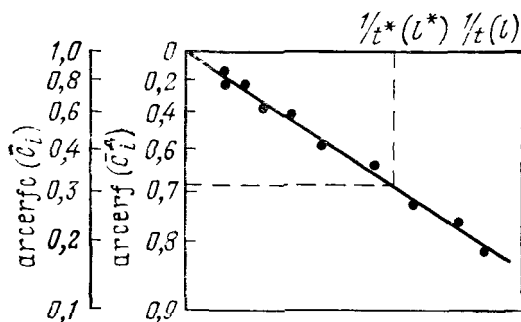
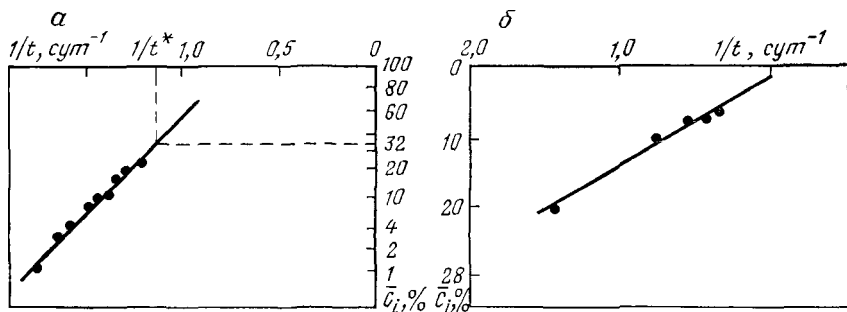


Рис. 15. График определения эффективной скорости иона цинка для процессов сорбции (а) и десорбции (б)



(см. табл. 20) для иона Zn . Опыты проводились в колоннах длиной 40 см и диаметром 10,5 см. Скорость фильтрации поддерживалась постоянной и равнялась 3 м/сут. По экспериментальным точкам, которые для процесса сорбции цинка сняты с рис. 40, а для десорбции — с рис. 44, построены графики зависимости \overline{C}_i от $1/t$ (рис. 15). На рис. 15, а видно, что для процесса сорбции точки достаточно хорошо ложатся на прямую линию, что свидетельствует о постоянстве параметра модели μ_i в процессе фильтрации. Что касается процесса десорбции, то точки хуже ложатся на прямую (см. рис. 15, б), и это подтверждает мнение Б. Великова о значительном влиянии на процесс растворения соединений цинка, предшествующий осаждению их в процессе сорбции. По полученному значению $1/t^*$ и формуле (49) рассчитывается эффективная скорость для иона цинка, равная в случае процесса сорбции $v^*_{Zn}=0,66$ м/сут. По формуле (50) определим эффективную пористость $n^*_e=4,54$ и сравним со значением $n_e=5,17$, полученным Б. Великовым (см. табл. 20). Вычислив погрешность определения по формуле $\delta = (n_e/n^*_e - 1) \cdot 100\%$, получим $\delta=12,2\%$, что говорит о незначительном расхождении параметров, полученных по различным моделям. Заметим, что для любого компонента значение n_e по молекулярно-кинетической модели будет всегда ниже полученного по дисперсионной модели, так как для первой модели n_e определяется по $\overline{C}_i=0,32$, а для второй — по $\overline{C}=0,5$.

Принципы прогнозирования процессов сорбции и десорбции в подземных водах

Рассмотрим принцип прогнозирования процессов сорбции и десорбции для i -го компонента в простейшем случае поршневого вытеснения для одномерного потока стационарной или квазистационарной фильтрации с постоянным градиентом I , в однородной среде с пористостью n при постоянной входной концентрации C^0 и известном значении K_i .

Для случая сорбции загрязняющего компонента относительная концентрация его рассчитывается по формуле

$$\bar{C}_i = (C_i - C_0)/(C^0 - C_0), \quad (61)$$

где C_0 — начальная концентрация i -го компонента в породе (фоновая). Для процессов десорбции относительная концентрация рассчитывается по формуле

$$\bar{C}_i^d = (C_i - C^0)/(C_0 - C^0). \quad (62)$$

Прогнозирование выполняется двумя путями: 1) как длительность процесса сорбции или десорбции $t(\bar{C}_i)$ до заданного значения \bar{C}_i в заданном сечении на расстоянии l ; 2) как определение местоположения сечения $l(\bar{C}_i)$, в котором за заданное время t относительная концентрация i -го компонента изменится до заданной величины \bar{C}_i . Расчетные зависимости можно получить следующим образом. Для процесса сорбции из формулы (55) находим выражение для v_i^*

$$v_i^* = (1,41 \operatorname{arccerfc}(\bar{C}_i) k_i I)/n \quad (63)$$

и, имея в виду, что $v_i = l/t_i$, при $l = \text{const}$ получаем зависимость для определения прогнозного времени, за которое вода с относительной концентрацией i -го компонента достигнет определенного сечения на расстоянии l ,

$$t_i(\bar{C}_i) = 0,7 \ln / \operatorname{arccerfc}(\bar{C}_i) K_i I. \quad (64)$$

Прогнозное расстояние l_i , на которое продвинется фронт воды с i -м компонентом концентрацией \bar{C}_i за заданное время t определяется как

$$l_i(\bar{C}_i) = 1,41 \operatorname{arccerfc}(\bar{C}_i) K_i I t / n. \quad (65)$$

Для процесса десорбции из формулы (57) аналогично получаем те же зависимости, только вместо \bar{C}_i следует писать \bar{C}_i^d согласно (64) и вместо функции $\operatorname{arccerfc}(\bar{C}_i)$ — функцию $\operatorname{arccerfc}(\bar{C}_i^d)$.

Для иллюстрации предложенной схемы приведем пример прогноза продвижения фронта загрязненной речной воды с кон-

центрацией C_i в водоносный горизонт однородного строения (рис. 16), имеющий пористость $n=0,4$, $k_f=3$ м/сут, уклон $I=0,01$. Примем фильтрацию стационарной, расстояние от реки и между наблюдательными скважинами $l=100$ м. Содержание i -го загрязнителя в реке $C_i^0=12$ мг/л и остается постоянным во времени. Начальное содержание

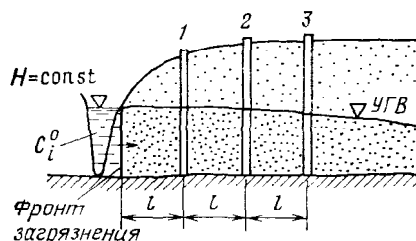


Рис. 16. Схема прогнозного расчета движения фронта загрязнения

этого загрязнителя в водоносном горизонте примем равным 0. Предельно допустимая концентрация (ПДК) изучаемого компонента в питьевой воде равна 2 мг/л. По лабораторным исследованиям, коэффициент фильтрации i -го компонента $K_i=1,6$ м/сут при коэффициенте фильтрации воды $k'_f=5$ м/сут. Для лабораторных исследований брали речную воду, а в качестве среды использовался песок, взятый из водоносного горизонта. Требуется определить, за какое время фронт загрязненной воды с $C_i=2$ мг/л достигнет наблюдательных скважин 1, 2, 3 (см. рис. 16).

Перед тем как решить эту задачу, остановимся кратко на методике использования результатов лабораторных исследований. Если выразить K_i и k_f через эффективную скорость v_i^* i -го компонента и действительную скорость u воды, то получим, что $K_i=v_i^* n/I$ и $k_f=un/I$, и, следовательно, отношение K_i/k_f зависит только от величин v_i^* и u , которые, в свою очередь, зависят от химического состава воды и от геохимических свойств минеральной части породы, и не зависит от структуры порового пространства и величины напорного градиента. Таким образом, это отношение должно оставаться постоянным для одних и тех же пород и химического состава воды при условии постоянства температурной обстановки. Вывод о постоянстве отношения K_i/k_f частично подтверждается в описанных ниже опытах III и IV с ионами Ca и SO_4 (см. табл. 5). Зная коэффициент фильтрации исследуемого водоносного горизонта k_f и отношение K_i/k_f по лабораторным данным, можно определить значение коэффициента фильтрации K_i^M i -го компонента для этого водоносного горизонта, принимая отсутствие масштабного эффекта для песчаных пород, на что указывает и В. А. Мироненко [23].

Теперь перейдем непосредственно к прогнозу. Определив коэффициент фильтрации i -го компонента по формулам

$$K_i^M = (K_i/k'_f) k_f \text{ и } K_i/k_f,$$

получим $K_i^M=0,96$ м/сут. Затем по зависимости (65) найдем расстояние, на которое продвинется фронт воды с ПДК компонента, равным 2 мг/л или $\bar{C}_i=0,17$ за 10 лет. Получаем $l=1,41$

$\arccos(0,17) \cdot 0,96 \cdot 0,01 \cdot 3650 / 0,4 = 130$ м. По зависимости (64) рассчитываем прогнозируемое время появления фронта воды с $C_i = 0,17$ (соответствующей ПДК) в наблюдательных скважинах: $t_1 = 0,7 \cdot 100 \cdot 0,4 / \arccos(0,17) \cdot 0,96 \cdot 0,01 = 2777$ сут $= 7,6$ лет, $t_2 = 15,2$ лет; $t_3 = 22,8$ лет.

Как видим, прогнозные расчеты несложны. Достоверность их зависит, во-первых, от соответствия натуральных условий (геофильтрационных, геохимических, биологических) расчетной модели, а также принятой при выполнении опыта и, во-вторых, от справедливости предположения отсутствия масштабного эффекта при перенесении параметров миграции для песчаных пород с лабораторных экспериментов на натуру.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ МИГРАЦИИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ПРОБЛЕМЫ ГЛУБОКОЙ ОЧИСТКИ БЫТОВЫХ СТОЧНЫХ ВОД В ЕСТЕСТВЕННЫХ КОЛЛЕКТОРАХ

Постановка задачи

Развитие промышленности и рост темпов городского строительства приводят, с одной стороны, к увеличению потребности в воде для хозяйственно-бытовых и технических нужд, а с другой — к возникновению проблемы утилизации сточных вод, объем которых возрастает пропорционально увеличению водопотребления. Особенно остро эта проблема стоит в аридных районах, где и без того ощущается большой дефицит пресной воды.

Отечественный и зарубежный опыт очистки сточных вод на очистных станциях показывает, что, несмотря на достигаемый в ряде случаев высокий эффект очистки этих вод даже до уровня питьевых, этот путь утилизации в настоящее время не является оптимальным из-за недостаточной пропускной способности технологического оборудования, возможных резких колебаний качества воды на выходе установки при колебаниях состава сточной воды. Поэтому представляет интерес метод сочетания технологической очистки с фильтрацией сточных вод в природные коллекторы. Этим можно достичь стабильности качества получаемой воды и увеличить пропускную способность всей системы. При этом на первое место выдвигается проблема улучшения качества воды. На изменения качества воды влияют физическая и химическая сорбция, ионный обмен, микробиологические и биохимические процессы и многие другие физико-химические процессы. В аридных районах к этому добавляются растворение и вынос твердых солей*, которые, как правило, присутствуют в породах, залегающих над первым от поверхности региональным водоупором. Поэтому для аридных районов в проблеме глубокой очистки сточных вод в естественных коллекторах можно выделить два аспекта: а) рассоление пород и

* Растворение и вынос твердых солей из породы будем называть процессом рассоления [4].

Т а б л и ц а

Условия проведения экспериментальных исследований

Номер опыта	Насыщение			Фильтрация		число фильтро- циклов	Длительность опы- та, сут	Начальная скорость фильтрации, м/сут
	технической водой		стоками мутно- стью 5—10 мг/л, сверху вниз	технической воды до полно- го расслоения	стоков мутно- стью 5—10 мг/л			
	сверху вниз	снизу вверх						
I	—	+	—	—	+	3	100	1,5
III	+	—	—	+	—	1	36	2,4
IV	+	—	—	+	—	—	52	2,3
VIII	—	+	—	—	+	2	84	1,6
IX	—	+	—	+	+	5	167	2,0
XI	—	—	+	—	+	—	3	3,2

б) очистку сточных вод от загрязнителей. Такое деление условно, так как в натуре эти процессы протекают одновременно.

В связи с вышесказанным в лабораторных условиях решаются две основные задачи: 1) определение расчетных параметров процесса расслоения породы (количество воды, необходимой для растворения и выноса солей, скорость выноса солей); 2) определение миграционных параметров различных компонентов (загрязнителей), необходимых для последующего гидрогеохимического прогноза очистки бытовых стоков при движении в водоносном пласте.

Для решения этих задач были проведены опыты в основном на песчаных образцах (длина образца около 1 м, пористость 40 %, начальная засоленность 0,06—0,9 %). Ниже приведено процентное содержание фракций в образце.

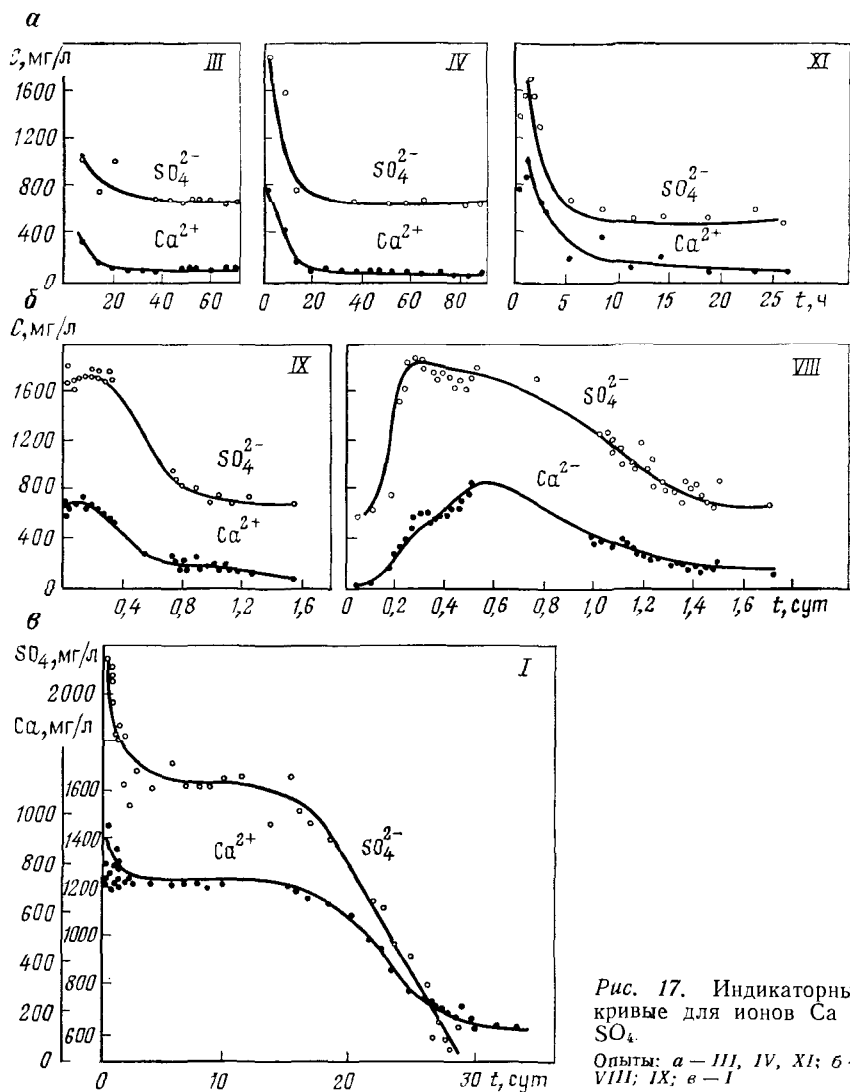
Фракции, мм	0,5	0,5—0,25	0,25—0,1	0,1—0,05
Содержание фракции, % .	1	2	24	56

Фракции, мм	0,05—0,01	0,01—0,005	0,005—0,001	0,001
Содержание фракции, % .	2	1	7	7

Расслоение проводилось стоками и технической водой, аналогичной стокам по макросоставу. В этой воде полностью отсутствовали органические загрязнители, бактерии и практически отсутствовали азотистые соединения. Условия проведения опытов даны в табл. 4. Над образцом поддерживался постоянный уровень воды, что обеспечивало постоянный напорный градиент.

Лабораторные исследования процесса расслоения пород

Процесс промывания породы от солей изучался Н. Н. Веригиным, А. Е. Орадовской, Н. В. Фисун, А. П. Белоусовой и др. Описываемые нами опыты проводились по известным методикам



[5, 6, 7]. В результате экспериментов были получены индикаторные кривые (рис. 17). Они имеют разный характер изменения концентраций ионов в выходном сечении, что связано с методом насыщения образцов, величиной начальной засоленности и длиной пути фильтрации. В опытах III, IV и XI (см. рис. 17, а) засоленность небольшая, условия проведения опыта одинаковы и длины образцов близки. Полученные индикаторные кривые однотипны: с начала фильтрации наблюдается снижение концентраций ионов Ca и SO_4 . Коэффициенты фильтрации этих ионов, рассчитанные по молекулярно-кинетической модели, в опытах

III и *IV* близки между собой, а в опыте *XI* — почти вдвое выше. Последнее, по-видимому, связано с очень низкой начальной засоленностью образца *XI* ($\zeta_0^p = 0,06\%$), что привело к неравномерному распределению ионов Ca и SO_4 в поровом пространстве образца в процессе его насыщения водой, и верхняя часть оказалась промытой еще до начала фильтрации. При обработке результатов это трудно учесть, и значения коэффициентов фильтрации ионов оказались завышенными из-за увеличения l при расчете v_i^* .

Рассмотрим группу опытов (*I*, *VIII*, *IX*), в которых насыщение образца велось снизу, а фильтрация воды — сверху, т. е. менялось направление движения воды. Здесь можно выделить два случая. В первом случае (см. рис. 17, б, опыты *VIII* и *IX*) на индикаторных кривых достаточно четко выделяются две зоны: в начале фильтрации идет повышение концентрации, а затем наблюдается ее снижение до постоянной величины. При этом на более длинном и менее засоленном образце (опыт *VIII*) эти зоны выявляются более четко. Следовательно, при любом способе насыщения образца, в котором имеются растворимые соли в твердой фазе, происходит перераспределение солей в поровом пространстве, что приводит к неравномерному начальному характеру его засоленности, которое практически невозможно учесть при обработке результатов опыта. Поэтому в опытах *VIII* и *IX* коэффициенты фильтрации ионов Ca и SO_4 получились ниже, чем в опытах *III* и *IV*.

Второй случай характеризуется результатом опыта *I*. На рис. 17, б показаны индикаторные кривые, полученные в опыте *I*, где начальная засоленность образца приближается к 1 %. При этом скорость фильтрации в течение опыта изменялась от 1,5 до 0,29 м/сут. Здесь нет участка повышения концентрации, но появилась площадка с постоянной концентрацией перед снижением. Это означает, что соли в твердой фазе растворяются не все сразу, а в течение длительного времени вследствие большой начальной засоленности. По таким опытам трудно определять параметры миграции (в дисперсионной модели — n_e , в молекулярно-кинетической — K_i). Они определяются по участку снижения концентрации, если за начало отсчета времени берется начало снижения концентрации. Если до фильтрации соли в образце находились в растворенном состоянии, то за начало отсчета принимается момент начала фильтрации. При этом на индикаторных кривых сразу же наблюдается снижение концентрации (см. рис. 17, а). Для получения достоверных данных достаточно, чтобы выполнялось условие равномерности распределения солей по всей длине образца. Поэтому опыты по определению параметров процесса рассоления надо вести только на образцах с равномерной засоленностью, и при этом исследуемые соли должны находиться в жидкой фазе. Полученные значения будут характеризовать скорость движения определенных ионов.

Таблица 5

Результаты обработки опытных данных

Номер опыта	Скорость филь- рации воды v , м/сут	Коэффициент фильтрации воды k_f , м/сут	Длина колонны l , м	Начальная за- соленность ξ_0 , %	Число водооб- менов N_w	Коэффициен- ты фильтра- ции ионов, м/сут		$\frac{K_{Ca}}{k_f}$	$\frac{K_{SO_4}}{k_f}$	Условия проведения опытов
						K_{Ca}	K_{SO_4}			
III	2,93	2,04	0,84	0,25	9,4	1,77	1,97	0,87	0,96	Насыще- ние сверху, фильтра- ция сверху
IV	1,92	1,82	0,79	0,25	10,0	1,62	1,77	0,89	0,97	
XI	3,2	2,9	0,9	0,06	1,4	3,3	3,61	1,14	1,25	
VIII	1,56	1,99	1,7	0,25	3,5	0,94	0,82	0,47	0,41	Насыще- ние снизу, фильтра- ция сверху
IX	1,25	1,18	0,97	0,6	10,0	1,02	0,61	0,87	0,52	

В проделанных лабораторных опытах можно принять, что в опытах III и IV получены достаточно достоверные показатели, так как отношение коэффициентов фильтрации иона Ca и воды составляет 0,87—0,89, а иона SO₄ и воды оно равно 0,96—0,97 (табл. 5). Они близки в двух опытах, и можно предположить, что отношение коэффициентов фильтрации i -го компонента и воды K_i/k_f является постоянной величиной для одних и тех же пород и химического состава воды в одних и тех же температурных условиях. Это значит, что полученные коэффициенты фильтрации ионов Ca и SO₄ можно использовать в прогнозных расчетах в том случае, если процесс рассоления будет определяться в основном выносом солей, т. е. кинетикой растворения твердой фазы можно пренебречь из-за малого содержания твердых солей и практически мгновенного их растворения.

Полученные значения коэффициентов фильтрации свидетельствуют, что ион Ca движется несколько медленнее иона SO₄. Поэтому можно ожидать, что на достаточно большом пути фильтрации вода будет обогащаться сульфат-ионом на фоне уменьшения содержания иона кальция.

Если же в твердой фазе находится много солей и их растворение идет со скоростью, соизмеримой со скоростью выноса, т. е. на индикаторных кривых, перед снижением концентрации появляется горизонтальная площадка (см. рис. 17, в), то целесообразно определять количество объемов воды N_w , необходимое на промывку породы при данном удельном содержании соли ξ_0^0 .

Последнее связано с начальным засолением ξ_0^B следующим уравнением [5]:

$$\xi_0^0 = (\gamma_n / \gamma_c) (1 - n) \xi_0^B, \quad (66)$$

где γ_n и γ_c — плотность исследуемой породы и соли.

По результатам опытов был построен график зависимости числа водообменов N_w от удельного содержания гипса в породе ξ_0^0 (рис. 18). Пользуясь графиком, можно рассчитать время, за которое будет растворен и вынесен весь гипс из породы. Зная n , ξ_0^B и геометрические размеры промываемого массива (его объем W_n), можно рассчитать объем воды W_B , необходимый для промывки данного массива породы. Вначале рассчитывают по зависимости (66) ξ_0^0 , затем по графику на рис. 18 находят соответствующую величину N_w . По ней определяют объемы воды

$$W_B = W_n n N_w \quad (67)$$

и рассчитывают время, за которое пройдет такой объем воды через породу, если известен расход Q :

$$t = W_B / Q. \quad (68)$$

Таким образом, проведено * восемь опытов различной длительности и в различной постановке (см. табл. 4). Для того чтобы приблизить условия проведения экспериментов к натурным, часть опытов проводилась на сточной воде. Прежде чем перейти к обработке результатов экспериментов, остановимся на некоторых методических аспектах, которые связаны с трудностями проведения опытов и свойственны, по-видимому, всем исследованиям, где следует учитывать взаимное влияние различных компонентов раствора в присутствии бактерий. В связи с тем что практически не известны способы консервации и хранения сточной воды с большим числом бактерий, вода в исходной емкости менялась ежедневно. В связи с этим качество стоков довольно сильно колебалось изо дня в день, что хорошо видно на примере опыта IX (рис. 19). Известные способы обработки при колеблющейся концентрации на входе, например импульсный запуск индикатора, здесь неприменимы, так как часть загрязнителей участвует или является продуктом жизнедеятельности бактерий. Следовательно, изменение содержания компонентов фильтрующейся воды на выходе будет зависеть не только от процесса сорбции, но и от того, какое влияние на его ход будут оказывать бактерии и создающаяся геохимическая обстановка. На примере того же опыта IX видно, что изменениями концентраций на выходе трудно соотнести с изменениями концентраций на входе. Надо отметить, что из-за присутствия в сточных водах взвешенных частиц во всех опытах на 5-е и 20-е сутки

* В проведении и обработке результатов опытов принимали участие Н. В. Фисун, А. П. Белоусова и А. Б. Воронов.

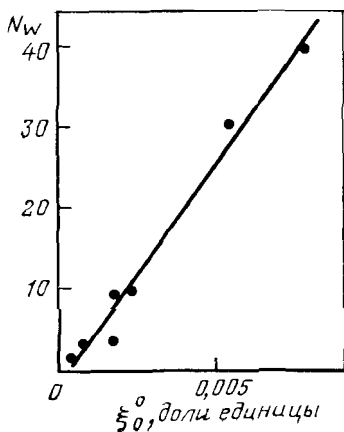
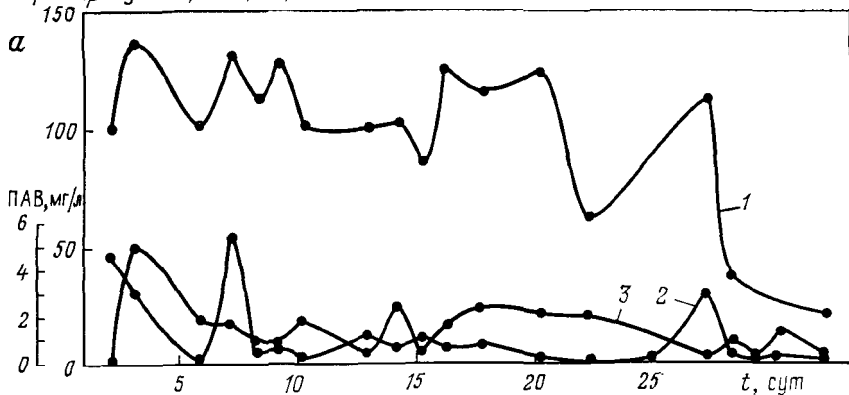


Рис. 18. График зависимости числа водообменов N_w от удельного содержания ξ_0^0 гипса в породе

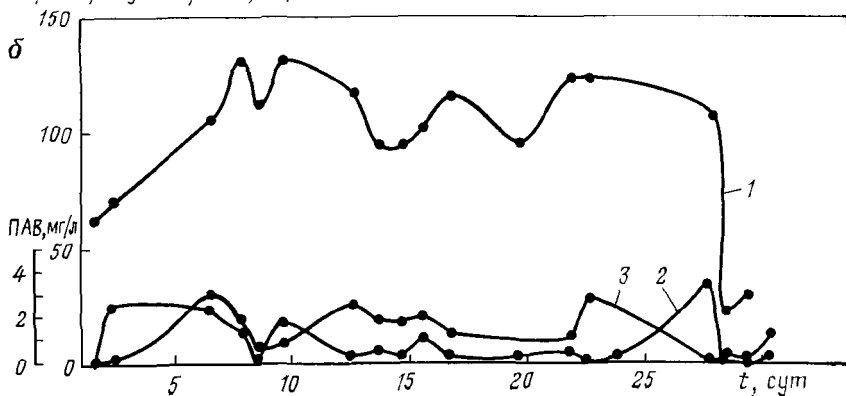
Рис. 19. График изменения показателя химического потребления кислорода (ХПК), содержания нефтепродуктов и поверхностно-активных веществ (ПАВ) в исходных стоках (а) и фильтрате (б).

Кривые: 1 — значений показателя ХПК; содержания: 2 — нефтепродуктов; 3 — ПАВ

Нефтепродукты, ХПК, мг/л



Нефтепродукты, ХПК, мг/л



формировалась илистая пленка, которая приводила к образованию «зоны аэрации» в опытных колоннах. Влияние пленки не было нейтрализовано, так как ее действие тоже являлось объектом изучения. Результаты опытов обработаны тремя методами: балансовым, аналитическим (по модели импульсного запуска индикатора) [30] и графоаналитическим (по молекулярно-кинетической модели). В связи с пилообразностью индикаторных кривых идентификацию опытов на соответствие какой-либо теоретической модели провести невозможно.

Для расчетов *балансовым методом* определялась разница между количеством поступившего и вышедшего вещества

$$\Delta q = \Sigma W_i^{ct} C_i^{ct} - \Sigma W_j^f C_j^f, \quad (69)$$

где W_i^{ct} и W_j^f — объемы сточной воды с концентрацией C_i^{ct} и фильтрата с концентрацией C_j^f . По средней концентрации фильтрата определялась равновесная концентрация C_p . Сорбционная емкость породы N находилась как отношение количества задержанного вещества к объему порового пространства

$$N = \Delta q / W_{\text{пор}}, \quad (70)$$

где $W_{\text{пор}}$ — объем порового пространства. Коэффициент распределения κ определялся по формуле $\kappa = N / C_p$.

При обработке *аналитическим методом* по модели импульсного запуска индикатора строился график изменения концентрации во времени. Затем выходная кривая разбивалась на участки, в пределах которых синусоида изменения концентрации подаваемого раствора и фильтрата имеет параметры (амплитуда E , сдвиг по фазе φ , круговая частота ω), отличающиеся от параметров синусоид на соседних участках. Для каждого выделенного участка рассчитывалась средняя интегральная скорость фильтрации v как отношение объема раствора, выраженного в метрах слоя над сечением, к промежутку времени, за который он профильтровался. Затем определялись параметры синусоид по следующим формулам:

$$\omega = 2\pi / T; \quad E = 0,5 (C_{\text{max}} - C_0) / (C^0 - C_0), \quad (71)$$

где T — период обращения; C_{max} — максимальное значение концентрации на выходе из колонны; C_0 — начальная (фоновая) концентрация компонента; C^0 — концентрация компонента на выходе. С помощью полученных величин (φ , E) определялась промежуточная величина Φ по формуле

$$\Phi = 0,5 [\varphi + \sqrt{\varphi^2 + 8 \ln^2(1/E)}]. \quad (72)$$

Затем вычислялся параметр миграции

$$n_e = v^2 / \omega \Phi^2. \quad (73)$$

Обработка *графоаналитическим методом* велась по вышеизложенной методике, но измененной для условия непостоянства

концентрации на входе. При этом предполагалось, что «восходящие» участки пилообразных индикаторных кривых соответствуют процессу сорбции. Определяли средние значения для максимальных и минимальных относительных концентраций фильтрата

$$\bar{C}_{\max}^{\text{ср}} = \left(\sum_1^n \bar{C}_{\max}^i \right) / n; \quad \bar{C}_{\min}^{\text{ср}} = \left(\sum_1^n \bar{C}_{\min}^i \right) / n. \quad (74)$$

Затем рассчитывалось среднеарифметическое значение интервала времени для $\bar{C}_{\max}^{\text{ср}}$ и $\bar{C}_{\min}^{\text{ср}}$

$$\Delta t_{\text{ср}} = \left(\sum_1^n \Delta t_i \right) / n, \quad (75)$$

где n — число участков. На спрямленном графике находилась точка с координатами $1/t_1$, \bar{C}_1 , где t_1 — время отбора первой пробы воды в выходном сечении, а $\bar{C}_1 = \bar{C}_{\min}^{\text{ср}}$. Потом определяли положение точки с координатами $1/t_2$, \bar{C}_2 , где $t_2 = t_1 + \Delta t_{\text{ср}}$, а $\bar{C}_2 = \bar{C}_{\max}^{\text{ср}}$. По этим двум точкам строилась прямая, которая являлась усредненным графиком, характеризующим процесс сорбции в условиях колеблющейся концентрации на входе. Представляется удобным использовать указанный способ усреднения для сравнения параметров, полученных разными методами.

Результаты обработки опыта IX разными методами сведены в табл. 6. Отметим, что по различным моделям получаются различные параметры миграции: κ , n_e , K_i . Для удобства сравнения они все приведены к эффективной пористости n_e . Для перехода от κ к n_e использована формула (79). Для перехода от K_i к n_e использовалась формула (50).

Как видно из табл. 6, близкие значения параметров, полученные тремя методами, получены только для показателя ХПК. Это связано с тем, что этот показатель характеризует, в основном, трудноокисляемые органические вещества и во времени изменяется незначительно. Для остальных компонентов наблюдаются значительные колебания в параметрах, что связано, по-видимому с несовершенством использованных моделей и методов. Балансовый метод отличается простотой расчета, но не учитывает изменение концентрации компонентов в исходных стоках, что приводит к завышенным значениям показателей, так как содержание в стоках определяемых компонентов (исключая бактерии), как правило, со временем уменьшается. Число бактерий не уменьшалось, но внутри колонны в породе в процессе фильтрации стоков (на 7—10 сут) складывалась обстановка, благоприятная для синегнойной палочки, которая подавляет рост коли-бактерий, являющихся санитарно-бактериологическим показателем качества воды. В связи с тем что в расчет принималось время всего опыта, миграционный показатель по коли-бактериям получился высоким. Аналитический метод по модели

Таблица 6

Результаты обработки экспериментальных данных опыта IX, проведенного тремя методами

Компоненты и показатели	Расчетное время, сут	Скорость фильтрации (интеграл) v , м/сут	Балансовый		Аналитический		Графоаналитический	
			$\kappa = \frac{1}{\beta}$	$n_e = n + \kappa$	n_e	δ	K_i , м/сут	$n_e = \frac{v}{v_t}$
ХПК	20	1,5*	—	—	0,94	0,2	0,48	1,1
		1,26	—	—	—	—	0,17	2,55
		0,5	—	—	1,47	0,09	—	—
	32	0,88	1,05	0,82	—	—	—	—
Нефтепродукты	32	0,88	77	31	—	—	—	—
	20	1,25	—	—	—	—	0,13	3,4
ПАВ	32	0,88	1,02	0,81	—	—	—	—
		1,47	—	—	1,35	0,19	—	—
		1,87	—	—	1,12	0,27	—	—
	20	1,25	—	—	—	—	0,13	3,4
		1,11	—	—	2,54	0,026	—	—
Коли-бактерии	32	0,88	50	24	—	—	—	—
		0,95	—	—	0,95	0,097	—	—
	20	1,25	—	—	—	—	0,62	0,71

* Расчет проводился по первым точкам опыта.

импульсного запуска индикатора позволяет учесть колебания содержаний компонентов в исходных стоках, но не учитывает изменения геохимической обстановки в процессе опыта, которая меняет начальные условия для каждого последующего участка. Обработка графоаналитическим методом по всей опытной кривой с учетом колебания входной концентрации также не учитывает изменения геохимической обстановки в течение опыта. Поэтому значения параметров, полученные аналитическим и графоаналитическим методами, близки между собой. На основании сказанного можно сделать вывод, что при обработке опыта, условия проведения которого не во всем соответствуют какой-либо одной модели, целесообразно использовать одновременно несколько моделей и методов.

Таким образом, в определенных условиях для процесса расхождения проявляется корреляция между коэффициентом фильтрации компонента K_i и коэффициентом фильтрации воды k_f . Эта корреляция заключается в постоянстве отношений K_i/k_f для данных породы и воды. Использование этого отношения в прогнозных расчетах позволяет отказаться от громоздкого построения эталонных кривых, как это часто делается для других моделей. В то же время, исходя из предположения об аналогии коэффициента фильтрации компонента коэффициенту фильтрации воды, можно предложить для прогнозных расчетов миграции компонентов использовать известные для фильтрации воды гидродинамические зависимости (радиальная и плано-радиальная в напорном или безнапорном водоносном горизонте при неустановившемся режиме фильтрации т. д.).

* * *

1. Предлагаемая молекулярно-кинетическая модель миграции компонентов в гидродинамическом потоке подземных вод для условий квазистационарной одномерной фильтрации отличается относительной простотой математического выражения, что облегчает определение параметров миграции и прогнозирование.

2. Каждый компонент раствора (включая воду) в гидродинамическом потоке имеет свою физическую скорость миграции (фильтрации).

3. Феноменологическая скорость миграции данного компонента (эффективная скорость) представляет среднеквадратичную скорость миграции его частиц в гидродинамическом потоке.

4. Основным параметром миграции данного компонента является его коэффициент фильтрации, представляющий собой произведение эффективной скорости фильтрации частиц этого компонента на общую пористость фильтрующей породы при напорном градиенте, равном 1.

5. Коэффициент фильтрации компонента является обобщенным параметром и зависит от свойств частиц этого компонента (радиуса частиц, заряда и других внутренних факторов миграции), а также от свойств фильтрующих пород и порового прост-

ранства, минерализации и химического состава воды, температуры и давления (внешних факторов миграции): изменяется при изменении комплекса компонентов и геохимической обстановки.

6. Коэффициенты фильтрации компонентов определяются по индикаторным кривым, получаемым в результате экспериментальных исследований при данной температуре с водой определенного состава и данной фильтрующей породой.

7. Экспериментальные исследования различных авторов процессов массообмена I и II типов хорошо согласуются с молекулярно-кинетической моделью миграции. Миграция компонентов в устойчивой комплексной форме особенно точно соответствует предлагаемой модели.

8. Предложенная модель дает возможность вести прогнозные расчеты времени или пути продвижения загрязняющего компонента при условии адекватности геофильтрационной и геохимической обстановок натурального процесса и того, который создавался в лабораторных опытах по определению K_i . Заметим, что условие адекватности обстановок в равной мере относится и к диффузионно-конвективной и дисперсионно-конвективной моделям.

Глава 3

РАСЧЕТЫ МИГРАЦИИ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ В ВОДОНОСНЫХ ПЛАСТАХ И ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ОПЫТНО-МИГРАЦИОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

ОСНОВНЫЕ РАСЧЕТНЫЕ МОДЕЛИ МАССОПЕРЕНОСА В ФИЛЬТРАЦИОННОЙ СРЕДЕ

Дифференциальные уравнения массопереноса

Дифференциальные уравнения массопереноса в фильтрационной среде получают совместным решением уравнений фильтрации, диффузии и массообмена [2, 4, 6, 24, 31, 41, 43 и др.]. В общем случае рассматривается конвективно-диффузионный перенос, сопровождающийся дисперсией и массообменными процессами между фильтрующейся жидкостью и водовмещающими породами. С таких позиций общее дифференциальное уравнение массопереноса в водоносных пластах можно записать в следующем виде:

$$\nabla^2(DC) - \operatorname{div}_k(vC) = n_0 \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial M}{\partial t} + W, \quad (76)$$

где D — обобщенный коэффициент дисперсии, или коэффициент гидродисперсии ($D = D_m + D_k$, здесь D_m — коэффициент молекулярной диффузии, D_k — коэффициент конвективной «диффузии»

или механической дисперсии, $D_k = \lambda v$); C — концентрация данного компонента в жидкости; v — скорость фильтрации в условиях установившегося, или квазистационарного движения; n_0 — активная пористость пласта (постоянная), характеризует активный объем порового пространства, принимающего участие в формировании расхода фильтрационного потока; N — концентрация данного компонента в твердой фазе (на единицу объема пористой среды); M — количество того же компонента, задерживаемое в «тупиковых» порах и «застойных зонах» порового пространства; W — вынос (поступление) данного компонента через кровлю и подошву водоносного пласта.

Отдельные составляющие уравнения (76) выражают соответственно: $\nabla^2 (DC)$ — суммарный эффект дисперсии (рассеивания) вещества по фронту движения; $\text{div} (vC)$ — конвективный перенос вещества, который является обычно определяющим при миграции загрязнителей в водоносных пластах; $n_0 \frac{\partial C}{\partial t}$ — изменение содержания вещества в фильтрующейся жидкости (в проточных зонах порового пространства); $\frac{\partial N}{\partial t}$ — кинетика физико-химических взаимодействий между жидкостью и средой (сорбция, растворение, кристаллизация, ионный обмен и др.); $\frac{\partial M}{\partial t}$ — кинетика необратимого поглощения вещества в закрытых (тупиковых) порах и трещинах и в так называемых тупиковых зонах [4, 24 и др.]; W — суммарное поглощение вещества в прилегающих к водоносному пласту породах (или в «блоках» трещиновато-пористой среды).

Роль и значение каждого из членов уравнения (76) могут быть существенно различными в зависимости от: гидрогеологических условий, при которых происходит массоперенос; масштаба рассмотрения этого процесса; вида переносимого компонента; характера рассматриваемой задачи и т. д. Напомним, что аналогичными (в математическом смысле) дифференциальными уравнениями описываются и процессы конвективно-кондуктивного теплопереноса в водоносных пластах. Поэтому полученные решения задач теплопереноса являются полезными для изучения проблем массопереноса.

Интегрирование дифференциальных уравнений массопереноса особенно для пространственных (трехмерных) и для двумерных задач связано с большими трудностями. В практических расчетах во многих случаях возможно применение уравнений одномерного движения, отличающихся относительной простотой соответствующих аналитических решений. Применение одномерных (плоскопараллельных и плоскорадиальных) моделей массопереноса не вызывает особых затруднений при решении обратных задач (определение миграционных параметров), поскольку постановка лабораторных и натурных опытов с индикаторами (трассерами) может быть проведена достаточно близко к одно-

мерной схеме движения [2, 4, 14, 24 и др.]. При решении прямых (прогнозных) задач этот вопрос решить, конечно, труднее. Однако существует возможность свести двухмерные задачи к одномерным, используя метод недеформируемых лент тока. Для этого после решения гидродинамической части миграционной задачи строится гидродинамическая сетка движения и каждая лента тока приводится к эквивалентной прямоугольной ленте, с дальнейшим применением одномерных уравнений массопереноса в пределах каждой полученной ленты тока. Здесь под «эквивалентной» подразумевается лента тока одинаковой ширины $b_{ср} = F_{лт}/l_{лт}$ ($F_{лт}$, $l_{лт}$ — фактическая площадь и длина соответствующей ленты тока).

Для одномерного движения (в направлении x) уравнение (76) приобретает вид

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} = n_0 \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial M}{\partial t} + W. \quad (77)$$

Физико-химические взаимодействия в пласте

В работах [2, 4, 24, 30, 41 и др.] отмечается, что наиболее распространенными и существенными являются процессы сорбции (адсорбция, десорбция). Интенсивность их зависит от ряда факторов: химического состава мигрирующих компонентов, типа и структурных особенностей водовмещающих пород, физико-химической обстановки в водоносном пласте и т. д. Кинетика сорбционных процессов при фильтрации изучалась многими исследователями [4, 6, 9, 35, 49 и др.]. Отмечено, что в природных условиях кинетикой сорбции во многих случаях можно пренебречь, поскольку длительность фильтрационного переноса значительно превышает время проявления кинетики сорбционного процесса. Другими словами, можно исходить из представления о равновесной сорбции. Этот вопрос специально исследован в работе В. М. Шестакова, где и доказана эта возможность.

В условиях равновесной сорбции $\frac{\partial N}{\partial t}$ в уравнении (77) выражается просто:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \kappa \frac{\partial C}{\partial t}, \quad (78)$$

где κ — коэффициент распределения, характеризующий сорбируемость данного компонента в конкретных условиях фильтрации. В некоторых работах [4, 24, 41 и др.] используется параметр $\beta = \frac{1}{\kappa}$.

Значения параметра κ изменяются в широких пределах — от нуля (для несорбируемых компонентов) до 30 и более.

Если $\frac{dN}{dt}$ выражается равенством (78), то $n_0 \frac{\partial C}{\partial t}$ и $\frac{\partial N}{\partial t}$ в уравнении (77) объединяются путем введения эффективной (приведенной) пористости:

$$n_e = n_0 + \kappa. \quad (79)$$

Параметр n_e обобщенным образом отражает сорбируемость компонента, и с этой точки зрения название «эффективная пористость» вряд ли можно считать целесообразным. Для него существует еще название «массоёмкость». Многочисленные данные экспериментов, проанализированные нами, показали, что почти во всех случаях оказывается невозможным определить точное значение активной пористости n_0 . По данным опытов определяется всегда (даже для компонентов, считаемых практически несорбируемыми) какая-то обобщенная характеристика n_e , которую точнее назвать «параметр равновесного массообмена» (равновесной сорбции), нежели «пористость». Тем не менее, чтобы не вводить дополнительные термины, название эффективная пористость сохраняется.

Такие физико-химические процессы, как растворение и кристаллизация, являются весьма важными при исследовании некоторых специфических задач, как, например, засоление и рассоление орошаемых земель. Кинетика этих процессов описана в работах [4, 6, 9 и др.].

Необратимое поглощение в пласте. Этим термином обозначается задерживание (устранение) части мигрирующих компонентов в застойных (пассивных) зонах порового пространства — к последним относятся тупиковые поры и трещины, а также часть «пристеночного» пространства пор, которое лишь частично участвует в фильтрационном процессе. Доля застойных зон может быть весьма значительной [24 и др.] — до 20 % (в песках) и до 90 % (в глинистых породах) от общей пористости и зависит от протяженности переноса и скорости фильтрации. Массообмен с застойными зонами осуществляется в основном под действием молекулярной диффузии и вихревого внутрипорового перемешивания.

Кинетика необратимого поглощения представляется уравнением

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \gamma(C - C_3), \quad (80)$$

где C , C_3 — концентрация компонента в протекающей жидкости и в застойной зоне; γ — коэффициент скорости поглощения.

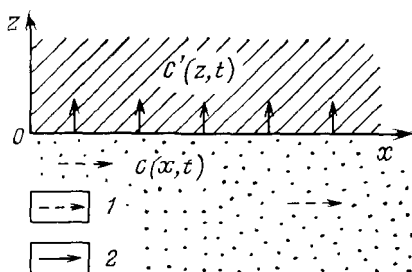
В близости от фронта вытеснения, где $C_3 \ll C$, вместо (80) можно записать

$$\partial M / \partial t = \gamma C, \quad (81)$$

т. е. скорость поглощения пропорциональна концентрации раствора.

Рис. 20. Схема массопереноса диффузионного выноса в слабопроницаемые слои, прилегающие к основному слою.

1 — направление переноса в хорошо проницаемом слое; 2 — то же, в слабопроницаемом слое



Вдали за фронтом вытеснения, где $C_3 \approx C$, получаем $\partial M / \partial t = 0$, т. е. процесс постепенно «исчерпывается». Более подробно этот вопрос рассмотрен в [24 и др.].

Считается [4 и др.], что уравнением типа (81) можно выразить также кинетику растворения, кристаллизации, осаждения компонентов в порах и трещинах. Так что параметр γ можно рассматривать как комплексный параметр, отражающий обобщенно интенсивность необратимого поглощения (устранения) компонента из раствора.

Следует отметить, что подобным же кинетическим уравнением описывается радиоактивный распад некоторых элементов (уран, радий, стронций, тритий и т. д.).

Диффузионный массообмен с кровлей и подошвой водоносного пласта возникает обычно в слоистых толщах, когда водоносный пласт подстилается и перекрывается слабопроницаемыми породами. Ввиду небольшой скорости фильтрации в них считается, что вынос вещества из основного пласта в прилегающие происходит диффузионным путем [4, 24, 41 и др.]. Можно добавить, конечно, и наличие сорбции в слабопроницаемых породах. В такой постановке вертикальный диффузионный массообмен описывается дифференциальным уравнением

$$D_m \frac{\partial^2 C'}{\partial z^2} = n' \frac{\partial C'}{\partial t} + \frac{\partial N'}{\partial t}, \quad (82)$$

где C' — концентрация компонента в слабопроницаемом слое (кровля, подошва); n' и D_m — пористость и коэффициент молекулярной диффузии для этого слоя. Отношение $\partial N' / \partial t$ отражает кинетику сорбции в слабопроницаемом слое и может быть представлен аналогично формуле (78), где $\kappa = \kappa'$ — коэффициент распределения в этом слое.

Граничное условие на разделе двух сред (рис. 20) описывается уравнением

$$C(x, t) = C'(0, t), \quad (83)$$

где $C(x, t)$ — концентрация в основном (водоносном) пласте. Параметр W в уравнении (77), выражающий диффузионный

перенос через кровлю (подошву) водоносного пласта, записывается в виде [4 и др.]

$$W = - \frac{D_m}{m} \left(\frac{\partial C'}{\partial z} \right)_{z=0}, \quad (84)$$

причем m — мощность водоносного пласта, из которого осуществляется диффузионный вынос, а dC'/dz находится из решения уравнения (82).

Граничное условие на удаленной границе слабопроницаемого слоя задается по-разному, но чаще всего в виде

$$C'(\infty, t) = 0, \quad (85)$$

что отвечает схеме неограниченной емкости. В этом случае предполагается, что в течение расчетного периода времени диффундирующий компонент не распространяется на всю мощность прилегающего слабопроницаемого слоя. Это справедливо в интервале времени

$$t_n \leq 0,5 \frac{n'_e m_0^2}{D_m}, \quad (86)$$

где m_0 — мощность прилегающего слоя; $n'_e = n' + \kappa'$ — эффективная пористость того же слоя.

Выражение (86) является достаточно многогранным и свидетельствует, что схему неограниченной емкости можно применять при решении ряда практических задач массопереноса. Оно удовлетворяется всегда при полевых опытно-миграционных работах (опытах с индикаторами), а также и при некоторых прогнозных задачах. Например, если принять, что мощность слабопроницаемого слоя равна 5 м, $D_m = 10^{-4}$ м²/сут и $n'_e = 2$ (не очень сильно сорбируемый компонент), то получим $t \leq \leq 25\,000$ сут ≈ 70 лет. Этот срок вполне достаточен при решении таких задач, как, например, расчет зон санитарной охраны водозаборов. Отметим, что схема неограниченной емкости становится еще более применимой в тех случаях, когда загрязнители поступают на границы пласта не непрерывно (с постоянной или возрастающей концентрацией), а импульсно, эпизодично или с затухающей интенсивностью.

При более длительных расчетных периодах, когда $t > t_n$, рекомендуется применять схему сосредоточенной емкости [24, 30, 41], которая, в свою очередь, при весьма длительных периодах времени перекрывается по своим результатам с так называемой «асимптотической схемой» [30], когда диффундирующий раствор охватывает полностью слабопроницаемый слой.

Особый интерес представляет массоперенос в трещиновато-пористых водоносных горизонтах, фильтрующая среда которых состоит из основной системы водопроводящих трещин и слабопроницаемых блоков (рис. 21). Принимается обычно, что в тре-

щинах имеет место конвективный перенос (без дисперсии), а в блоках — диффузионный, хотя имеются работы [41 и др.], в которых учитывается и конвективная составляющая в блоках.

Исследования В. М. Шестакова, В. А. Мироненко и других показали, что гетерогенно-блоковая система трещиновато-пористого типа формально сводится (в математическом плане) к системе слоистых толщ, т. е. к ней тоже можно применять расчетные схемы неограниченной и сосредоточенной емкости, но с некоторыми формальными заменами. Критерий применения схемы неограниченной емкости в этом случае выражается [24] в виде

$$t_n \leq 0,02 \frac{n'_e m'_6}{D_m}, \quad (87)$$

где D_m и n'_e — коэффициент молекулярной диффузии и эффективная пористость блоков; m'_6 — некоторый усредненный размер блоков (для блоков кубической формы $m_6 = 6/S_6$; S_6 — удельная поверхность блока, $S_6 = \omega_6/V_6$; ω_6 и V_6 — поверхность и объем блока).

Данные работы [24] свидетельствуют о хорошей применимости схемы неограниченной емкости в трещиновато-пористых средах. Это подтверждается также интерпретацией ряда опытно-миграционных работ, выполненных авторами (см. гл. 4). При $t > t_n$ следует применять схему сосредоточенной емкости [24, 41].

Моделирование при исследовании миграции загрязнителей в водоносных пластах

Результаты теоретических и экспериментальных работ дают возможность выявить те расчетные модели массопереноса, которые являются основными с точки зрения практического изучения и прогноза миграции загрязнителей в водоносных пластах. Эти модели должны удовлетворять следующим требованиям: отвечать с достаточной для практики точностью реальному изменению концентрации в пласте (подтверждаемой при помощи надежных количественных критериев); быть относительно простыми. Для этого нужно: во-первых, чтобы расчетные модели отражали лишь наиболее существенные процессы, определяющие распространение загрязнителей, пренебрегая второстепенными; во-вторых, они не должны быть многопара-

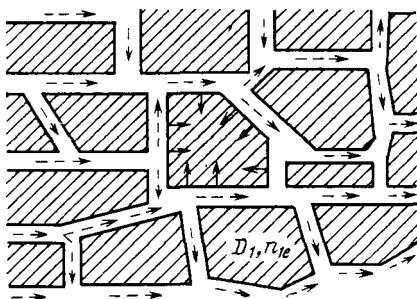
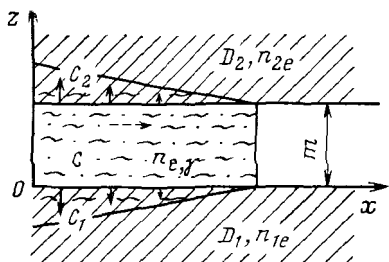


Рис. 21. Схема конвективно-диффузионного обмена в трещиновато-пористой среде.

Условные обозначения см. к рис. 20



ис. 22. Схема миграции в гетерогенной среде.

Условные обозначения см. к рис. 20

нения с учетом равновесной сорбции и необратимого поглощения. Из уравнения (77) при $D=0$ и $W=0$ с учетом (78), (79) и (81) следует:

$$-v \frac{\partial C}{\partial x} = n_e \frac{\partial C}{\partial t} + \gamma C. \quad (88)$$

Вариант В. Конвективный перенос с учетом дисперсии и обобщенной равновесной сорбции. Из (77) при $W=0$ и $N, M=0$ следует

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} = n_e \frac{\partial C}{\partial t}. \quad (89)$$

При отсутствии сорбции $n_e = n_0$.

Вариант С. Конвективный перенос с учетом дисперсии, равновесной сорбции и необратимого поглощения. Дифференциальное уравнение имеет вид

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} = n_e \frac{\partial C}{\partial t} + \gamma C. \quad (90)$$

2. Гетерогенная (макронеоднородная) фильтрационная среда (рис. 22). **Вариант Д.** Конвективный перенос (без дисперсии) с учетом равновесной сорбции в основном слое и наличия диффузии и сорбции в прилегающих слоях (блоках). Из уравнений (77) при $D=0$ и $\gamma=0$ с учетом (84) получаем

$$-v \frac{\partial C}{\partial x} = n_e \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{D_1}{m} \left(\frac{\partial C_1}{\partial z} \right)_{z=0} - \frac{D_2}{m} \left(\frac{\partial C_2}{\partial z} \right)_{z=m}, \quad (91)$$

которое при одинаковых миграционных параметрах кровли и подошвы ($D_1=D_2$) переходит в известную схему Ловерье

$$-v \frac{\partial C}{\partial x} = n_e \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{2D_1}{m} \left(\frac{\partial C_1}{\partial z} \right)_{z=0}. \quad (92)$$

Вариант Е. Конвективный перенос в условиях варианта Д при наличии необратимого поглощения в основном слое ($\gamma \neq 0$).

метрическими, т. е. не должны содержать большое число расчетных миграционных параметров.

Исходя из этих позиций, можно рекомендовать следующие расчетные модели (варианты массопереноса) при решении практических задач загрязнения подземных вод.

1. Гомогенная (макрооднородная) фильтрационная среда. **Вариант А.** Конвективный перенос по схеме поршневого вытеснения

Уравнение будет иметь вид

$$-v \frac{\partial C}{\partial x} = n_e \frac{\partial C}{\partial t} + \gamma C + \frac{D_1}{m} \left(\frac{\partial C_1}{\partial z} \right)_{z=0} - \frac{D_2}{m} \left(\frac{\partial C_2}{\partial z} \right)_{z=m}. \quad (93)$$

Обозначения в уравнениях (91)–(93) следующие (см. рис. 22): C — концентрация загрязнителя в основном слое (трещинах); C_1 , C_2 — концентрация в подошве и кровле (блоках); m — мощность основного слоя; v — скорость фильтрации в нем; $n_e \gamma$ — приведенная (эффективная) пористость и коэффициент необратимого поглощения в основном слое; D_1 , D_2 — коэффициенты молекулярной диффузии в прилегающих слоях (блоках).

Отметим, что варианты А, В и Д являются двухпараметрическими моделями массопереноса, а варианты С и Е — трехпараметрическими (имеется в виду введение обобщенного показателя поглощения в прилегающих слоях или блоках — В).

Практическая применимость расчетных моделей (88)–(93) была проанализирована по данным большого числа натурных и лабораторных миграционных опытов, проведенных как авторами, так и другими исследователями. Каждый опыт интерпретировался одновременно по всем отмеченным вариантам (А–Е) с использованием методики и вычислительной программы CORM.

МИГРАЦИЯ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ В ВОДОНОСНЫХ ПЛАСТАХ ПРИ ПЕРЕМЕННОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ ЗАГРЯЗНЕНИЯ НА ГРАНИЦАХ

В литературе описано большое число аналитических решений уравнений массопереноса в фильтрационной среде, их можно найти в обобщающих работах Н. Н. Веригина и Б. С. Шержукова [6], А. Огаты [47], Ф. М. Бочевера, Н. Н. Лапина и А. Е. Орадовской [4], В. А. Мироненко, В. Г. Румынина и В. К. Учаева [24], Ж. Фрида [43], В. М. Шестакова [41] и др. Следует отметить, что почти все существующие решения получены при постоянной концентрации исследуемого компонента на границах пласта либо в течение всего расчетного периода (непрерывное поступление «загрязнителя»), либо в течение определенного интервала времени (импульсное, пакетное поступление «загрязнителя»).

В натурных условиях, однако, нередко встречаются случаи, когда на границах пласта концентрация загрязнителей является переменной во времени. Например, при отводе сточных вод в реки концентрация вредных компонентов в реке может меняться существенно в зависимости от гидрологического режима (величины речного стока). Это же имеет место при эпизодическом сбросе сточных вод в реки, а также при нагнетании в скважины загрязненных вод с переменным содержанием загрязняющих веществ.

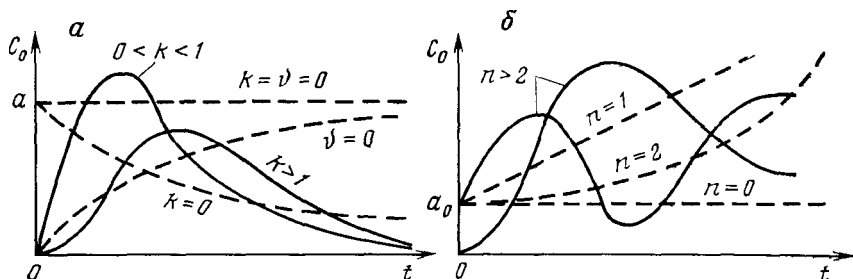


Рис. 23. Кривые изменения «входной» концентрации, рассчитанные по формулам:

а — (94); б — (95)

Исследования миграции загрязнителей в водоносных пластах при переменных граничных условиях $C_0 = f(t)$ пока немногочисленны. В работах [13, 24, 30 и др.] получено решение одномерной задачи при $C_0 = at^k e^{-vt}$ с учетом дисперсии и равновесной сорбции.

Ниже рассматривается распространение загрязнителей в однородных (гомогенных) и неоднородных (гетерогенных) водоносных пластах. Изменение концентрации на границе пласта C_0 принимается в двух довольно общих вариантах:

а) в виде функции

$$C_0(t) = at^k e^{-vt}; \quad (94)$$

б) в виде степенного полинома

$$C_0(t) = \sum_{k=0}^n a_k t^k, \quad (95)$$

где a , k , v — постоянные коэффициенты; n — число членов полинома; a_k — коэффициент полинома.

На рис. 23, а показаны кривые изменения C_0 по зависимости (94) при разных значениях коэффициентов k и v . Как отмечалось в работе [13], формула (94) не только описывает удовлетворительное прохождение асимметричной «волны загрязнения» на границе пласта, но и включает в себя ряд частных случаев практического значения, например: $k=v=0$, т. е. $C_0=a$ (постоянная концентрация на границе); $k=1$, $v=0$, т. е. $C_0=at$ (линейное изменение концентрации на границе); $k \neq 0$, $v=0$, т. е. $C_0=at^k$ (произвольное степенное изменение концентрации на границе); $k=0$, $v \neq 0$, т. е. $C_0=ae^{-vt}$ (экспоненциальное изменение концентрации на границе).

Отметим, что случай $a < 0$ следует рассматривать как прохождение аналогичной «волны опреснения» на границе, т. е. с момента $t=0$ на границе начинается уменьшение концентрации загрязнителя.

Что касается степенного полинома (95), им можно аппроксимировать практически любую кривую $C_0(t)$ в зависимости от

числа членов n (см. рис. 23, б), включая, конечно, и элементарные случаи $n=0$ ($C_0=a=\text{const}$) и $n=1$ ($C_0=a_0+a_1t$ — линейное изменение).

Коэффициенты, входящие в формулы (94) и (95), определяются на основе фактической или проектной кривой изменения концентрации загрязнителя на границе пласта. Натурные данные обрабатываются методом регрессионного анализа.

Если на границе существует какая-то начальная концентрация данного компонента, соответствующая начальной (фоновой) его концентрации в пласте (C_n), то $C_0(t)$ следует понимать как изменение (приращение или уменьшение) этой начальной концентрации, начиная с момента $t=0$.

Гомогенный водоносный горизонт

Рассмотрим конвективный перенос загрязнителей в однородном пласте при следующих условиях: а) наличие равновесной сорбции, б) наличие необратимого поглощения в тупиковых порах и «застойных зонах» порового пространства, в) наличие дисперсии (рассеивания) по фронту движения загрязнителя. Решение задачи сводится к интегрированию дифференциального уравнения (90).

Изменение концентрации на границе по зависимости (94). Граничные и начальные условия, при которых решается уравнение (90), следующие:

$$C(0, t) = C_0 = at^{\kappa} e^{-\nu t}; \quad C(\infty, t) = 0; \quad C(x, 0) = 0. \quad (96)$$

Применяя к уравнению (90) интегральное преобразование Лапласа — Карсона

$$\bar{C}(x, p) = p \int_0^{\infty} C(x, t) e^{-pt} dt, \quad (97)$$

приведем его к следующему виду

$$D \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} - v \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = (pn_e + \gamma) \bar{C} \quad (98)$$

при граничных условиях: $\bar{C}(0, p) = \bar{C}_0$; $\bar{C}(\infty, p) = 0$, где p — параметр преобразования (иногда используется также обозначение $t_p = 1/p$).

Решение уравнения (98) при указанных условиях имеет вид

$$\bar{C} = \bar{C}_0 \exp \left[\left(\frac{v}{D} - \sqrt{\left(\frac{v}{D} \right)^2 + \frac{4\gamma}{D} + \frac{4n_e}{D} p} \right) \frac{x}{2} \right], \quad (99)$$

причем

$$C_0 = \frac{ap\Gamma(1+\kappa)}{(p+\nu)^{1+\kappa}}, \quad (100)$$

где $\Gamma(1+\kappa)$ — символ «гамма-функции» от $(1+\kappa)$.

Обратное преобразование производится при помощи существующих таблиц в математических справочниках, с дальнейшим применением теоремы о свертке и введением новой переменной $y = \frac{t-\tau}{t}$. Опуская все подробности, приведем окончательное решение задачи в безразмерном виде:

$$\frac{C}{C_0} = \Lambda(\xi, \eta, \bar{\gamma}, \bar{v}, \kappa), \quad (101)$$

где C — концентрация загрязняющего компонента в точке на расстоянии x от границы в момент t от начала; C_0 — концентрация компонента на границе $C_0 = at^{\kappa} e^{-vt}$.

$$\begin{aligned} \Lambda(\xi, \eta, \bar{\gamma}, \bar{v}, \kappa) = \\ = \sqrt{\frac{\xi e^{\xi}}{4\pi\eta}} \int_0^1 (1-y)^{\kappa} \exp \left[\left(\bar{v} - \frac{\xi\eta}{4} - \bar{\gamma}\eta \right) y - \frac{\xi}{4y} \right] \frac{dy}{y \sqrt{y}}. \end{aligned} \quad (102)$$

Безразмерные аргументы функции $\Lambda(\xi, \eta, \bar{\gamma}, \bar{v}, \kappa)$ следующие:

$$\xi = \frac{vx}{D}; \quad \eta = \frac{vt}{xn_e} = \frac{t}{t_R}; \quad \bar{\gamma} = \frac{\gamma x}{v}; \quad \bar{v} = vt, \quad (103)$$

где ξ — дисперсия загрязнителя по фронту D ; η — сорбируемость его (n_e); $t_R = xn_e/v$; $\bar{\gamma}$ — необратимое поглощение (γ); \bar{v} и κ — граничные условия. Для вычислений функции $\Lambda(\xi, \eta, \bar{\gamma}, \bar{v}, \kappa)$ составлена специальная программа для ЭВМ (программа MIGРАНОМ).

Аналогичная задача, но при $\gamma=0$ (отсутствие необратимого поглощения в тупиковых порах и «застойных» зонах) исследована автором ранее [13]. Полученное в [13] решение вытекает непосредственно из (102) при $\gamma=0$. Можно показать, что из общего решения (102) и (103) при $\kappa=v=0$, т. е. если $C_0 = \text{const}$ и $\gamma=0$, получится с помощью некоторых подстановок, следующее выражение для функции $\Lambda(\xi, \eta, \bar{\gamma}, \bar{v}, \kappa)$:

$$\Lambda(\xi, \eta, 0, 0, 0) = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc} \frac{1-\eta}{2\sqrt{\eta\xi}} + e^{\xi} \operatorname{erfc} \frac{1+\eta}{2\sqrt{\eta\xi}} \right]. \quad (104)$$

Последнее соответствует широко известному фундаментальному решению, полученному Самуэлсеном, а также А. Огатой и Бенксом [47] и приводимому в разных модификациях в ряде обобщающих работ [2, 4, 6, 30 и др.].

Практический интерес представляет также рассмотрение миграции загрязнителей по схеме поршневого вытеснения, т. е.

с пренебрежением дисперсией по фронту передвижения. Допущение $D=0$ упрощает существенно расчетные зависимости, приводя их к элементарным формулам. Можно получить решение из общего уравнения (82) путем раскрытия по правилу Лопиталя получаемой неопределенности, что требует довольно громоздких выкладок. Проще получить решение, исходя из уравнения (88). По Лапласу — Карсону оно записывается в виде

$$\bar{C} = \bar{C}_0 \exp\left(-\frac{\gamma + n_p p}{v}\right). \quad (105)$$

Обратное преобразование выполняется сравнительно просто с использованием известных таблиц, данных в справочнике по математике Г. Корна и К. Корна. Приводится оно к виду

$$\frac{C}{C_0} = \left(\frac{\eta - 1}{\eta}\right)^k e^{(\bar{v}_R - \bar{v})}. \quad (106)$$

Формула (106) справедлива при $t > t_R$, т. е. в зоне за фронтом поршневого вытеснения. Ее можно записать еще так:

$$\frac{C}{C_0} = \left(\frac{t - t_R}{t}\right) e^{(\bar{v}_R - \bar{v})}. \quad (107)$$

Как видно, пренебрежение дисперсией чрезвычайно упрощает расчеты.

При $k=v=0$ ($C_0=a=\text{const}$) из (106) следует, что

$$C = a e^{-\bar{v}}. \quad (108)$$

Последнее выражение означает, что после фронта поршневого вытеснения концентрация C остается меньшей, чем на границе ($C_0=a$), из-за наличия необратимого поглощения. При его отсутствии ($\gamma=0$) следует, конечно, $C=a=C_0$, что отвечает классической схеме поршневого вытеснения.

Изменение концентрации на границе по зависимости (95). Решение исходного дифференциального уравнения (90) находят при условиях

$$C(x, 0) = 0; \quad C(\infty, t) = 0; \quad C(0, t) = C_0 = \sum_{k=0}^n a_k t^k. \quad (109)$$

Учитывая интегральное преобразование Лапласа — Карсона, приходим к уравнению (100), в котором, однако,

$$\bar{C}_0 = \sum_{k=0}^n a_k \frac{k!}{p^k}. \quad (110)$$

Переход к оригиналу осуществляется, как и в предыдущем случае. Уравнение, описывающее изменение концентрации в любой точке пласта в течение времени t , записывается в виде

$$C = \sum_{k=0}^n a_k t^k \Phi_k(\xi, \eta, \bar{\gamma}), \quad (111)$$

где a_k и n — коэффициент и число членов полинома, описывающего граничные условия (110); t — время от начала загрязнения.

Функция $\Phi_k(\xi, \eta, \bar{\gamma})$ представляется так:

$$\Phi_k(\xi, \eta, \bar{\gamma}) = \Lambda(\xi, \eta, \bar{\gamma}, 0, k), \quad (112)$$

т. е. $\Phi_k(\xi, \eta, \bar{\gamma})$ выражается через функцию $\Lambda(\xi, \eta, \bar{\gamma}, \bar{v}, k)$ при $\bar{v}=0$ и $k=0, 1, 2, \dots, n$.

Рассматривая миграцию загрязнителя по схеме поршневого вытеснения ($D=0$), решение задачи сводится к виду

$$C = e^{-\bar{\gamma}} \sum_{k=0}^n a_k (t - t_R)^k \quad (113)$$

или

$$C = e^{-\bar{\gamma}} \sum_{k=0}^n a_k t^k \left(\frac{\eta - 1}{\eta} \right)^k. \quad (114)$$

При постоянной концентрации на границе пласта (при $k=n=0$, т. е. $C_0=a_0=\text{const}$) из уравнений (114) вытекает выражение (108).

Отметим, что решения плоскопараллельных задач можно применять и в плоскорадиальных задачах, принимая приближенно следующие замены [4, 24]: вместо линейной координаты x — радиальную координату r , а вместо скорости фильтрации v — расчетную скорость $v_r = Q/\pi m r$ (Q — дебит скважины).

Гетерогенный водоносный горизонт

Рассмотрим два случая гетерогенности (макронеоднородности) водоносных горизонтов (см. рис. 20, в): слоистый горизонт, упорядоченного строения и трещиновато-пористый горизонт неупорядоченного строения.

Остановимся на схеме «неограниченной» емкости ввиду ее существенного практического значения. Будем считать, что миграция загрязнителей в гетерогенном водоносном горизонте осуществляется конвективным переносом в основном слое (в трещинах) и сопровождается равновесной сорбцией и необратимым поглощением в основном слое и диффузионным выносом и сорбцией в слабопроницаемых слоях (в блоках). При такой

постановке задачи, определение концентрации C в основном слое сводится к интегрированию дифференциального уравнения (93), причем C_1 и C_2 определяются дифференциальными уравнениями

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = \frac{D_1}{n_{e1}} \frac{\partial^2 C_1}{\partial z^2}; \quad \frac{\partial C_2}{\partial t} = \frac{D_2}{n_{e2}} \frac{\partial^2 C_2}{\partial z^2} \quad (115)$$

при начальном условии

$$C_1(z, 0) = C_2(z, 0) = C(x, 0) = 0 \quad (116)$$

и граничных условиях

$$C_1(0, t) = C_2(m, t) = C; \quad C_{1,2}(\pm \infty, t) = 0. \quad (117)$$

Изменение концентрации на границе по зависимости (94). При начальном условии $C(x, 0) = 0$ и граничных условиях $C(0, t) = C_0 = at^{\kappa} e^{-\nu t}$; $C(\infty, t) = 0$ находим решение уравнения (93).

Применение интегрального преобразования Лапласа — Карсона к уравнению (93) приводит к виду

$$-v \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = n_e p \bar{C} + \gamma \bar{C} + \frac{D_1}{m} \left(\frac{\partial C_1}{\partial z} \right)_{z=0} - \frac{D_2}{m} \left(\frac{\partial C_2}{\partial z} \right)_{z=m}, \quad (118)$$

а граничные условия трансформируются в виде

$$\bar{C}(0, p) = \bar{C}_0 = \frac{ap\Gamma(1+\kappa)}{(p+\nu)^{1+\kappa}}; \quad \bar{C}(\infty, p) = 0. \quad (119)$$

Преобразовав уравнения (115), определим производные $dC_{1,2}/dz$. Их решения по Лапласу — Карсону при условиях (116) и (117) выражаются так:

$$\bar{C}_1 = \bar{C} \exp \left[z \sqrt{\frac{pn_{e1}}{D_1}} \right]; \quad \bar{C}_2 = \bar{C} \exp \left[-(z-m) \sqrt{\frac{pn_{e2}}{D_2}} \right]. \quad (120)$$

Отсюда получаем

$$\left(\frac{\partial C_1}{\partial z} \right)_{z=0} = \bar{C} \exp \left[z \sqrt{\frac{pn_{e1}}{D_1}} \right] \sqrt{\frac{pn_{e1}}{D_1}} \Big|_{z=0} = \bar{C} \sqrt{\frac{n_{e1}p}{D_1}} \quad (121)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial C_2}{\partial z} \right)_{z=m} &= \bar{C} \exp \left[(m-z) \sqrt{\frac{pn_{e2}}{D_2}} \right] \sqrt{\frac{pn_{e2}}{D_2}} \Big|_{z=m} = \\ &= -\bar{C} \sqrt{\frac{pn_{e2}}{D_2}} p. \end{aligned} \quad (122)$$

Подставляя (121) и (122) в (118), после преобразований получим уравнение по Лапласу — Карсону

$$-\frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = \left[\frac{\gamma + p n_e}{v} + \frac{\sqrt{D_1 n_{e1}} + \sqrt{D_2 n_{e2}}}{mv} \sqrt{p} \right] \partial x. \quad (123)$$

Решение уравнения (123) при условиях (119) следующее:

$$\bar{C} = \bar{C}_0 \exp \left[-\bar{\gamma} - p t_R - \frac{Bx}{v} \sqrt{p} \right], \quad (124)$$

где

$$\bar{\gamma} = \frac{\gamma \cdot x}{v}; \quad t_R = \frac{n_e x}{v}; \quad B = \frac{\sqrt{D_1 n_{e1}} + \sqrt{D_2 n_{e2}}}{m};$$

n_{e1} , n_{e2} — эффективная пористость подошвы и кровли; B — обобщенный показатель поглощения в блоках (прилегающих слоях). Коэффициент B следует считать основным миграционным параметром гетерогенной среды.

Далее с использованием таблицы обратного преобразования и теоремы о свертке вводим новую переменную

$$y = \frac{Bx}{2v\sqrt{t - t_R - \tau}} \quad (125)$$

и после ряда преобразований получим

$$\frac{C}{C_0} = \left(\frac{\eta - 1}{\eta} \right)^k e^{(\bar{\gamma}_R - \bar{\gamma})} M(\psi; v^*, k), \quad (126)$$

где

$$\psi = \frac{Bx}{2v\sqrt{t - t_R}} = \frac{x(\sqrt{D_1 n_{e1}} + \sqrt{D_2 n_{e2}})}{2mv\sqrt{t - t_R}}; \quad v^* = v(t - t_R).$$

Безразмерная функция $M(\psi, v^*, k)$ выражается следующим образом:

$$M(\psi, v^*, k) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\psi}^{\infty} \left(1 - \frac{\psi^2}{y^2} \right)^k \exp \left(v^* \frac{\psi^2}{y^2} - y^2 \right) dy. \quad (127)$$

Для вычисления функции $M(\psi, v^*, k)$ при решении прогнозных задач миграции создана специальная программа для ЭВМ — программа MIGRANET. Решение уравнения (126) справедливо при $t > t_R$, что следует из самой постановки задачи, в которой дисперсией в основном слое можно пренебречь ($D=0$).

Полученное уравнение (126) является довольно общим. Из него можно получить частные случаи некоторых известных решений. Например, при $k=v=0$, т. е. при постоянной концентра-

ции загрязнителя на границе пласта и отсутствии необратимого поглощения, из (126) получим решение, приведенное Е. А. Орадовской в работе [4]. Полагая, что $D_1=D_2$ и $n_{e1}=n_{e2}$, получаем фундаментальное решение Ловерье [4, 30, 41]. Действительно, при $\kappa=\nu=\gamma=0$ и $D_1=D_2$, $n_{e1}=n_{e2}$ следует $M(\psi, 0, 0) = \operatorname{erfc}(\psi)$ и, следовательно,

$$\frac{C}{C_0} = \operatorname{erfc}(\psi) = \operatorname{erfc}\left(\frac{Bx}{v\sqrt{t-t_R}}\right) = \operatorname{erfc}\left[\frac{x\sqrt{D_1 n_{e1}}}{mv\sqrt{t-t_R}}\right], \quad (128)$$

что и отвечает известному решению Ловерье.

Отметим, что с учетом необратимого поглощения в основном слое уравнение (126) при $C_0=\text{const}$ ($\kappa=\nu=0$) приобретает вид

$$\frac{C}{C_0} = e^{-\bar{\nu}} \operatorname{erfc}(\psi) = e^{-\bar{\nu}} \operatorname{erfc}\left[\frac{Bx}{2v\sqrt{t-t_R}}\right]. \quad (129)$$

Если диффузия в прилегающих слоях (блоках) отсутствует, т. е. при $D_1=D_2=0$ и соответственно $B=0$, для функции $M(\psi, \nu^*, \kappa)$ получим

$$M(0, \nu^*, \kappa) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-y^2} dy = 1, \quad (130)$$

и из общего решения для гетерогенного горизонта (126) следует уравнение (106) для гомогенного изолированного горизонта (схема поршневого вытеснения).

Решение уравнения (126) и вытекающего из него (128) и (129) можно применять для расчета массопереноса в радиальном потоке, заменив x на r и скорость v на $Q/\pi m r$.

Изменение концентрации на границе по зависимости (95). При изменении граничного условия в виде степенного полинома задача решается тем же методом, но граничное условие, при котором должно решаться уравнение (118), по Лапласу — Карсону, будет иметь вид (110).

Все операции по получению решения опустим и приведем его в окончательном виде

$$C = e^{-\bar{\nu}} \sum_{\kappa=0}^h a_\kappa (t-t_R)^\kappa N_\kappa(\psi) \quad (131)$$

при

$$N_\kappa(\psi) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_\psi^\infty \left(1 - \frac{\psi^2}{y^2}\right)^\kappa e^{-y^2} dy = M(\psi, 0, \kappa).$$

Как видно, функция $N_k(\psi)$ является частным случаем функции $M(\psi, v^*, k)$ при $v^*=0$. Если $k=0$, т. е. $C_0=\text{const}$ (постоянное во времени граничное условие), из (116) следует

$$N_0(\psi) = \text{erfc}(\psi),$$

откуда получаем уравнение (130), а при $\gamma=0$ (отсутствие необратимого поглощения) и $D_1=D_2$ — решение Ловерье. Если $D_1=D_2=0$, из уравнения (131) получаем формулу (113) для однородного (изолированного) пласта.

ИНТЕРПРЕТАЦИЯ МИГРАЦИОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ МИГРАЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ЭВМ

Методический подход при интерпретации данных опытно-миграционных исследований

В результате миграционных опытов получают экспериментальные кривые $C_0(t)$ и $C(t)$ (отражающие соответственно изменение концентрации в пусковой и наблюдательной точках), которые содержат всю информацию о массопереносе исследуемого компонента при его движении в фильтрационной среде. Необходимо отметить, что при интерпретации опытно-миграционных исследований (ОМИ) практически невозможно выявить каждый из всех действующих гидродинамических и физико-химических факторов, влияющих на миграцию химических компонентов. Даже если будет составлена достаточно общая и полная математическая модель, которая бы учитывала максимальное число факторов, идентифицировать каждый миграционный параметр (константу) практически почти невозможно. Поэтому большинство методов решения обратных задач миграции основано на одномерных расчетных моделях, которые имеют соответствующие аналитические решения. Многочисленные экспериментальные исследования и тестовые сопоставительные анализы с численными решениями показывают, что одномерные модели с небольшим числом комплексных параметров (D, n_e, γ, B) описывают удовлетворительно реальные процессы миграции в фильтрационной среде.

В теории и практике гидрогеологии широкое распространение получили методы, основанные на уравнении (77). На основе аналитических решений, полученных при типовых граничных условиях (постоянная концентрация в пусковой точке, импульсное и мгновенное изменения концентрации), предложен ряд аналитических или графоаналитических методов для определения миграционных параметров [2, 4, 30, 41 и др.]. Известны методы определения миграционных параметров при переменной концентрации на границе, это операционные, предложенные в [13, 24, 27, 41 и др.], и методы статистических моментов [30, 41 и др.]. В них принимается, что массообмен между фильтра-

ционной средой и раствором протекает в равновесных условиях. Существуют методы, в которых принимается, что массообмен протекает в неравновесных условиях [2, 41 и др.]. Особое место занимают интегральные методы определения параметров массообмена в лабораторных условиях [4, 41 и др.]. Они имеют много общего с методами, использованными в хроматографии. Подробный обзор методов определения миграционных параметров в лабораторных условиях сделан в [45], где особое внимание уделено определению диффузионных параметров в пористой среде. Там же рассмотрены некоторые методы определения параметров по более сложным трех- или четырехпараметрическим моделям массопереноса.

Общим недостатком указанных методов, на наш взгляд, является то, что ведущий физико-химический процесс и его кинетика принимаются априорно. Таким образом, в ходе интерпретации опытных данных невозможно достаточно обоснованно доказать приложимость принятой модели, на основании которой решается обратная задача, и, следовательно, оценить достоверность полученных параметров. Конечно, почти во всех методах, за исключением самых простых, существуют некоторые процедуры, чаще всего графические, при помощи которых до известной степени можно оценить применимость модели, добиваясь, чтобы усредняющая прямая удовлетворительно аппроксимировала опытные точки. Эта процедура не лишена субъективных моментов, а во многих случаях допускает и чисто формальный подход при интерпретации и анализе полученных результатов. Существенно и то, что при решении обратной задачи обычно либо пренебрегают некоторыми из действующих факторов массопереноса, либо определяют параметры по характерным точкам (максимум, инфлексная точка) или по асимптотическим решениям. Это по существу не совсем корректно, так как параметры должны определяться одновременно и по всей опытной кривой, что позволяет, например, метод интегральных преобразований. Заметим, что многие методы трудоемки для вычислений вручную, и это затрудняет их применение на практике.

По нашему мнению, интерпретация данных ОМИ должна основываться на следующем подходе [27]: а) экспериментальные кривые концентраций необходимо интерпретировать последовательно, по нескольким различным моделям массопереноса не очень сложным (двух- или трехпараметрическим); б) приложимость каждой миграционной модели (варианта) и достоверность определения соответствующих миграционных параметров в каждом конкретном случае необходимо оценивать сравнительным анализом всех моделей на основе обоснованных количественных критериев; в) интерпретация по каждой из моделей (вариантов) должна быть возможна и при произвольном изменении граничного условия $C_0(t)$ (концентрации в пусковой точке); г) все вычислительные операции и обработка данных

должны выполняться на ЭВМ. При этом значительно повышается точность вычислений и облегчается внедрение методики в гидрогеологическую практику. Таким образом, появляется возможность стандартизировать интерпретацию ОМИ на базе достаточно общей и универсальной методики.

Высказанные соображения учтены в описанной ниже методике определения миграционных параметров. Вычисление параметров производится на основе использования уравнений Лапласа — Карсона, а не оригинальных (крайних) решений. Все это упрощает расчеты и унифицирует методику независимо от изменения граничного условия $C_0(t)$. Использование регрессионного анализа дает возможность получить качественную интерпретацию исходных данных в процессе решения обратной задачи и предоставляет обоснованные количественные критерии для сопоставительного анализа между расчетными вариантами массопереноса.

Методика решения обратных задач

Используем полученные общие решения (99) и (124) для массопереноса в гомогенной и гетерогенной средах при произвольном изменении граничного условия $C_0(t)$. После некоторой обработки указанных решений получаем следующие линейные (по отношению коэффициентов) уравнения:

Т а б л и ц а 7

Основные зависимости для определения миграционных параметров по различным

Вариант модели	Типы		Переменные в уравнениях регрессии		
	среды	регрессии	y	z_1	z_2
A	Гомогенная	Одномерная	$t_p \ln (\bar{C}_0/\bar{C})$	t_p	—
B			$t_p \ln (\bar{C}_0/\bar{C})$	—	$t_p \ln^2 (\bar{C}_0/\bar{C})$
C		Двухмерная	$t_p \ln (\bar{C}_0/\bar{C})$	t_p	$t_p \ln^2 (\bar{C}_0/\bar{C})$
D	Гетерогенная	Одномерная	$t_p \ln (\bar{C}_0/\bar{C})$	—	$\sqrt{t_p}$
E		Двухмерная	$t_p \ln (\bar{C}_0/\bar{C})$	t_p	$\sqrt{t_p}$

для гомогенной среды

$$t_p \ln \frac{\bar{C}_0}{\bar{C}} = \frac{n_e x}{v} + \frac{\gamma x}{v} t_p - \frac{D}{vx} \ln^2 \frac{\bar{C}_0}{C}, \quad (132)$$

для гетерогенной среды

$$t_p \ln \frac{\bar{C}_0}{\bar{C}} = \frac{n_e x}{v} + \frac{\gamma x}{v} t_p + \frac{Bx}{v} \sqrt{t_p}, \quad (133)$$

где t_p — параметр преобразования [время].

Интересно отметить, что в таком виде уравнения (132) и (133) дают ясное представление об основных факторах массопереноса в фильтрационной среде в зависимости от ее структуры. Первое слагаемое правой части данных уравнений характеризует конвективный (поршневой) перенос компонента водой, второе слагаемое — необратимые процессы поглощения (элиминирование вещества из жидкой среды), а третье — рассеивание вещества за счет диффузии в блоках (слоях) в гетерогенной среде.

Уравнения (132) и (133) дают возможность явно определить миграционные параметры без интеграционных процедур (подборов). Действительно, как видно из математической за-

моделям массопереноса

Коэффициенты в уравнениях регрессии			Миграционные параметры			
a_0	a_1	a_2	n_e	γ	D	B
$n_e x/v$	$\gamma x/v$	—	$a_0 v/x$	$a_1 v/x$	—	—
$n_e x/v$	—	D/vx	$a_0 v/x$	—	$a_2 v/x$	—
$n_e x/v$	$\gamma x/v$	D/vx	$a_0 v/x$	$a_1 v/x$	$a_2 v/x$	—
$n_e x/v$	—	Bx/v	$a_0 v/x$	—	—	$a_2 v/x$
$n_e x/v$	$\gamma x/v$	Bx/v	$a_0 v/x$	$a_1 v/x$	—	$a_2 v/x$

писи, они могут быть представлены линейным уравнением следующего вида:

$$y = a_0 + a_1 z_1 + a_2 z_2, \quad (134)$$

где функция $y = t_p \ln (\bar{C}_0 / \bar{C})$; аргумент $z_1 = t_p$, а соответственно для гомогенной среды $z_2 = t_p \ln^2 (\bar{C}_0 / \bar{C})$; для гетерогенной среды $z_2 = \sqrt{t_p}$. Если по нескольким предварительно заданным значениям t_p вычислить $\bar{C}_0(t_p)$ и $\bar{C}(t_p)$, а затем найти переменные y , z_1 и z_2 , то можно определить константы a_0 , a_1 и a_2 по методу множественной (линейной) регрессии. По найденным константам в дальнейшем легко могут быть получены миграционные параметры по следующим формулам:

для гомогенной среды

$$n_e = a_0 v / x; \quad \gamma = a_1 v / x; \quad D = a_2 v / x; \quad (135)$$

для гетерогенной среды

$$n_e = a_0 v / x; \quad \gamma = a_1 v / x; \quad B = a_2 v / x. \quad (136)$$

Из уравнений (132) и (133) вытекает несколько частных случаев массопереноса. Например, если в (132) пренебрежем дисперсией ($D=0$) или необратимым поглощением ($\gamma=0$), получим расчетные схемы соответственно при поршневом вытеснении и необратимом поглощении или при конвективном переносе с дисперсией и равновесной сорбцией. Если в (133) пренебречь необратимым поглощением в основном слое ($\gamma=0$), то получим расчетную схему, известную как схема Ловерье.

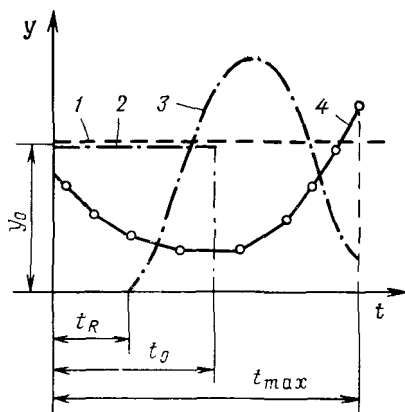
Такое упрощение расчетных схем для определения миграционных параметров имеет определенный практический смысл, так как трехпараметрические модели (132) и (133) редуцируются на более простые двухпараметрические, для которых и соответствующие решения прогнозных задач имеют более простой вид. Определение параметров по двухпараметрическим моделям аналогично трехпараметрическим с той лишь разницей, что при этом используется одномерная регрессия. В табл. 7 приведены основные зависимости для вычисления переменных и коэффициентов в уравнении (134) и определения миграционных параметров n_e , γ , D , B для пяти расчетных схем массопереноса, изложенных выше.

Алгоритм и программная реализация методики определения миграционных параметров

Построение операционно-регрессионных моделей и определение по ним миграционных параметров на основе использования экспериментальных данных, полученных при проведении лабораторных или полевых опытно-миграционных исследований, выполняется при помощи ЭВМ. Для этой цели разработан ал-

Рис. 24. Типовое изменение функции $y(t)$:

1 — постоянное значение во времени; 2 — импульсное изменение с продолжительностью t_0 ; 3 — произвольное изменение, начиная с момента t_R ; 4 — произвольное изменение в течение интервала $0-t_{\max}$



горитм и составлена специальная вычислительная программа CORM. Охарактеризуем кратко особенности построения вычислительной операционно-регрессионной модели и содержание программы CORM.

Алгоритмы построения модели и определения миграционных параметров. Изложим основные моменты методики определения миграционных параметров таким образом, чтобы полученная последовательность вычислительных операций воспринималась как обобщенный алгоритм программы для ЭВМ.

1. Ввод исходных данных ОМИ. Полученные лабораторными или опытными работами данные представляются как:

а) табличная функция $C_0(t)$, описывающая экспериментальное изменение концентрации в пусковой точке (граничном сечении);

б) табличная функция $C(t)$, описывающая экспериментальное изменение концентрации в наблюдательной точке (выходное сечение);

в) расстояние x между пусковой и наблюдательной точками;

г) средняя скорость фильтрации v между пусковой и наблюдательной точками в процессе опыта;

д) максимальная продолжительность t_{\max} наблюдений за изменением концентрации в пусковой и наблюдательной точках во время опыта;

е) время запаздывания t_R в наблюдательной точке (рис. 24).

2. Вычисление экспериментальных кривых $C_0(t)$ и $C(t)$. На рис. 24 показаны четыре основных случая оригинальной функции $y(t)$, каждый из которых имеет определенные особенности при вычислении изображения $\bar{y}(t_p)$:

а) мгновенное изменение y от 0 до y_0 , после чего сохраняется постоянное значение y в течение всего опыта:

$$y(t) = y_0 = \text{const}; \quad \bar{y}(t_p) = y_0 = \text{const}; \quad (107)$$

б) импульсное изменение y от 0 до y_0 с продолжительностью импульса t_0 :

$$y(t) = \begin{cases} y_0 & \text{при } t < t_0 \\ 0 & \text{при } t > t_0 \end{cases} \quad \bar{y}(t_p) = y_0(1 - e^{-t_0/t_p}); \quad (138)$$

в) произвольное изменение $y(t)$, начинающееся после времени запаздывания (при $t > t_R$) [14 и др.],

$$y(t) = \begin{cases} 0 & \text{при } t \leq t_R \\ y(t') & \text{при } t > t_R, \end{cases}$$

$$\bar{y}(t_p) = e^{-t_R t_p} \sum_{i=1}^{m-1} \frac{y_{i+1} - y_i}{t'_{i+1} - t'_i} (e^{-t'_i t_p} - e^{-t'_{i+1} t_p}), \quad (139)$$

где m — число табличных значений $y(t)$; $t' = t - t_R$;

г) произвольное изменение $y(t)$ для расчетного интервала наблюдения; формула для вычисления $\bar{y}(t_p)$ получается из (139) при $t_R = 0$.

Зависимости (137) и (138) описывают граничное условие миграционного опыта (экспериментальная кривая $C_0(t)$), а (139) — экспериментальную кривую $C(t)$ в наблюдательной точке. Кривая 4 (см. рис. 24) используется при произвольном изменении $C_0(t)$, а в некоторых случаях может быть приложена для описания и $C(t)$ — практически при $t_R/t_{\max} \leq 0,1$.

Для получения высокой точности значений $\bar{y}(t_p)$, вычисленных по формуле (139), как установлено автором [27] и подробно рассмотрено далее, значения t_p в (139) должны задаваться в интервале

$$0,05t_m \leq t_p \leq 0,125t_m, \quad (140)$$

где $t_m = t_{\max} - t_R$. При определении $\bar{C}_0(t_p)$ и $\bar{C}(t_p)$ обязательно должны быть использованы одни и те же значения t_p . Очевидно, что выбор t_p продиктуется кривой $C(t)$ (в наблюдательной точке), так как для нее время t_m в (140) будет меньше времени t_m для $C_0(t)$, а критерий (140) должен быть выполнен одновременно для обеих кривых. Формула (139) в том виде, как она записана, не очень удобна для вычисления на ЭВМ, так как в скобках заключена разность двух экспонент. Это может привести к нежелательной потере точности вследствие элиминирования значащих цифр меньшего порядка, которое возможно при близких значениях экспонент. Вот почему целесообразно трансформировать ее в следующий более удобный для машинного вычисления вид:

$$\bar{y}(t_p) = e^{-t_R t_p} \sum_{i=1}^{m-1} \frac{y_{i+1} - y_i}{t'_{i+1} - t'_i} \exp(-R), \quad (141)$$

где $R = (t'_{i+1}/t_p) - \ln(\exp((t'_{i+1} - t'_i)/t_p) - 1)$.

При этом указанная опасность исключается.

3. *Вычисление переменных в уравнениях регрессии для различных моделей массопереноса.* При заданных двадцати пяти значениях, изменяющихся по зависимости $t_p(j) = (0,05 + 0,003 \times$

$\times (j-1)$), $j=1, 2, \dots, 25$ и принятых значениях изображений $\bar{C}_0(t_p)$ и $\bar{C}(t_p)$, согласно формулам (137)—(139), вычисляются переменные y , z_1 и z_2 . Для этого используется уравнение регрессии (134), вид которого определяется для различных моделей массопереноса (принятые к рассмотрению расчетные схемы или варианты А, В, С, D, Е) по соответствующим зависимостям (см. табл. 7).

4. *Аппроксимация вычислительных функций $y(z_1)$, $y(z_2)$ и $y(z_1, z_2)$ и определение миграционных параметров.* Для всех расчетных моделей (см. табл. 7) вычисляются значения миграционных параметров n_e , γ , D , B ; затем — количественные значения коэффициентов корреляции R и среднего квадратичного отклонения SSD .

Сопоставительный анализ моделей выполняется на основе полученных значений R и SSD . Очевидно, что тот вариант (модель), для которого SSD имеет минимальное значение, и, соответственно, самое близкое к единице значение R , опишет точнее всего выходные данные ОМИ. Этот вариант принимается наиболее достоверным, отражающим характер миграции во время опытов.

Подобное утверждение имеет и определенное теоретическое обоснование. В уравнениях регрессии (134) переменная $y = \frac{\bar{C}_0}{C} \ln \frac{\bar{C}_0}{C}$ одинакова для всех вариантов моделей массопереноса, что дает возможность для непосредственного их сравнения в зависимости от значений SSD . Критерий SSD , как известно из теории регрессионного анализа [15 и др.], не зависит от переменных z_1 и z_2 в (134), а определяется только независимой переменной y . Следовательно, если необходимо сравнить несколько функций, которые аппроксимируют одну и ту же экспериментальную зависимость, самое качественное приближение даст та, для которой значение среднего квадратического отклонения минимально. Эти важные свойства программы CORM по диагностике процессов миграции и выбора отвечающих им моделей массопереноса использованы ниже и в гл. 5, где рассмотрены экспериментальные исследования миграции в фильтрационной среде по данным натурных опытов.

Часто в лабораторных условиях, когда подача индикатора непрерывна или импульсна (см. рис. 23), изменение концентрации в наблюдательной точке выражается безразмерной зависимостью $C^*(W^*)$, где $C^* = C/C_0$; $W^* = vt/nx$; n — общая пористость образца. Это положение не создает принципиальных затруднений при определении миграционных параметров согласно рассматриваемой методике. В этом случае интерпретируются безразмерные кривые $C_0^*(W^*)$ и $C^*(W^*)$ вместо $C_0(t)$ и $C(t)$, а полученные миграционные параметры умножаются на параметр безразмерного времени $\eta = v/nx$, чтобы получить их реальные значения в соответствующих размерностях.

Структура и описание программы CORM

Вычислительная программа для ЭВМ составлена согласно приведенному выше обобщенному алгоритму. Функциональная блок-схема показана на рис. 25.

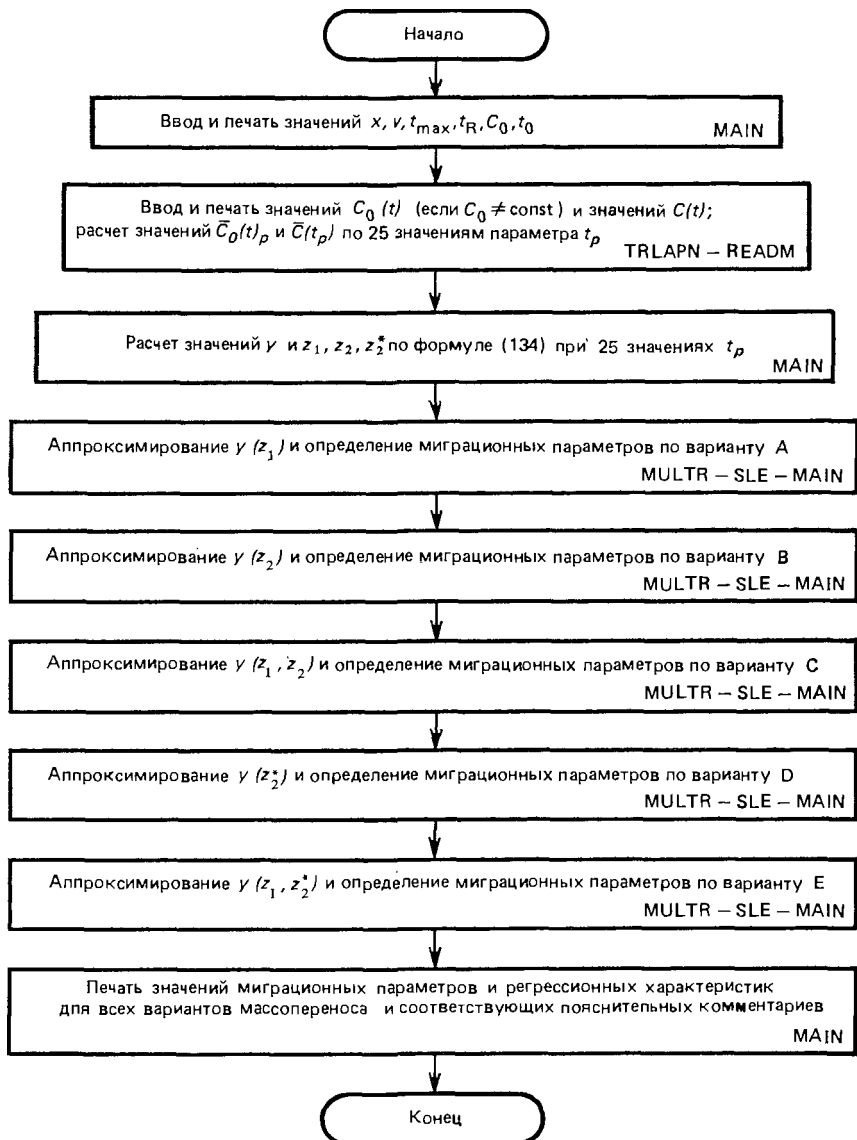


Рис. 25. Структура вычислительной программы CORM

Программа CORM разработана на алгоритмическом языке ФОРТРАН и состоит из главной программы и четырех подпрограмм.

Главная программа MAIN вводит часть входных данных, осуществляет координацию между отдельными подпрограммами, вычисляет и печатывает значения миграционных параметров, выводит на печать входные данные и все текстовые комментарии.

Подпрограмма TRLAPN вычисляет изображения экспериментальных кривых $C_0(t)$ и $C(t)$ при 25 значениях параметра t_p .

Подпрограмма MULTR аппроксимирует вычислительные функции $y(z_1)$, $y(z_2)$ или $y(z_1, z_2)$, находит коэффициенты регрессии и некоторые статистические характеристики — коэффициенты корреляции R , среднее квадратическое отклонение SSD .

Подпрограмма SLE решает систему линейных уравнений, полученных по методу наименьших квадратов. Вызывается из подпрограммы TRLAPN.

Подпрограмма READM вводит кривые $C_0(t)$ и $C(t)$ в матричном виде в TRLAPN.

Подпрограммы MULTR, READM и SLE являются модификациями одноименных программ [14]. Для достижения максимально простого ввода исходной информации и получения максимально наглядной печати конечных результатов при разработке CORM особое внимание необходимо уделять вводу-выходным процедурам, что, конечно, связано с небольшой потерей машинного времени. Результаты решения отображаются в таком виде, чтобы могли быть сразу включены в гидрогеологические отчеты в виде текстовых приложений.

Программа CORM ориентирована на машинную серию ЕС ЭВМ и может работать практически на всех моделях. Она проигрывалась многократно с теоретическими и реальными примерами. Машинное время, которое расходуется на решение одного примера, около 30 с. Программа CORM является основным модулем в пакете прикладных программ опытно-фильтрационных и миграционных исследований (ОФМИ).

Калибровка программы CORM на теоретическом примере

Программа построена на методике, использующей точные аналитические решения в изображениях Лапласа — Карсона при произвольном изменении граничного условия $C_0(t)$. Определяющий фактор, который теоретически мог бы внести известную погрешность в решение обратной задачи, связан с точностью вычисления изображений \bar{C}_0 и \bar{C} по экспериментальным кривым $C_0(t)$ и $C(t)$. Погрешность может возникнуть из-за того, что интеграл Лапласа заменяется интегралом с конечными границами (до t_{\max}) при численном интегрировании по формуле (141). Известно [41 и др.], что для осуществления

Т а б л и ц а 8

Табличное значение теоретической кривой $C(t)$

t , сут	C , мг/л	t , сут	C , мг/л
0,274	0,001	4,627	0,506
0,409	0,011	5,769	0,552
0,649	0,056	7,405	0,601
0,856	0,104	9,866	0,651
1,156	0,157	13,817	0,703
1,135	0,209	20,761	0,756
1,624	0,252	30,964	0,799
1,977	0,302	59,272	0,864
2,396	0,351	100,000	0,887
2,973	0,404	156,350	0,910
3,660	0,453		

указанной замены с допустимой погрешностью необходимо соблюдать условие $t_p/t_{\max} < 1/6$. Целесообразно одновременное выполнение условия $t_p/t_{\max} > 1130$ для того, чтобы избежать влияния начальных значений кривой $C(t)$, которые бывают не всегда достоверны. Указанная верхняя граница t_p ориентировочна и предложена из общих соображений, связанных со значениями $\exp(-t_p/t_{\max})$ в подынтегральной функции интеграла Лапласа. Нижняя граница также условна. Следовательно, определенный интерес с методологической точки зрения представляет вопрос об уточнении интервала изменения t_p при решении обратной задачи, с тем чтобы была гарантирована математическая точность операционно-регрессионной модели при интерпретации ОМИ. Единственно возможный способ для подобной калибровки CORM — интерпретация данных теоретического тестового примера, построенного на точном аналитическом решении при нескольких различных интервалах изменения t_p . Допустимый интервал изменения t_p определяется по интервалу с минимальной погрешностью в значениях вычисленных миграционных параметров.

Для уточнения интервала измерения t_p рассмотрен теоретический пример, составленный на основе точного аналитического решения массопереноса по схеме Ловерье (вариант D), которое имеет следующий вид:

$$C = C_0 \operatorname{erfc} \left(\frac{Bx}{v \sqrt{t - t_R}} \right). \quad (142)$$

Определяются комплексный параметр диффузии B в блоках (слоях) и эффективная пористость n_e . При заданных значениях $C_0 = 1$ мг/л, $B = 1$ сут^{-1/2}, $n_e = 0,1$ и $v = 1$ м/сут вычислена кривая $C(t)$ для наблюдательной точки (табл. 8), находящейся на расстоянии $x = 1$ м от пусковой, где принято самое простое граничное условие мгновенного изменения и по-

Т а б л и ц а 9

Результаты калибровки CORM

Интервал изменения		Параметры			
t_p t_m	t_p^* t_m	n_e^*	B^* , сут $^{-1/2}$	SSD , сут	R
0,065 ÷ 0,165	0,115	0,11697	1,00254	0,00073	0,99998
0,052 ÷ 0,132	0,092	0,10187	1,00456	0,00049	0,99999
0,042 ÷ 0,106	0,074	0,09317	1,05578	0,00317	0,99992
0,031 ÷ 0,079	0,055	0,08907	1,06047	0,00317	0,99989

Т а б л и ц а 10

Результаты определения миграционных параметров по теоретическому примеру

Вариант модели	Параметры					
	n_e	γ , сут $^{-1}$	D , м 2 /сут	B , сут $^{-1/2}$	SSD , сут	R
A	3,66793	0,27818	—	—	0,07813	0,99824
B	268,41382	—	62,86954	—	0,11426	0,99744
C	165,26224	0,10922	38,37666	—	0,09766	0,99781
D	0,09956	—	—	1,00484	0,00220	0,99995
E	0,10450	0,00039	—	1,00345	0,00220	0,99995

стоянной концентрации C_0 . При этом время запаздывания $t_R = 0,1$ сут, а общая продолжительность опыта составляет $t_{\max} = 156,35$ сут.

Интерпретация данных по варианту D выполнена при нескольких интервалах, каждый из которых был равномерно разбит на 25 различных значений t_p . Результаты калибровки CORM обобщены в табл. 9, где $t_m = t_{\max} - t_R = 156$ сут, а t_p^* — среднее значение t_p в интервале его изменения.

Для оценки точности работы программы CORM в зависимости от принятых интервалов изменения t_p необходимо найти погрешность решения обратной задачи по величине $\delta(n_e)$ и $\delta(B)$, используя отношение вычисленных n_e^* , B^* (см. табл. 9) и действительных $n_e = 0,1$ и $B = 1$ сут $^{-1/2}$ параметров: $\delta(n_e) = (n_e^*/n_e - 1) \cdot 100\%$; $\delta(B) = (B^*/B - 1) \cdot 100\%$.

Погрешности изменяются для $\delta(n_e)$ от -11 до 12% , для $\delta(B)$ — от $0,25$ до $0,65\%$ и свидетельствуют о том, что выбор t_p имеет более существенное значение для определения n_e , чем параметра B . Установим оптимальный вариант изменения t_p , исходя из положения, что для этого интервала должно выполняться условие $\delta(n_e) \simeq 0$. Расчеты показывают, что искомый интервал получается при $t_p^*/t_m \simeq 0,087$ и имеет границы согласно формуле (140). Из приведенного следует, что обычно принимаемая верхняя граница интервала $t_p/t_m < 1/6$ не обеспечивает

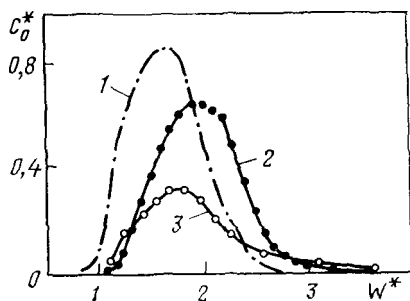


Рис. 26. Экспериментальные кривые зависимости $C^* = f(W^*)$.

Индикаторы: 1 — Cl^- ; 2 — флюоресцин; 3 — ^{131}I

достаточную точность, т. е. при вычислении изображений по формуле (141) необходимое соотношение должно быть примерно $t_p/t_m < 1/8$.

В табл. 10 обобщены результаты интерпретации данных теоретического примера с применением окончательного варианта, в котором значения t_p изменяются согласно полученному условию (140). Как видно, точность работы программы CORM высокая, так как процентные погрешности определения миграционных параметров для варианта D составляют $\delta(n_e) = -0,44\%$, $\delta(B) = 0,48\%$.

Интересно отметить, что кроме варианта D и остальные варианты массопереноса (см. табл. 10) также сравнительно хорошо интерпретируют данные тестового примера. Об этом свидетельствуют значения коэффициента корреляции R , близкие к 1. Это показывает, что каждая из моделей массопереноса в той или другой степени удовлетворительна для заданного периода t_{\max} и может быть использована для описания миграции с некоторыми своими «обобщенными параметрами», полученными в результате решения обратной задачи. Наиболее реальный физический смысл приобретает модель, для которой значение SSD минимально, т. е. модель D. Она наиболее достоверно описывает миграцию данного компонента в конкретных условиях.

Тестирование программы CORM по опубликованным примерам

В качестве тестовых примеров были выбраны хорошо проведенные (при максимально чистых условиях) индикаторные опыты в лабораторных и натурных условиях, иллюстрирующие другие методики определения миграционных параметров. Ниже приведены результаты интерпретации нескольких лабораторных и натурных индикаторных опытов, выполненных с использованием CORM.

Пример 1. Проинтерпретируем экспериментальные данные В. Кауфмана и Г. Орлоба, полученные для определения коэффициента гидродисперсии D методом моментов. Опыты проведены в лизиметрах длиной $x = 88,4$ и диаметром $91,4$ см, заполненных песком $d_{10} = 0,02$ см, $d_{60}/d_{10} = 11,2$, проницаемость — 82 мм²; $n = 0,35$. В качестве индикаторов использованы Cl -ион, флюоресцин (Фл) и радиоактивный йод (^{131}I). Подача индикаторов во входное сечение осуществлялась по схеме прямоугольного импульса (пакета). Выходные кривые (рис. 26), отражающие изменение концентраций названных индикаторов в крайнем сечении лизиметра, построены в безразмерной координатной системе $C^*(W^*)$. Для всех индикаторов $C_0^* = 1$, $t_0^* = 0,866$ (продолжи-

Таблица 11

Результаты определения миграционных параметров

Варианты моделей	Индикаторы	Миграционные потери					
		n_e	γ , мин	D , см ² /мин	B , мин ^{-1/2}	SSD , мин	R
Гомогенная среда							
A	Cl	0,40322	0,00456	—	—	0,00037	0,98500
	Фл	0,50122	0,00436	—	—	0,00047	0,99354
	¹³¹ I	0,43677	0,01604	—	—	0,00020	0,99964
B	Cl	0,46649	—	0,74232	—	0,00008	0,99691
	Фл	0,61431	—	1,03402	—	0,00024	0,99667
	¹³¹ I	0,81897	—	5,61937	—	0,01857	0,96808
C	Cl	0,45990	0,00048	0,66650	—	0,00002	0,99938
	Фл	0,56808	0,00181	0,61662	—	0,00009	0,99876
	¹³¹ I	0,44172	0,01584	0,07455	—	0,00011	0,99980
Гетерогенная среда							
D	Cl	0,37387	—	—	0,00010	0,00006	0,99752
	Фл	0,45038	—	—	0,00010	0,00014	0,99813
	¹³¹ I	0,30137	—	—	0,00051	0,00053	0,99899
E	Cl	0,30429	—0,01107	—	0,00034	0,00003	0,99876
	Фл	0,38910	—0,00533	—	0,00022	0,00010	0,99866
	¹³¹ I	0,42874	0,01509	—	0,00003	0,00017	0,99968

тельность импульса). Другие данные необходимые для интерпретации опытов по программе CORM приведены ниже.

Индикатор	v , см/мин	t_R^*	t_{max}^*	η , мин ⁻¹
Cl-ион	0,8222	0,80	2,85	0,02657
Фл	0,678	0,80	3,89	0,02191
¹³¹ I	0,960	0,86	4,08	0,03103

Анализ полученных на ЭВМ результатов (табл. 11) показывает, что для всех индикаторов самое лучшее приближение получается по модели варианта С (конвективный массоперенос в гомогенной среде с учетом дисперсии, равновесной сорбции и необратимого поглощения). Миграция всех индикаторов сопровождается процессами необратимого поглощения, которые наиболее интенсивно протекают для ¹³¹I. Существенно также, что для всех трех индикаторов n_e превышает общую пористость ($n=0,35$). Это указывает на то, что данные индикаторы вряд ли могут считаться идеальными и давать возможность определения (в чистом виде) активной пористости среды.

Необходимо отметить, что все остальные модели массопереноса, за исключением варианта В для ¹³¹I, также удовлетворительно интерпретируют экспериментальные данные индикаторных опытов. Этот факт показывает, что нежелательно вкладывать слишком конкретный физико-химический смысл в отдельные миграционные параметры. Более правильно их рассматривать в качестве некоторых обобщенных параметров конкретных математических

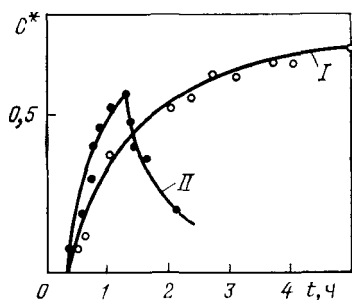


Рис. 27. Экспериментальные кривые $C^*f(t)$ при непрерывном (I) и пакетном (II) запусках индикатора

тотоду моментов (при аналогичной модели массопереноса) в работе [48]. Из табл. 12 видно, что величины D по [48] превышают примерно в 3 раза аналогичные значения, полученные по CORM. Это можно объяснить тем, что при интерпретации данных индикаторных опытов в [48] авторы пренебрегли обменными процессами и приняли априори, что эффективная пористость среды равна общей пористости ($n=0,35$). Таким образом, завышенные значения D формально компенсируют роль физико-химических процессов, которые не были приняты во внимание при интерпретации данных опыта.

Пример 2. Проведем интерпретацию с помощью программы CORM результатов опытного кустового налива, который был выполнен в обводненных мелах вблизи хвоста водохранилищ Лебедянского горно-обогатительного комбината [24]. В качестве центральной использовалась нагнетательная скважина и три наблюдательных на расстояниях 7, 15 и 16 м. Индикаторы вводились после установления стационарного режима, при расходе $225 \text{ м}^3/\text{сут}$. На первом этапе опыта был проведен непрерывный (в течение 10 ч) запуск раствора хлора с концентрацией 500 мг/л , а на втором (после достаточно длительного налива в пласт чистой воды) — пакетный запуск индикатора, длительностью $t_0=1 \text{ ч}$. Регистрация индикатора велась по всем наблюдательным скважинам. Полученные по экспериментальным точкам кривые для одной из наблюдательных скважин, находящейся на расстоянии 15 м, приведены на рис. 27. Средняя скорость фильтрации между пусковой и наблюдательной точками составляла $v=0,066 \text{ м/ч}$, расстояние $x=15 \text{ м}$. Данные индикаторного опыта интерпретированы с помощью CORM. При этом было принято $t_R=0,03 \text{ ч}$, $t_{\max}=8 \text{ ч}$ для непрерывного ввода и $t_R=0,33 \text{ ч}$, $t_{\max}=2,2 \text{ ч}$ — для импульсного (пакетного).

Результаты полученного решения ЭВМ обобщены в табл. 13. Они показывают приблизительную равноценность вариантов D (модели гетерогенной и гомогенной среды), что определяется из анализа значений SSD. Однако мо-

делей, которые удовлетворительно могли бы описать кривую $C(t)$, если будет решена прогнозная задача при тех же граничных и гидрогеологических условиях, при которых проведен эксперимент.

Интересно заметить, что вариант D значительно лучше отвечает экспериментальным данным, чем В. Это положение мы затрудняемся объяснить. Опыты проведены в лабораторных условиях, где нельзя говорить о блоках или разделяющих слоях. Очевидно, это связано с процессами необратимого поглощения и влиянием тупиковых пор, которые более точно учитываются моделью D (через коэффициент B), чем В (через коэффициент γ).

В табл. 12 для трех индикаторов приведено сопоставление полученных по программе значений коэффициентов дисперсии D (вариант В) и вычисленных по ме-

Т а б л и ц а 12

Значение D по [48] и CORM (см. табл. 11)

Индикатор	$D, \text{ см}^2/\text{с}$	
	по [48]	по CORM
Cl	0,043	0,012
Фл	0,056	0,017
^{181}I	0,249	0,094

Таблица 13

Результаты определения миграционных параметров

Варианты моделей	Индикаторы (этап запу- ска)	Миграционные параметры					
		n_e	γ , мин	D , см ² /мин	B , мин ^{-1/2}	SSD , мин	R
Гомогенная среда							
A	Cl (I)	0,00353	0,00316	—	—	0,00156	0,99799
	Cl (II)	0,00201	0,00553	—	—	0,00035	0,99731
B	Cl (I)	0,01348	—	0,69688	—	0,00613	0,99205
	Cl (II)	0,00494	—	0,16464	—	0,00079	0,99391
C	Cl (I)	0,00682	0,00213	0,23127	—	0,00027	0,99965
	Cl (II)	0,00318	0,00334	0,06653	—	0,00001	0,99996
Гетерогенная среда							
D	Cl (I)	0,00146	—	—	0,00516	0,00005	0,99994
	Cl (II)	0,00116	—	—	0,00437	0,00001	0,99996
E	Cl (I)	0,00124	—0,00033	—	0,00570	0,00005	0,99994
	Cl (II)	0,00094	—0,00143	—	0,00549	0,00003	0,99979

дели различаются значениями миграционных параметров. Более вероятным можно считать вариант D, характеризующий миграцию Cl-иона в среде с двойной пористостью, так как в нем менее выражена вариация в значениях миграционных параметров при непрерывном и импульсном запусках.

Следует отметить, что значения пористости ($n_0=0,001$), определенные в [24], при импульсном вводе индикатора в общем совпадают с полученными по CORM для той же модели ($n_e=0,0012$). При непрерывном вводе индикатора они различаются почти в 3 раза — $n_0=0,003$, по [24], против $n_e=0,0015$ (см. табл. 13).

Приведенные примеры подтверждают хорошую работоспособность разработанной программы CORM и подчеркивают ее преимущества: возможность идентифицировать результаты опыта, пользуясь несколькими моделями массопереноса; вести их сравнительный анализ по количественным критериям SSD и R ; определять миграционные параметры с использованием всех точек экспериментальной кривой.

Однако эти же примеры свидетельствуют о том, что идентифицировать опытные данные с расчетными схемами массопереноса весьма сложно. Часто бывает затруднительно установить ведущую модель наблюдаемого массопереноса и соответствующие ему параметры. Все это приводит к серьезным трудностям в прогнозных оценках массопереноса, подчеркивает пока еще низкую достоверность определяемых параметров массопереноса и доказывает необходимость при обработке ОМИ проводить содержательный и всесторонний гидрогеологический анализ, проверяя полученные результаты на непротиворечивость всей имеющейся гидрогеологической информации.

ЛАБОРАТОРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ МИГРАЦИИ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ

Количественное прогнозирование загрязнения подземных вод требует знания физико-химических и гидродинамических параметров, характеризующих миграцию загрязненных вод в водоносных пластах. Процессы гидродинамической дисперсии изучены сравнительно хорошо А. Е. Орадовской, Д. Роза и др. [2, 4, 6, 9, 41, 43, 47], но физико-химические процессы и, прежде всего, характер взаимодействия подземных вод с горными породами исследованы недостаточно. Настоящая глава обобщает результаты экспериментов, проведенных с целью изучения процессов, обуславливающих поведение некоторых самых распространенных загрязнителей (тяжелых металлов, пестицидов, органических комплексобразующих веществ) при их миграции в водной среде, и определения физико-химических и гидродинамических (их часто называют миграционными) параметров. На основании анализов наших результатов и отчасти исследований других авторов рассмотрен вопрос о выборе индикатора при проведении миграционных опытов.

МОДЕЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ГЛАВНЫХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Модельные исследования для элиминирования пестицидов

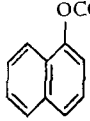
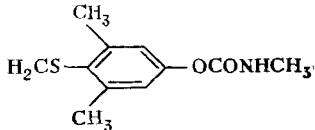
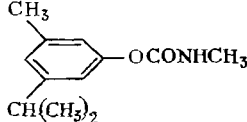
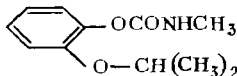
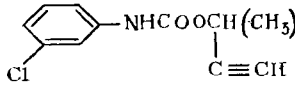

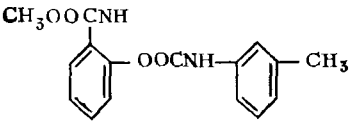

Из большого класса органических веществ, попадающих в подземные воды вследствие деятельности человека, особенно при небольшой мощности зоны аэрации, были выбраны пестициды. Они составляют не более 1 % от органического загрязнения вод, но из-за их токсичности в последние годы уделяется все большее внимание их поведению и миграции в водной среде. Основные процессы, определяющие миграционную подвижность пестицидов, — гидролитический и окислительный распад и сорбция. Указанные процессы можно отнести к небιοгеохимическому элиминированию (см. гл. 1).

Модельные исследования пестицидов проведены с производными карбаминовой кислоты (табл. 14), которые благодаря своему широкому биологическому спектру находят применение не только в сельском хозяйстве (как гербициды, инсектициды, фунгициды и пр.), но и в фармацевтической промышленности. Пестициды карбаминовой группы охарактеризованы в литературе как сравнительно нестойкие в почве и растениях вещества [11]. Исследование их поведения в подземных водах выполнено газовой хроматографией в сочетании с масс-спектрометрией.

Как показано в гл. 1, гидролиз является важным процессом удаления из подземных вод органических веществ и, в частно-

Таблица 14

Характеристика исследованных пестицидов

Пестициды	Формула	Молекулярная масса, г/моль	Растворимость в H ₂ O, мг/л
Инсектициды			
Севин (карбарил)		201,2	920
Мезурол		225,2	22
Промекарб		207,3	98
Пропоксур (байгон)		209,2	1590
Гербициды			
Хлорбуфам		223,7	540
Хлорпрофам		213,7	80
Феимедифам		300,2	10
Профам		179,2	100

сти, пестицидов. Поскольку пестициды имеют широкое практическое применение, возникла необходимость изучения их кинетических характеристик. Это связано прежде всего с интенсивной миграцией пестицидов в подземных водах и возможными биогеохимическими процессами распада и превращения. Некоторые сведения о гидролизе пестицидов карбаминовой группы изло-

жены И. Кристенсеном, но они относятся прежде всего к сильно кислым или сильно щелочным растворам. Для гидрохимически важных значений рН между 5,5 и 8,5 некоторые данные можно найти только для севина и пропоксура в работе О. Аби и Э. Диба.

Мы использовали газовый хроматограф «Хевлетт Паккард 5750» приблизительно с 2-метровой стеклянной колонкой, наполненной 6 %-ным SE-30 (метилсиликоновый эластомер, неподвижная фаза) на хромосорбе GAW-DMCS—80—100 меш. Температура испарителя, колонки и детектора электронного захвата составляла 280 °С. Газоноситель был отрегулирован так, что линдан (использованный в качестве внутреннего стандарта) имел время удерживания около 6,5 мин. Пестициды в количествах около $5 \cdot 10^{-7}$ М растворяли в 1 мл ацетона и потом переводили в 1 л буферного раствора с рН соответственно 5,4; 6,8; 8,4 (состав использованной воды такой же, как при миграционных опытах II серии). При постоянной температуре (18 °С) через соответствующее время брали аликвотные части по 25 мл, из которых пестициды экстрагировали дихлорметаном в присутствии Na_2SO_4 , и, как описано в работе [46], снимали газовые хроматограммы.

Профам, хлорпрофам и хлорбуфам не подверглись при всех значениях рН гидролитическому распаду. Подобным по стойкости (персистентности) было поведение и инсектицидов (севина, мезуrolа, пропоксура и промекарба) при рН 5,4 в течение 200 дней. При рН 6,8 отмечалось увеличение значения скоростной константы гидролиза. В этом случае наиболее нестойким оказывается севин. Еще больше увеличивалась скорость гидролиза при рН 8,4 (малая растворимость фенмедифама в воде и низкая чувствительность его газохроматографического определения не позволили получить достоверные результаты).

Значения скоростной константы гидролиза K_r и время полураспада $\tau_{1/2}$, вычисленные по уравнениям

$$\ln \frac{C_0}{C} = K_r t, \quad (143)$$

$$\tau_{1/2} = \frac{\ln 2}{K_r}, \quad (144)$$

которые являются решением дифференциального уравнения (1), даны в табл. 15. При постоянном рН, вследствие высокой концентрации буферного раствора, реакция проявляется первым порядком.

На основании масс-спектров гидролизных продуктов было установлено, что скорость самой медленной стадии связана с получением изоцианата и α -нафтола из севина, О-изопропилфенола из пропоксура, 1-изопропил — 5-метилфенола из промекарба и 4-метилтио — 3,5-диметилфенола из мезуrolа.

Устойчивость исследованных гербицидов к гидролитическому

Кинетические параметры гидролитического распада пестицидов

Пестициды	pH	$K_r, \text{мин}^{-1}$	$\tau_{1/2}, \text{днн}$
Севин	6,8	$4,0 \cdot 10^{-7}$	20
	8,4	$1,6 \cdot 10^{-5}$	0,5
Пропоксур	6,8	$1,3 \cdot 10^{-7}$	63,5
	8,4	$5,0 \cdot 10^{-6}$	1,6
Мезурол	6,8	$6,4 \cdot 10^{-8}$	125
	8,4	$2,6 \cdot 10^{-6}$	31
Промекарб	6,8	$5,6 \cdot 10^{-8}$	122

распаду при соответствующих значениях pH и температуры привело к необходимости изучить и другие процессы, которые могут быть ведущими при миграции пестицидов.

Исследование окислительного распада было проведено озонированием этих же веществ (генератор озона «Фишер») и с помощью газового хроматографа — масс-спектрометра «Хевлетт Паккард 5990» с капиллярной колонкой, наполненной карбоваксом 20М (полиэтиленгликоль, неподвижная фаза), длиной около 4 м. Температура испарителя 220 °С. Температура термостата колонок через 4 мин после ввода пробы составила 100 °С, затем повышалась со скоростью 10 °С в 1 мин и достигла 200 °С; скорость потока газоносителя 2 мл/мин. Концентрации пестицидов были (3—6) 10^{-7} моль/л, а калибрование и точное измерение проводились по методике, описанной в работе Г. Майера. Соединения, экстрагированные дихлорметаном, а в некоторых случаях ацетоуксусным эфиром, метилировали диазометаном.

Поведение пестицидов исследованных при гидролизе отличаются от пестицидов исследованных при pH 7,7 подвергающихся в разной степени окислительному распаду в зависимости от дозы озона C_{O_3} и длительности контактного времени t_k . Самыми чувствительными по отношению к окислительным процессам оказались севин и мезурол ($C_{O_3} \leq 1$ мг/л; $t_k \leq 1$ мин) и отчасти хлорбуфам ($C_{O_3} \approx 5$ мг/л; $t_k \leq 10$ мин). Для распада остальных пестицидов необходимы сравнительно большие дозы озона (примерно 10 мг/л) и длительное контактное время (около 30 мин). Была осуществлена попытка идентифицировать продукты окисления изменением экспериментальных условий при газохроматографических — масс-спектрометрических исследованиях. Это оказалось возможным не во всех случаях. Так, например, у мезурола появился широкий, плохо выраженный газохроматографический пик. Поэтому масс-спектр (рис. 28) содержит масс-пики всех окислительных продуктов тио-группы (сульфоны), получающиеся после соответствующего отщепления алкоголя. На рис. 29 дана схема первой фазы окислительного распада мезурола, на которой фрагментацию присутствующих продуктов можно обоб-

новать масс-спектром (см. рис. 28). У севина при газохроматографическом разделении получаются два пика (рис. 30); I пик соответствует соединению с хиноидной структурой, II пик, по всей вероятности, можно приурочить к соединению с еще одним атомом кислорода (1, 3, 4-тригидроокси-— 3, 4-дигидро-нафталин). Если учесть масс-спектры после дериватизирования, схему окислительного распада севина можно представить, как это показано на рис. 31. Полученные продукты нетоксичны или иногда менее токсичны, чем начальные вещества. Интересно отметить, что предполагаемые механизмы распада совпадают с описанными в работе Ф. Гюнтера и И. Гюнтера механизмами распада почв и растений. В меньшей мере совпадают результаты об устойчивости по отношению к гидролизу и окислению. Чтобы проверить, в какой степени сорбция может являться ведущим процессом при элиминировании пестицидов из подземных вод, были проведены модельные опыты в статических условиях. Для опытов использовали пески из террасы р. Исар (см. табл. 19) и гуминовые вещества. Моделировались условия в зонах насыщения и аэрации.

Гуминовые вещества представляют темно-коричневые аморфные субстанции, которые получаются в основном в почве в результате химических и биологических превращений вымерших растений. Обычно при молекулярной массе между 10 000 и 100 000 в них отмечаются многочисленные и разные функциональные группы, как, например, алкогольные и фенольные гидроксильные группы, а также карбоксильные. Эту часть гуминовых веществ, которая при нормальных условиях растворима в природных водах, обычно называют фульвокислотами, а нерастворимая составная часть (гуминовые кислоты) находится в форме суспензированных (или коллоидно-диспергированных) частиц с хорошо выраженными сорбционными качествами. Для экспериментов брали 100 мг гуминовых веществ фирмы «Рот» и смешивали с 1 л воды (в состав воды входили пестициды). Через два дня к раствору добавили (2—5) 10^{-7} молей пестицидов, растворенных в 1 л ацетона. Этот раствор встряхивали в течение 10 ч — время, как показали наши исследования, достаточное для установления сорбционного равновесия. Потом проводились фильтрование, экстрагирование и определялись коэффициенты распределения пестицидов (табл. 16). Аналогично были проведены опыты с песком, но отношение твердой фазы к жидкой составляло 1:100. Данные обрабатывались по формуле

$$K_{\text{стат}} = \left(\frac{1}{C} - 1 \right) \frac{V}{m}, \quad (145)$$

где $K_{\text{стат}}$ — коэффициент распределения в статических условиях; $C = C/C_0$ — соотношение между концентрациями сорбируемого вещества в растворе при равновесии и в начале опыта; V — объем исследованного раствора; m — масса сорбента.

Т а б л и ц а 16

Коэффициенты распределения $\chi_{\text{стат}}$ пестицидов

Пестициды	$\chi_{\text{стат}}$ л/кг	
	гуминовые вещества	пески
Пропоскур	1220,1	0,18
Хлорпрофам	2303,1	0,43
Хлорбуфам	1749,5	1,17
Севин	2589,7	0,05
Мезуrol	3812,15	0,0
Профам	5850,7	0,05
Промекарб	6983,0	0,05

Как видно из табл. 16, между коэффициентами распределения в зависимости от химического состава сорбента значительная разница, т. е. недостаточно проявилась зависимость $\chi_{\text{стат}}$ от растворимости пестицидов в воде.

Достаточно высокие значения коэффициентов распределения гуминовых веществ показывают, что при миграции загрязнителей-пестицидов через зону аэрации сорбция может играть существенную роль вследствие наличия разных полуфункциональных групп и присутствующих в этой зоне углеродсодержащих субстанций, т. е. возможен процесс хемосорбции. Оказавшись в зоне насыщения, вследствие малой мощности почвенного покрова (или зоны аэрации) пестициды карбаминевой группы (главным образом инсектициды) элиминируются из подземных вод прежде всего вследствие протекания процесса гидролитического распада. Проведение аналогичных экспериментов в конкретных гидрогеологических и гидрогеохимических условиях (особенно в зависимости от pH) позволит оценить, в каких случаях и через какой период времени пестициды будут элиминированы из подземных вод, и даст возможность определить значение χ . При этом всегда будет некоторый запас, потому что в наших исследованиях мы остановились только на физико-химических процессах, не учитывая параллельно действующие и ускоряющие элиминирование биохимические процессы.

Модельные исследования с ионами тяжелых металлов в статических условиях

Комплексообразование является, как правило, одним из самых главных процессов, ускоряющих миграцию тяжелых металлов в подземных водах. Ниже описаны результаты исследований взаимодействия ионов тяжелых металлов (Mn^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Cd^{2+} , Pb^{2+}) с комплексообразующими веществами естественного и искусственного (антропогенного) происхождения. Использовался метод обычной дифференциальной импульсной

полярграфии (ДИП) и дифференциальной инверсионной импульсной полярграфии (ДИИП). Кроме того, определены коэффициенты распределения, характеризующие сорбцию в статических условиях. С помощью вольтамперметрических характеристик по вышеупомянутым методикам возможно разделить растворенные ионы металлов на лабильные, инертные и свободные (гидратированные). При строгом соблюдении определенных условий прямым и обратным титрованием согласно методике, изложенной О. Шеа и И. Менси, были определены и условные константы устойчивости (константы образования) для некоторых, слабо изученных комплексообразующих процессов.

Для вольтамперметрических исследований использован полярграфический анализатор PAR 174 А со стендом PAR 303 и автоматическим контрольным блоком PAR 315 А. Растворы исследованных ионов металлов, комплексообразующих веществ (сорбит, лимонная кислота, триполифосфат натрия — ТПФ, нитрилтриуксусная кислота—НТА, этилендиаминтетрауксусная кислота — ЭДТА), так же как и другие реагенты, были фирмы «Мерк». Растворимые гуминовые вещества (фульвокислоты) выделялись в соответствии с методикой, описанной в [44]. Значения потенциала предварительного электролиза (накопления) и другие характеристики в опытах были заданы в соответствии с рекомендациями, изложенными в 1980 г. Ф. Выдрой, К. Штуликом, Э. Юлаковой, в 1981 г. Б. Великовым. Постоянными поддерживались: амплитуда импульса — 25 мВ, скорость сканирования — 5 мВ/с, время предварительного электролиза на ДИИП — 60 с и кондиционирования перед анодным процессом — 15 с. Использовались растворы с постоянной ионной силой (0,2 М NaOOCCH₃), а pH поддерживался в диапазоне $7,7 \pm 0,1$ при объеме пробы 10 мл.

Для моделирования миграционной обстановки в подземных водах проводились исследования взаимодействия ионов тяжелых металлов низких концентраций ($5 \cdot 10^{-7}$ — $5 \cdot 10^{-6}$ М) с вышеуказанными комплексообразующими веществами. Проба даже из незагрязненных вод представляет собой сложную систему, состоящую из свободных (гидратированных) ионов металлов (М), неорганических и органических лигандов (L) и инертных и лабильных комплексов. Титрование этой пробы каким-либо комплексообразующим веществом (прямое титрование) или ионом металла определенной концентрации (обратное титрование) позволяет отделить, с одной стороны, гидратированные ионы металлов от лабильных комплексов металлов по Δi_M (изменение силы анодного тока растворения металла из амальгамы), с другой — гидратированные и закомплексованные ионы металлов от инертных комплексов металлов по ΔE_n (изменение потенциала, при котором появляется соответствующий пик), а также аквакомплексы от лабильных комплексов металлов по Δi_M и ΔE_n и т. д.

Типичные дифференциальные инверсионные импульсные полярграммы при прямом титровании ионов металлов с лиган-

Рис. 32. Типичные дифференциальные импульсные инверсионные полярограммы при титровании иона металла лигандом и образовании инертных комплексов при $i_M = 40$ нА, $E_n = 0,104$ В

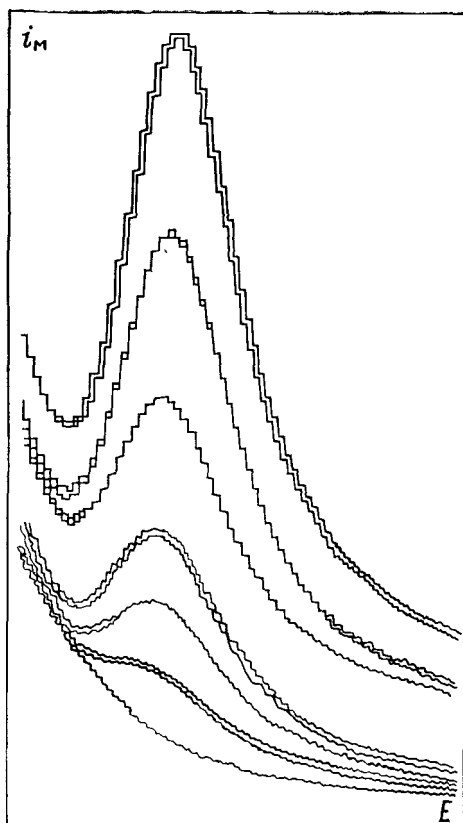
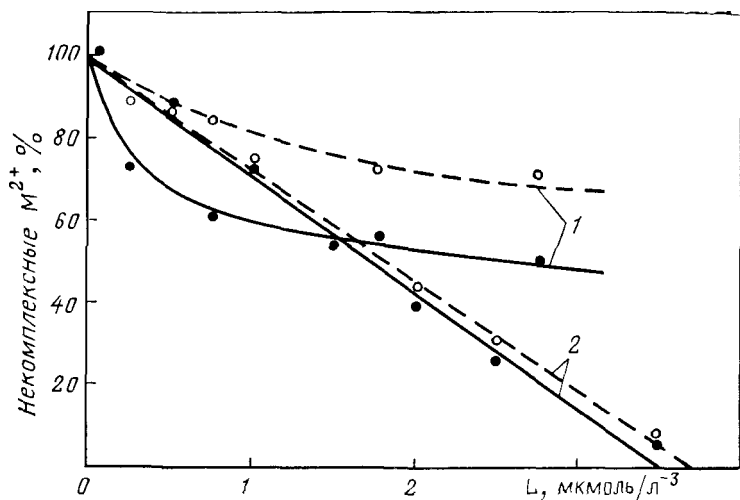


Рис. 33. Кривые титрования ионов тяжелых металлов (M) комплексообразующими веществами L и образования инертных (1) и лабильных (2) комплексов.

(Сплошными линиями показаны кривые, полученные по ДИИП, пунктирными — по ДИП)



Т а б л и ц а 17

Условные константы устойчивости β' некоторых ионов тяжелых металлов для двух хелатообразующих лигандов

Лиганды	β'					
	Mn^{2+}	Ni^{2+}	Zn^{2+}	Cd^{2+}	Pb^{2+}	Cu^{2+}
НТА	$1,65 \cdot 10^7$	$7,83 \cdot 10^8$	$8,23 \cdot 10^9$	$9,39 \cdot 10^7$	$2,44 \cdot 10^8$	$6,48 \cdot 10^{10}$
Фульвокислоты	$5,41 \cdot 10^3$	$4,85 \cdot 10^4$	$2,82 \cdot 10^3$	$2,18 \cdot 10^3$	$4,34 \cdot 10^3$	$6,32 \cdot 10^6$

дами, образующими инертные комплексы (например, все ионы тяжелых металлов с ЭДТА, Cu^{2+} с НТА и фульвокислотами и т. д.), показаны на рис. 32, а при образовании лабильных комплексов (например, Pb^{2+} с НТА, Zn^{2+} и Cd^{2+} с фульвокислотами и т. д.) — на рис. 33. Сравнивая кривые, полученные по ДИИП и ДИП, установили незначительную роль кинетического фактора (отношение скорости диссоциации комплексов к вычисляемой условной константе устойчивости). Поэтому далее мы будем использовать результаты, полученные по более чувствительной ДИИП.

Остановимся прежде всего на образовании хелатных комплексов, что характерно, например, для НТА, ЭДТА, фульвокислот и других лигандов, встречаемых в подземных водах, для которых $M:L=1:1$. В этом случае для условной константы устойчивости можно написать

$$\beta' = \frac{[ML^{(n-2)-}]}{[M^{2+}][L^{n-1}]} \quad (146)$$

Если концентрация гидратированного иона металла (и его предполагаемых лабильных комплексов) становится равной концентрации связанного в инертном комплексе (хелате) иона металла (50 %-ная закомплексованность), то тогда

$$\beta' = \frac{1}{[L^{n-1}]} = \frac{K_{1n} + [H^+]}{\{[H_nL]_{\text{сум}} - [ML^{(n-2)-}]\} K_{1n}}, \quad (147)$$

где K_{1n} — константа, характеризующая отделение n -го протона; $[H_nL]_{\text{сум}}$ — концентрация протонированного лиганда; $[ML^{(n-2)-}]$ — концентрации комплекса иона металла и депротонированного лиганда по формуле (146).

Выражение (147) сложнее, чем использованное в [44], но введенная нами коррекция для оценки протонированных и непротонированных форм лигандов повышает точность вычисления констант устойчивости. Предварительная оценка величины концентрации растворенных гуминовых веществ делается, как в [44]; при этом для K_{1n} берется $1 \cdot 10^{-9}$.

Если вследствие лабильности образованных комплексов не достигается 50 %-ной закомплексованности иона данного металла, а получается некоторая более низкая величина, то выра-

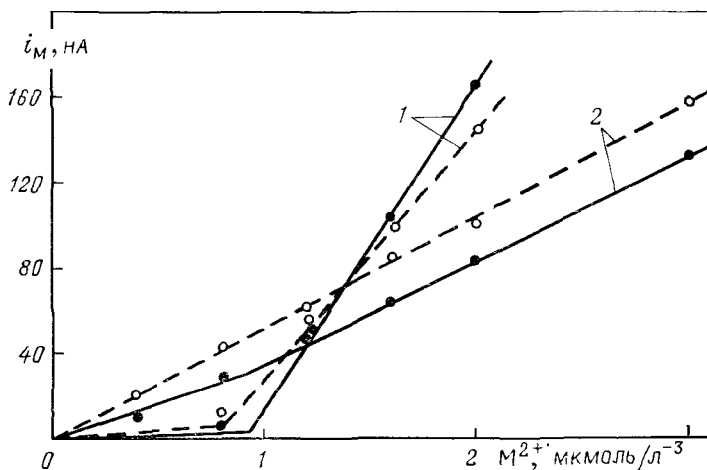
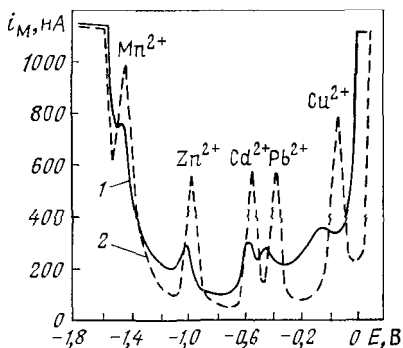


Рис. 34. Кривые титрования водных проб, содержащих комплексообразующие вещества, ионами тяжелых металлов при образовании инертных (1) и лабильных (2) комплексов.

Сплошными линиями показаны кривые, полученные по ДИП, пунктирными — по ДИИП

Рис. 35. Дифференциальные импульсные инверсионные полярограммы системы Mn^{2+} , Zn^{2+} , Cd^{2+} , Pb^{2+} , Cu^{2+} в 0,2 М $NaOOCCH_3$ в присутствии (1) и отсутствии (2) растворимых гуминовых веществ (фульвокислот)



жение (147) надо умножить на число меньше 1. В табл. 17 обобщены вычисленные условные константы устойчивости разных ионов металлов для лигандов антропогенного (НТА) и естественного (фульвокислоты) происхождения. При титровании водной пробы, содержащей комплексообразующее вещество с ионом металла, получают кривые, показанные на рис. 34. Константы устойчивости, вычисленные по М. Шуману, Г. Вудварду, дали весьма различные результаты, даже для лигандов с известными из литературы высокими константами стойкости (см. рис. 34, кривые 1), а при низких константах образования определение конечной точки очень неточно (см. рис. 34, кривые 2), и, следовательно, позволяет дать только качественную интерпретацию. Вследствие необратимости большинства электрохимических реакций с исследованными ионами металлов не был использован метод разности потенциалов ΔE_{II} .

ДИИП, как и ДИП, позволяет одновременное полиэлементное определение, и поэтому мы использовали этот метод для

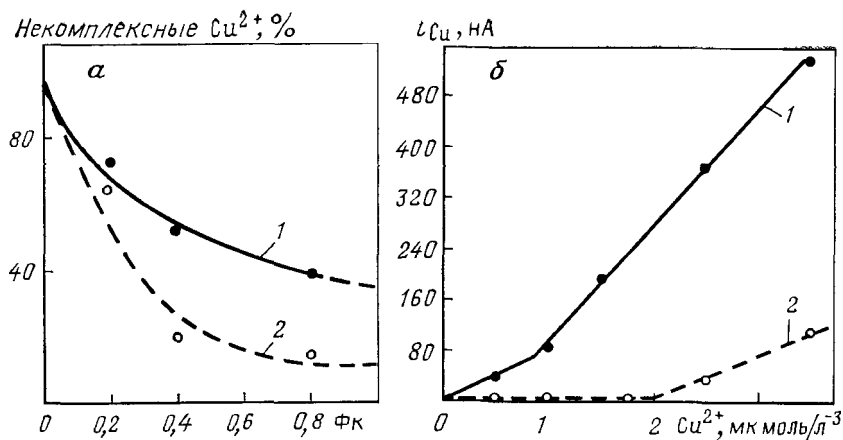


Рис. 36. Кривые прямого (а) и обратного (б) титрования системы ионы меди — фульвокислоты при разных потенциалах предварительного электролиза.

Значения потенциалов, В: 1—(−1,8); 2—(−0,25)

исследования процессов хелатообразования в присутствии некоторых ионов металлов и растворимого гуминового вещества. На рис. 35 показаны полярограммы для ионов металлов, взятых с различными концентрациями (в мкмоль/л): Mn^{2+} 5, Zn^{2+} 0,2, Cd^{2+} 0,2, Pb^{2+} 0,3, Cu^{2+} 0,1 при pH 7,8 и с использованием электродов Ag/AgCl . Хотя потенциал предварительного электролиза весьма низкий (−1,80 В) для данного типа подземных вод, но и здесь возможно применение сильного комплексообразователя (иона меди) в качестве реперного иона металла при исследовании комплексообразующих свойств (ремобилизирующего действия комплексообразующей емкости). Это может иметь практическое значение при определении санитарных зон вблизи водозаборных сооружений.

На рис. 36, а, б показаны результаты прямого и обратного титрования проб ионами двухвалентной меди ($2 \cdot 10^{-6}$ М) и фульвокислотами (содержание $\text{C}_{\text{орг}}$ 463 мг/л в элюате) при двух потенциалах предварительного электролиза −1,80 и −0,25 В с использованием электродов Ag/AgCl . Из рис. 36 видно, что, с одной стороны, применение весьма низкого отрицательного потенциала может быть причиной прямого восстановления комплексов, которые нормально инертные, с другой — что фульвокислоты, у которых нет определенного строения, могут координировать ионы меди по двум разным механизмам, проявляющимся при изменении электрохимических условий работы. Наверное, этим и объясняется высокая константа устойчивости для Cu^{2+} , что позволяет предполагать его высокую подвижность (при наличии фульвокислот) при миграции в подземных водах.

По результатам проведенных исследований, моделирующих натурные условия, можно сделать вывод, что катион меди и отчасти никеля связаны в инертных комплексах с органическими лигандами естественного происхождения (растворимыми гуминовыми веществами — фульвокислотами); слабо связаны в лабильных комплексах ионы цинка и кадмия, тогда как двухвалентные ионы марганца и свинца занимают среднее положение, ближе к слабосвязанным комплексам. С неорганическими лигандами естественного и антропогенного происхождения прежде всего образуются лабильные (умеренно лабильные для триполифосфата натрия) комплексы, а по электрохимическому способу невозможно заметить разницу между гидратированными ионами металла и хлоридными, гидроокисными, карбонатными комплексами.

Необходимо отметить, что нами получена почти такая же последовательность значений условных констант устойчивости, как и Л. Силленом и И. Мартеллом, за исключением полученного неожиданно высокого значения константы для цинка. Общее занижение констант, очевидно, связано с недооценкой некоторых конкурентных реакций. Если предположить, что комплексообразование — ведущий процесс при миграции в конкретных гидрогеохимических условиях, то значения констант устойчивости позволят предварительно оценить относительную миграционную подвижность. Так, условные константы образования для процессов этих комплексообразователей с фульвокислотами, хотя и намного ниже, дают следующую последовательность, в которой, вероятно, коэффициент распределения будет возрастать так: $\text{Cu}^{2+} > \text{Ni}^{2+} > \text{Mn}^{2+} > \text{Pb}^{2+} > \text{Zn}^{2+} > \text{Cd}^{2+}$.

Можно ожидать, что хелатообразующие лиганды естественного и техногенного происхождения, образующие инертные комплексы с ионами тяжелых металлов, будут увеличивать их миграционную подвижность (вне их зоны осаждения), но в то же время это будет делать их менее усвояемыми и, следовательно, менее токсичными для живых организмов. В этих случаях будет иметь значение и инертность хелатных комплексов по отношению к биохимическому распаду.

Коэффициенты распределения определены для Mn^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Cd^{2+} , Hg^{2+} , Pb^{2+} , Fe^{3+} при отсутствии и наличии хелатообразующего вещества техногенного происхождения (НТА). Твердая и жидкая фазы имели соотношение 1 : 1. Концентрации составляли (в мкмоль/л): для Mn^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Cd^{2+} , Fe^{3+} — 10; Pb^{2+} , Hg^{2+} — 5; НТА — 200; pH 7,7. Аналитические определения выполнены в основном согласно методике, приведенной в работе «Унифицированные методы исследования качества вод», с применением методов атомно-абсорбционной спектрофотометрии (аппарат Перкин Элмер 3030) и дифференциальной импульсной инверсионной полярографии (аппарат PAR 174 А). Контактное время составляло 24 ч и отвечало полному достижению термодинамического равновесия при $t = 20^\circ\text{C}$. Для каж-

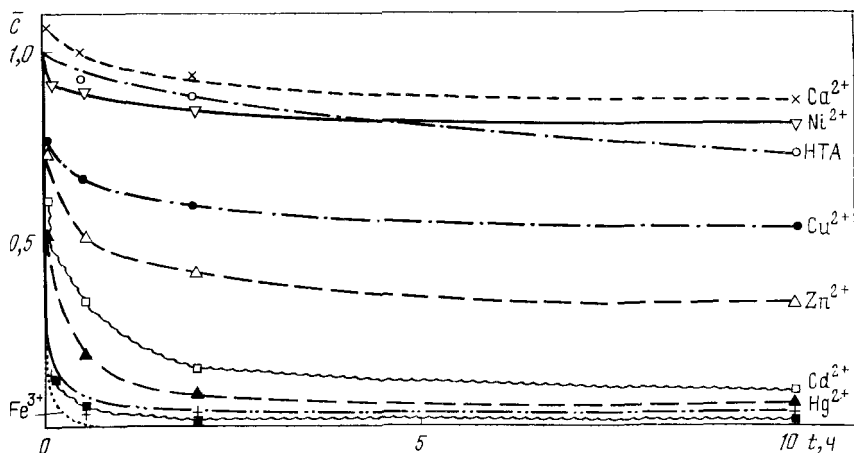


Рис. 37. Кривые зависимости $\bar{C}=f(t)$ для статических опытов с ионами тяжелых металлов в присутствии техногенного комплексобразующего вещества — нитрилтриуксусной кислоты (НТА)

дого контактного времени было проведено по два опыта на моменты времени 10 с, 1 мин, 30 мин, 2 ч, 10 ч (рис. 37). В табл. 18 даны усредненные результаты для $\chi_{\text{стат}}$, вычисленных по формуле (145). По данным статических опытов можно вычислить время полураспада элиминирующихся ионов металлов, используя крутые участки кривых (см. рис. 37). Например, для Fe^{3+} и Mn^{2+} это время равно приблизительно 0,08 и 0,1 мин (без НТА), а с техногенным комплексобразующим веществом — 0,11 и 0,13 мин.

Т а б л и ц а 18

Коэффициенты распределения $\chi_{\text{стат}}$ ионов тяжелых металлов в статических условиях

Компо- ненты	χ _{стат} , л/кг			Компо- ненты	χ _{стат} , л/кг		
	t, ч				t, ч		
	2	10	24		2	10	24
С НТА	0,12	0,38	0,92	Без НТА			
Ni ²⁺	0,18	0,25	0,35	Ni ²⁺	100	100	100
Cu ²⁺	0,69	0,92	1,32	Cu ²⁺	100	100	100
Zn ²⁺	1,44	2,12	2,85	Zn ²⁺	100	100	100
Cd ²⁺	5,67	11,2	99,0	Cd ²⁺	100	100	100
Hg ²⁺	11,5	24,0	99,0	Hg ²⁺	13,76	32,3	100
Mn ²⁺	32,3	49,0	99,0	Mn ²⁺	100	100	100
Pb ²⁺	99,0	100	100	Pb ²⁺	100	100	100
Fe ³⁺	99,0	100	100	Fe ³⁺	100	100	100
Ca ²⁺	0,07	0,16	0,28	Ca ²⁺	0,21	0,46	0,87

Полученные коэффициенты распределения показывают полное элиминирование ионов тяжелых металлов в отсутствие комплексобразующего вещества (НТА), исключение составляет двухвалентная ртуть. Наблюдается их ремобилизирование в форме хелатов, причем для сравнения показаны и $K_{\text{стат}}$ для Ca^{2+} (только для исходной жидкой фазы); при этом имеет место дополнительное извлечение из твердой фазы в начале опыта (см. рис. 35). Однако отсутствие прямой корреляции между коэффициентами распределения и константами устойчивости комплексов соответствующих ионов, по всей вероятности, вызвано влиянием, кроме комплексобразования и равновесной сорбции другими процессами. Поэтому для сопоставления K , полученных в различных условиях, и выяснения их зависимости от основных физико-химических процессов элиминирования были проведены опыты в условиях фильтрации (динамические миграционные опыты).

МИГРАЦИОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФОРМ ЭЛИМИНИРОВАНИЯ

Лабораторные опыты в условиях фильтрации

В данном разделе обобщены результаты миграционных исследований с ионами тяжелых металлов, проведенных в отсутствие и присутствии хелатообразующих лигандов для установления процессов, обуславливающих миграционное поведение загрязнителей при их самостоятельной и одновременной миграции, формы элиминирования и опасности вторичного ремобилизования, а также определения комплексных миграционных параметров.

Т а б л и ц а 19

Химическая (в %) и гранулометрическая характеристики песка

Компоненты	Серия опытов		Компоненты	Серия опытов	
	I	II		I	II
Влага	0,85	0,80	Al_2O_3	2,73	2,15
Практически нерастворимая часть песка	1,82	30,0	Fe_2O_3	2,90	1,40
SiO_2	83,28	29,8	SO_3	0,27	0,10
CaO	0,98	25,48	Органические вещества	—	0,15
MgO	0,75	10,5	d_{10}^*	0,19	0,41
Na_2O	3,37	нет	d_{60}/d_{10}^*	4,53	6,07
K_2O	2,90	0,42			
R_2O_3	6,12	3,65			

* Характеристики гранулометрического состава d_{10} и d_{60} даны в миллиметрах.

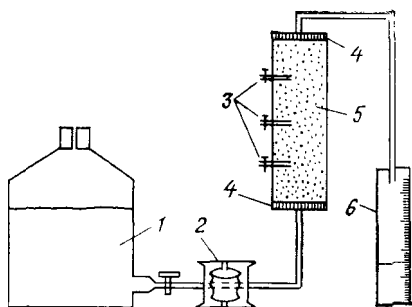
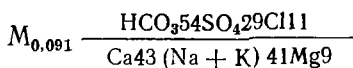


Рис. 38. Схема лабораторной установки для исследования миграции загрязнителей при постоянной скорости фильтрации.

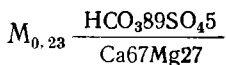
1 — сосуд Мариотта с чистой или загрязненной водой; 2 — перистальтический микронасос; 3 — трубки для отбора проб; 4 — фильтры; 5 — колонна с фильтрующей средой; 6 — измерительный цилиндр

На специальной установке, включающей фильтрационную трубку и сосуды с жидкой фазой, создающие постоянный напор, проведена I серия опытов. Длина трубы 40 см, ее диаметр — 10,5 см; она имеет три вывода для пьезометров, расстояние между которыми — 15 см. Эта аппаратура и методика проведения опытов описаны в работах [4, 9, 28]. В качестве фильтрующей среды использован песок четвертичного возраста средней крупности, химический и гранулометрический составы которого приведены в табл. 19. Опыты по одновременной миграции ионов тяжелых металлов в отсутствие и присутствии хелатообразующих лигандов (II серия) проведены с тем же песком (табл. 20). В этом случае к установке подключали перистальтический микронасос, создающий постоянную скорость фильтрации (рис. 38).

Для разбавления использовали водопроводную воду с минерализацией 0,091 г/л, ее формула (по Курлову)



(I серия) и подземную воду с минерализацией 0,23 г/л, ее формула (по Курлову)



(II серия). Раствор подавался по схеме непрерывного ввода (за исключением опыта 1 по самостоятельной миграции Mn^{2+}). Пробы брались периодически по 50 мл, консервировались несколькими микролитрами концентрированной азотной кислоты. Одновременно учитывалось количество вытекшей воды, изменение напора в пьезометрах и другие характеристики. По окончании опытов фильтрующая среда II серии подверглась экстракционной обработке для определения форм связывания (элиминирования). Для анализа и контроля валентного состояния использовалась аппаратура, указанная выше, а определение растворенного органического углерода проводили аппаратом фирмы «Майхак».

Рис. 39. Кривые зависимости $\bar{C}=f(\bar{W})$ для самостоятельной миграции марганца.

Ввод: 1 — непрерывный; 2 — импульсный

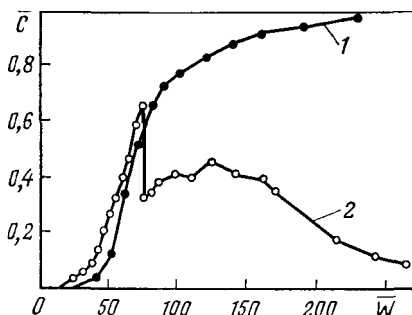
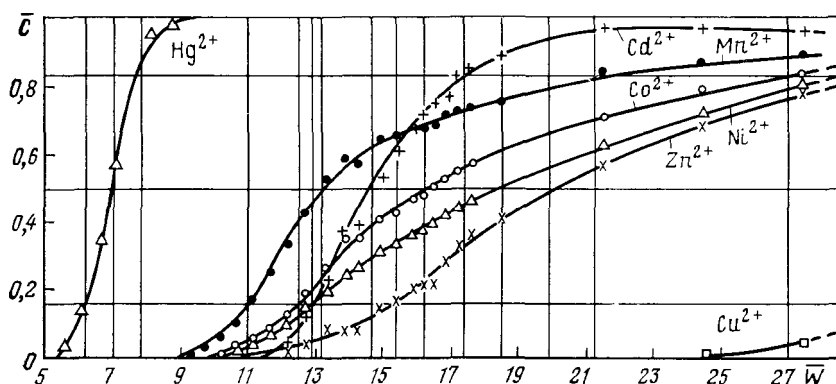


Рис. 40. Кривые зависимости $\bar{C}=f(\bar{W})$ для одновременной миграции ионов тяжелых металлов в отсутствие органических комплексообразующих веществ



Экспериментальные выходные кривые изменений концентраций ионов тяжелых металлов представлены на рис. 39, 40, 41, 42 в безразмерной системе координат $\bar{C}=f(\bar{W})$, где $\bar{C}=C/C_0$, $\bar{W}=Qt/Wn=vt/nx$. Миграционные параметры определены по методу, основанному на трех характерных точках экспериментальных кривых — $\bar{W}_{0,16}$; $\bar{W}_{0,5}$; $\bar{W}_{0,84}$, которые отвечают кратному числу обмена порового объема 23, 24 и 30 при концентрации на выходе, равной 0,16, 0,5, 0,84. При этом получаются следующие формулы:

$$n_0 = n\bar{W}_{0,5}; \quad (148)$$

$$\kappa = (\bar{W}_{0,5} - 1)n; \quad (149)$$

$$\lambda = \frac{x}{8} \left(\frac{1 - \bar{W}_{0,16}/\bar{W}_{0,5}}{\sqrt{\bar{W}_{0,16}/\bar{W}_{0,5}}} - \frac{1 - \bar{W}_{0,84}/\bar{W}_{0,5}}{\sqrt{\bar{W}_{0,84}/\bar{W}_{0,5}}} \right)^2; \quad (150)$$

$$\theta = n\bar{W}_{0,5}C_0/\rho; \quad (151)$$

$$\varepsilon = (\bar{W}_{0,5} - \bar{W}_{0,16})/(\bar{W}_{0,84} - \bar{W}_{0,5}), \quad (152)$$

где κ — коэффициент распределения в динамических условиях; λ — параметр структуры порового пространства (гидродиспер-

Экспериментальные условия и параметры миграции ионов металлов

Серия опытов	Номер опыта	l	x , м	W , л	ρ , кг/л	v , м/с	Ионы	C_0 , мкмоль/л	κ , л/кг	λ , м	θ , мг-экв/кг	ε
I	1	0,24	0,40	0,89	2,1	4,83	Mn ²⁺	20	15,6	0,03	6,3	0,77
	2	0,25	0,165	0,08	2,1	4,99	Mn ²⁺	20	16,8	0,04	5,8	0,30
	3	0,26	0,40	0,89	2,1	5,00	Hg ²⁺	33	1,56	0,003	0,3	0,89
							Mn ²⁺	33	3,17	0,02	2,0	0,29
							Cd ²⁺	33	3,55	0,004	1,1	0,63
							Co ²⁺	33	3,95	0,03	2,3	0,34
							Ni ²⁺	33	4,55	0,07	2,6	0,55
							Zn ²⁺	33	4,91	0,02	2,5	0,50
							Cu ²⁺	33	12	—	5,2	—
							Pb ²⁺ , Fe ³⁺ , Al ³⁺	33	>20	—	>10	—
II	4	0,24	0,40	0,76	2,7	0,22	Hg ²⁺	5	25,8	—	0,10	—
	5	0,24	0,40	0,764	2,67		Mn ²⁺ , Cd ²⁺ , Ni ²⁺	10	>30	—	>0,2	—
							Zn ²⁺ , Cu ²⁺ , Fe ³⁺	5	>30	—	>0,2	—
							Pb ²⁺	10	0,24	0,02	0,004	0,50
							Ni ²⁺	10	1,44	0,08	0,012	0,50
							Cu ²⁺	10	2,4	0,12	0,02	0,24
							Zn ²⁺	10	5,64	0,03	0,04	—0
							Cd ²⁺	5	30	0,04	0,11	—0
							Hg ²⁺	5	>30	—	>0,2	—
							Pb ²⁺	10	>30	—	>0,2	—
							Mn ²⁺ , Fe ³⁺	10	—	—	—	—
							HTA	200	—	—	—	—
	6	0,26	0,40	0,73	2,74		Fe ³⁺	10	0,70	0,14	0,010	0,73
							Hg ²⁺	5	1,10	0,22	0,004	0,61
							Cu ²⁺	10	1,72	0,28	0,01	0,47
							Ni ²⁺	10	2,18	—	0,015	—0
							Zn ²⁺	10	2,79	—	0,02	—0
							Mn ²⁺	10	3,84	—	0,03	—0
							Pb ²⁺	5	4,81	—	0,016	—0
							Cd ²⁺	10	5,20	—	0,036	—0
							Фл	50	0,66	0,30	0,162	0,66

Примечание. рН растворов опытов 1 и 3 равен 5,9; 2—5,8; 4, 5, 6 — опытах 1, 2, 3 и Фл в опыте 6 концентрация дана в мг/л.

7,7. Для Mn²⁺, Hg²⁺, Cd²⁺, Co²⁺, Ni²⁺, Zn²⁺, Cu²⁺, Pb²⁺, Fe³⁺, Al³⁺ в

сии); x — длина фильтрационного пути колонны; θ — емкость элиминирования фильтрующей среды; C_0 — начальная концентрация вещества; ρ — плотность фильтрационной среды; ε — параметр, учитывающий отклонение от условий равновесной сорбции.

Коэффициент активной пористости определяли по хлор-иону в соответствии с исследованиями, описанными ниже и данными, приведенными в [24]; Ен изменялся при всех опытах в диапазоне 0,1—0,3 В, что, очевидно, обуславливалось окислительной (аэробной) обстановкой. Полярографические исследова-

ования водных проб тоже подтвердили, что изменение степени окисления не имеет места ни у одного из ионов (особенно важно это для Fe³⁺ и частично для Mn²⁺).

Необходимо отметить, что миграция всех ионов металлов за исключением иона ртути и в отсутствие комплексообразующего (хелатообразующего) вещества происходит в условиях, отличных от равновесных (равновесной сорбции). Нами предлагается следующий диапазон значений критерия ε : $0,8 < \varepsilon < 1,2$, в пределах которого отклонений от равновесной сорбции практически нет. Вне этого диапазона (и особенно когда $\varepsilon \ll 1$) опре-

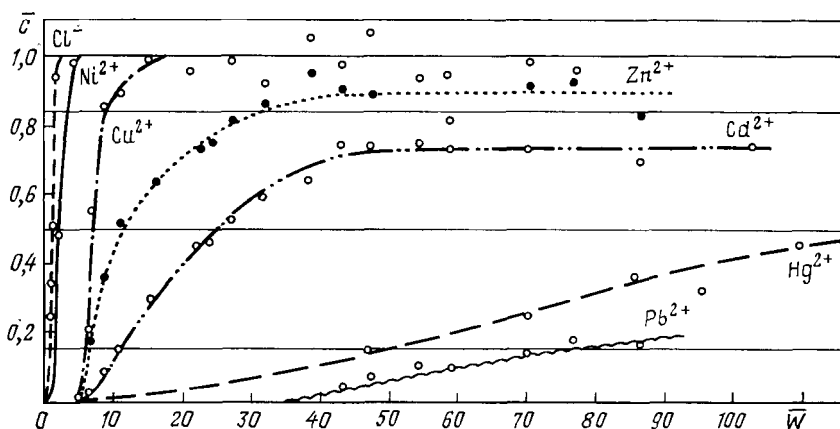


Рис. 41. Кривые зависимости $\bar{C}=f(\bar{W})$ для миграции ионов тяжелых металлов в присутствии комплексообразующих веществ (НТА)

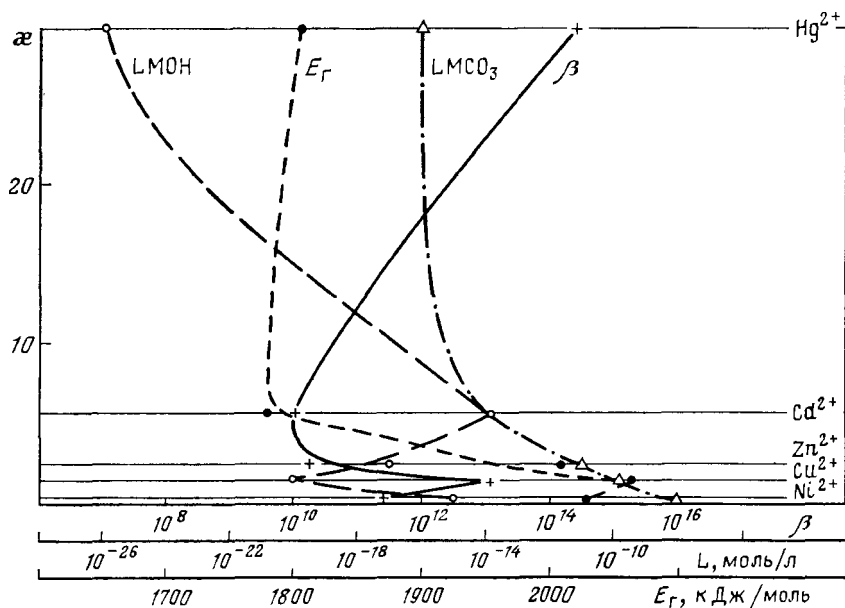


Рис. 42. Кривые зависимости коэффициента распределения α в присутствии НТА от некоторых основных физико-химических характеристик (β , L , E_r)

деленные значения для параметров λ и κ (см. табл. 20) можно рассматривать как первое и сравнительно грубое приближение. а для θ — как минимальное значение.

Рассмотрим причины, вызывающие отклонения от равновесной сорбции при экспериментах I серии. При сравнительно высоких значениях концентраций ионов и данном значении pH, формы миграции — это прежде всего аквакомплексы и в меньшей степени нитратные, гидроокисные и хлоридные комплексы. Формы связывания (элиминирования) представлены труднорастворимыми соединениями типа основных солей $MA_n(OH)_{2-n}$, в меньшей мере гидроокисями (за исключением $FeOON$, где это самая главная форма связывания). Ведущим процессом, по мере того как растет коэффициент χ , т. е. в такой последовательности, как $Hg^{2+} < Mn^{2+} < Cd^{2+} < Co^{2+} < Ni^{2+} < Zn^{2+} < Cu^{2+} < Pb^{2+} < Fe^{3+} < Al^{3+}$ (см. рис. 40), становится осаждение. Поэтому нами не подтверждается полностью наблюдаемая в [35] зависимость увеличения $lg\chi$ с увеличением энергии гидратации. Сходство полученных значений χ отмечается только для Zn^{2+} и Mn^{2+} . Недостаток данных по произведениям растворимости (ПР) основных солей не позволил провести корреляционный анализ между ПР и χ , а проведенный анализ на основании ПР малорастворимых гидроокисей и карбонатов не показал релевантную зависимость.

Сопоставление опытов по самостоятельной миграции иона марганца (см. рис. 39) и его одновременной миграции с ионами других тяжелых металлов (см. табл. 20: опыты 2, 3) показывает однотипность характера определяющих гидрогеохимических процессов ($\varepsilon_2 \approx \varepsilon_3$), а коэффициент распределения χ и емкость θ в опыте 3 из-за присутствия других ионов меньше. То, что при миграции ионов тяжелых металлов (в условиях, указанных выше) процесс сорбции усложняется осадкообразованием и, возможно, переотложением и пересортировкой самой породы, подтверждается и характером кривой $\bar{W}=f(t)$ (рис. 43), показывающим колыматацию фильтрующей среды.

Кривые $\bar{C}=f(\bar{W})$, полученные при промывке опытного образца (рис. 44), показывают, что десорбция исследуемых ионов тяжелых металлов осложнена полным или частичным растворением и последующей отмывкой малорастворимых соединений. Процессы, связанные с массообменом II типа* (с учетом десорбции и растворения), вызывают быстрое уменьшение концентрации ионов металлов до некоторого значения C_{lim} , после чего происходит замедление. Отсюда следует важный для практики вывод: если водоносный пласт загрязнен и $C_{lim} > ПДК$, то необходима длительная промывка, и, наоборот, при $C_{lim} < ПДК$ возможно быстрое восстановление качества подземных вод.

Если после массообмена II типа сделать вытяжку соляной кислотой (1:1), в пробах из разных частей колонны обнаруживаются значительные количества связанных ионов соответствующих металлов (табл. 21). Поэтому представляло интерес выяс-

* Согласно [9], при массообмене I типа вещества из жидкости поглощаются (элиминированы) породами, а при массообмене II типа жидкость извлекает вещества, содержащиеся в породах.

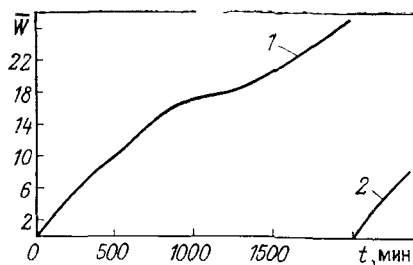


Рис. 43. Изменение кратности обмена \overline{W} фильтрующейся воды во времени при массообмене I (1) и II (2) типа

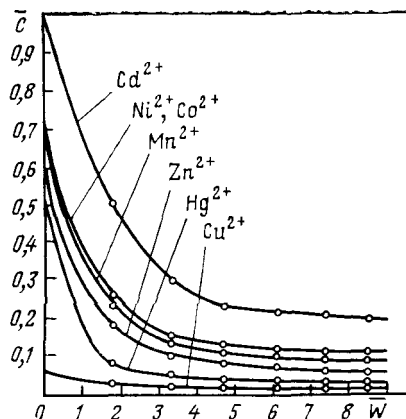


Рис. 44. Кривые зависимости $\overline{C}=f(\overline{W})$ для миграции тяжелых металлов при массообмене II типа

нить, какие формы связывания могут быть ремобилизованы, а какие остаются в породе и тем самым уменьшают емкость θ . После выполнения опыта 2 (массообмен I типа) и проведенного затем массообмена II типа провели опыт в отсутствии комплексобразующего вещества по самостоятельной миграции Mn^{2+} (массообмен I типа). Полученное значение емкости θ оказалось равным 4,8 ммоль/кг, т. е. меньше значения емкости, полученного в опыте 2 (см. табл. 20).

При второй серии опытов выбрали меньшие концентрации (обычно несколько выше, чем ПДК) и провели эксперименты без хелатообразующего вещества, с НТА и растворимыми гуминовыми веществами — фульвокислотами (см. табл. 20, опыты 4, 5, 6).

В отсутствие комплексобразующего вещества при данных условиях слабоподвижным оказался только ион ртути, а остальные ионы тяжелых металлов элиминировались полностью (см. табл. 20). Вероятно, при $\overline{W} \gg 30$ появились бы и остальные ионы, причем можно было бы ожидать пропорциональное увеличение коэффициентов распределения.

Т а б л и ц а 21

Содержание ионов тяжелых металлов (в мг/кг⁻¹) в солянокислой вытяжке из фильтрационной среды

Часть колонны	Cu^{2+}	Zn^{2+}	Ni^{2+}	Cd^{2+}	Co^{2+}	Mn^{2+}	Hg^{2+}	Pb^{2+}
Верхняя	6,86	7,12	1,25	5,08	0,32	1,18	0,06	2,05
Средняя	3,37	3,62	0,12	2,25	0,04	1,05	0,01	0,93
Нижняя	34,80	5,00	5,80	8,25	0,04	2,48	0,04	400,18

Сопоставление коэффициентов распределения, определенных в статических и динамических условиях, показывает близкое их совпадение, когда контактное время (статические условия) соответствует приблизительно времени прохождения искусственно загрязненной воды (в данном случае 10 ч) через поровый объем находящейся в колонне фильтрационной среды. Однако, несмотря на это, коэффициент распределения в статических условиях больше, чем в динамических условиях, особенно если есть время для достижения полного физико-химического равновесия, а соответствующая связь между $\kappa_{\text{стат}}$ и κ , выраженная формулой

$$\kappa = \rho \kappa_{\text{стат}}, \quad (153)$$

не соблюдается.

При наличии комплексообразующего вещества (НТА) (см. табл. 20; рис. 41) при одинаковых других условиях наблюдается ремобилизирование большинства ионов тяжелых металлов. И в этом случае, однако, хотя и меньшую, но заметную роль играет осадкообразование. Нитрилтриуксусная кислота не в состоянии эффективно задерживать в жидкой фазе ионы Fe^{3+} , Mn^{2+} и Pb^{2+} , для которых $\kappa \gg 30$. Из рис. 39 видно, что не существует обратная корреляция между κ и β (константа устойчивости), т. е. не подтверждается предположение, что комплексообразование с высокими значениями констант устойчивости всегда является ведущим процессом. Наоборот, замечается другая зависимость, что с уменьшением произведения растворимости карбонатов исследованных ионов растет и коэффициент распределения. Учитывая состав жидкой и твердой фаз и сравнительно высокий рН, можно объяснить, почему образование малорастворимых соединений (в случае карбонатов) и здесь является одним из важных процессов, обуславливающих миграцию. Если не иметь в виду локально более высокий рН на поверхности карбонатных частиц из фильтрационной среды, то термодинамические вычисления, связанные с кальциево-карбонатно-углекислым равновесием в водной фазе для условий опытов II серии, показывают, что образование слаборастворимых соединений возможно для Cu^{2+} (гидроокислы), Zn^{2+} и Cd^{2+} (карбонаты), Hg^{2+} и Fe^{3+} (гидроокиси и карбонаты). Соответствующие скоростные константы процесса осаждения имеют значения порядка $n \cdot 10^{-4} \text{ мин}^{-1}$ (например, для Zn^{2+} $1,8 \cdot 10^{-4} \text{ мин}^{-1}$, Cd^{2+} $3,38 \cdot 10^{-4} \text{ мин}^{-1}$). Сопоставление значений $\kappa_{\text{стат}}$ и κ , полученных при аналогичных условиях, показывает, что совпадают не только порядок увеличения (что является хорошей и качественной характеристикой), но и комплексные миграционные формы, даже если преобладает равновесная сорбция и повышается роль осаждения (например, для Ni^{2+} , Cu^{2+} и даже Zn^{2+}). Другие процессы играют меньшую роль. Следовательно, на практике можно использовать коэффициенты распределения, полученные в статических условиях. Такая замена создает ряд

преимуществ: требуется меньше времени для проведения опытов; используются более простая аппаратура и способы вычисления коэффициента распределения. Однако это может привести к переоценке роли процессов элиминирования при прогнозировании миграции загрязнителей в естественных условиях. В этом случае для коррекции значений $K_{\text{стат}}$ следует использовать зависимость (153) и учитывать соответствующие миграционные формы. Отсюда следует необходимость дальнейшего изучения миграции в лабораторных и полевых условиях и стандартизации методики определения K (особенно отношения твердой фазы к жидкой).

Хотя определенные нами в предыдущем разделе константы устойчивости для хелатообразования ионов тяжелых металлов с фульвокислотами меньше, чем константы стойкости с НТА, ремобилизирующее действие растворимых гуминовых веществ и ведущая роль комплексообразования при миграции ионов металлов в присутствии этого лиганда проявляется весьма сильно (см. табл. 20: рис. 45). Необходимо отметить, что как при НТА, так и без нее анализы концентрации комплексообразующего вещества не показали адаптацию организмов, способствующих распаду лиганда, хотя незначительная сорбция лигандов имела место. В этих опытах интересным фактом является получение низких значений коэффициента распределения для Fe^{3+} при высоком рН. На рис. 46 показаны зависимости соответствующих K от энергии гидратации E_r , произведений растворимости карбонатов и гидроокислов и условных констант стойкости хелатов ионов исследованных тяжелых металлов. Видна определяющая роль комплексообразования с фульвокислотами, компенсирующая низкие произведения растворимости гидроокислов и карбонатов. Можно предположить, что не только стойкость образованных комплексов (контрольные вольтамперограммы жидкой фазы снимались и во время опытов), но и полифункциональность строения фульвокислот, возможность образования многоядерных комплексов и возможность миграции в коллоидной форме также оказывают влияние, что сказывается на уменьшении взаимодействий ионов металлов с фильтрационной средой и ведет к элиминированию загрязнителей. Необходимо, однако, отметить, что и сами органические лиганды удерживаются, хотя и немного, средой (см. табл. 19), что создает предпосылки для так называемого гетерогенного комплексообразования.

Определение форм и процессов элиминирования

Для определения форм связывания было проведено экстрагирование соответствующими реагентами при отношении твердой к жидкой фазе 1 : 20. Поскольку основное число ионов задерживается в нижней части колонны, где взаимодействие системы вода — порода самое интенсивное, мы взяли часть проб фильтрующей среды, соответствующей нижним 10 см длины ко-

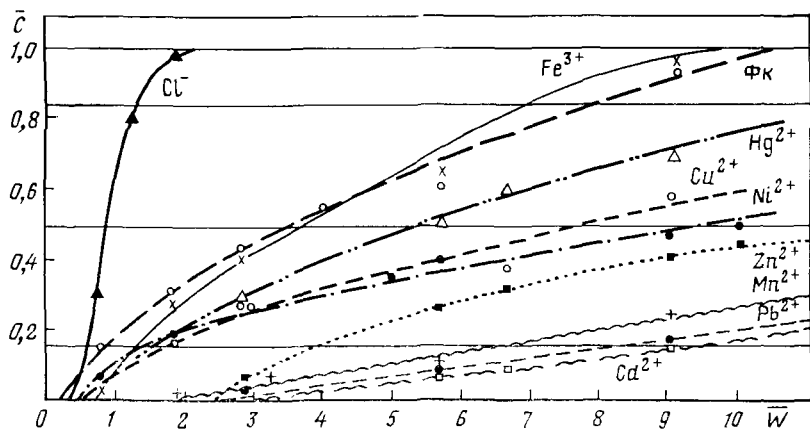


Рис. 45. Кривые зависимости $\bar{C}=f(\bar{W})$ для миграции ионов тяжелых металлов в присутствии растворимых гуминовых веществ (фульвокислот)

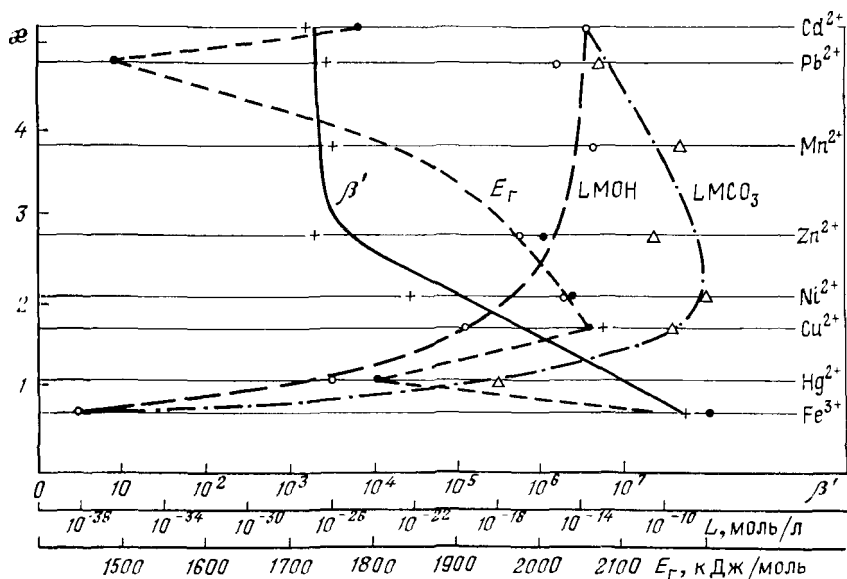
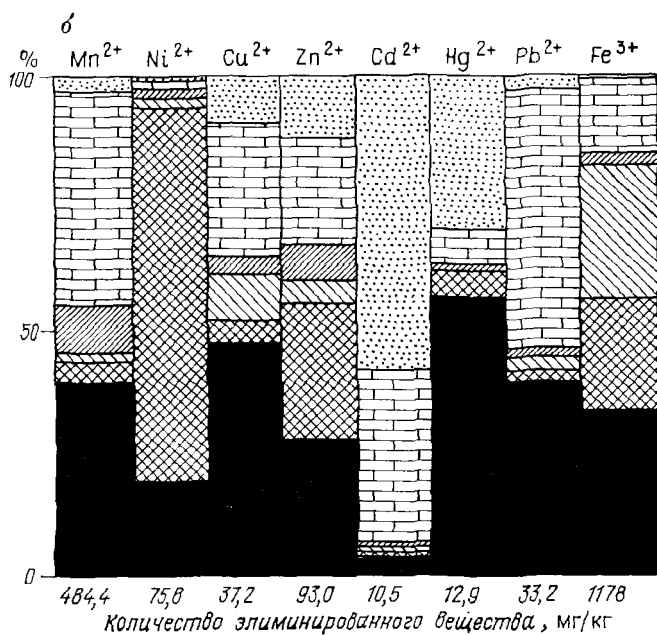
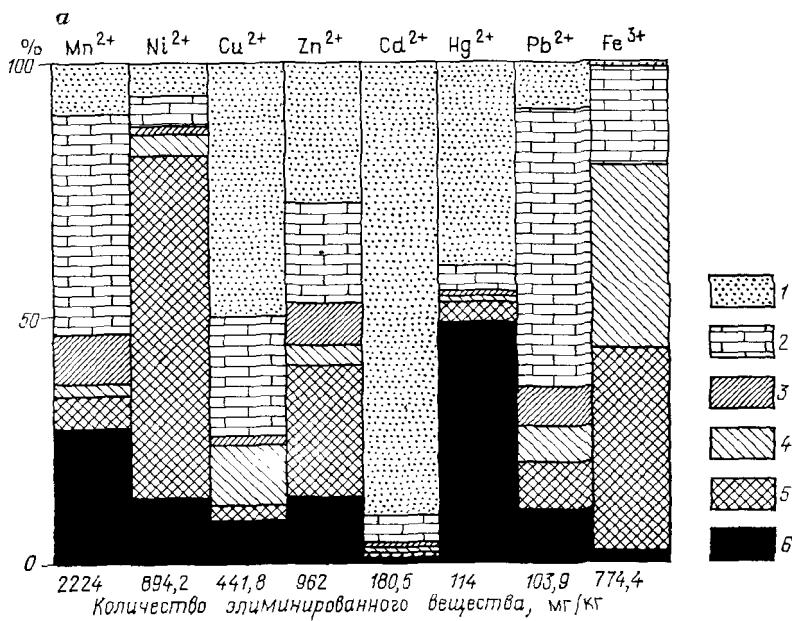


Рис. 46. Кривые зависимости коэффициента распределения K от некоторых основных физико-химических характеристик (β' , L , E_T) в присутствии фульвокислот

лонны, и исследовали гранулометрическую фракцию размером менее 6,3 мм.

Полученные результаты показаны на рис. 47. На рисунке жирной линией отделены три наиболее легко ремобилизуемые фракции (обменные катионы, карбонатная фракция и легковос-



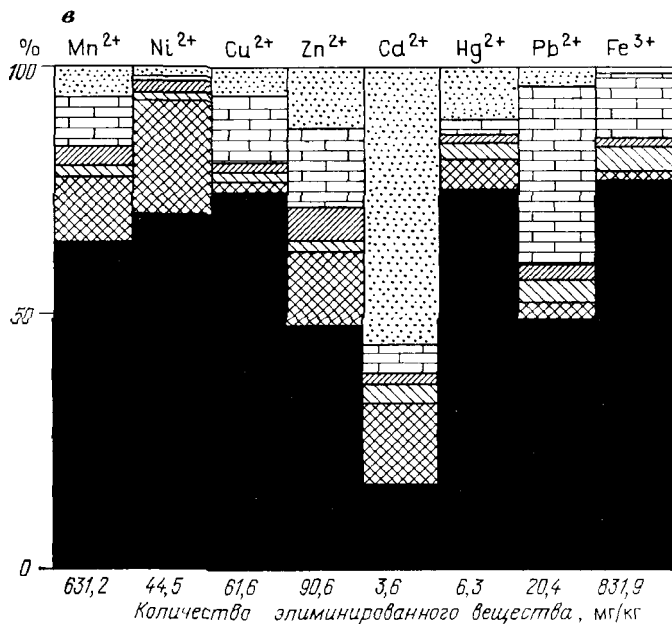


Рис. 47. Процентное распределение разных форм элиминирования ионов тяжелых металлов.

а — без комплексообразующих веществ; *б* — с НТА; *в* — с фульвокислотами; фракции: 1 — легко экстрагируемые; 2 — карбонатно связанные; 3 — легкоредуцируемые; 4 — среднередуцируемые; 5 — органические и сульфидные; 6 — остаточные

становимая фракция). Отмечается, что для некоторых металлов формы связывания сохраняются несмотря на присутствие или отсутствие комплексообразующего вещества. Так, например, для Cd^{2+} характерна фракция обменных катионов, для Pb^{2+} — карбонатная и т. д. Присутствие хелатообразующих лигандов (НТА и особенно фульвокислот) сильно уменьшает легко ремобилизируемые фракции и общее содержание элиминированных ионов металлов. Можно, следовательно, сделать важный для практики вывод, что попадающие в подземные воды ионы тяжелых металлов задерживаются (за исключением Ni^{2+} и Fe^{3+}) преимущественно в легко ремобилизируемых формах, т. е. путем физико-химических процессов (табл. 22), причем последовательность следующая: $\text{Cd}^{2+} > \text{Cu}^{2+} > \text{Pb}^{2+} > \text{Mn}^{2+} > \text{Zn}^{2+} > \text{Hg}^{2+} > \text{Fe}^{3+} > \text{Ni}^{2+}$.

Извлечение их из породы в воду сильно облегчается в присутствии органических хелатообразующих лигандов, а для некоторых ионов (например Cd^{2+}) и неорганического хлора извлечение будет полным.

Наложение и конкуренция ряда физико-химических процессов и фазовая неспецифичность использованных реагентов для экстракции не дает возможности определить, какой процесс и

Таблица 22

Экстракционная последовательность для определения форм и процессов элиминирования ионов тяжелых металлов (ИТМ) в присутствии комплексообразующих соединений (КС)

Реагенты	Контактное время, ч	Фракция	Процессы	Усвояемость для живых организмов
1 М $\text{NH}_4\text{OOCCH}_3$ при рН 7 и $t = 20^\circ\text{C}$	2	Легкоэкстрагируемые	Физическая сорбция, катионный обмен, осаждение растворимых солей, диффузия в застойных порах	Легко ремобилизуемые и усвояемые
1 М NaOOCCH_3 потом 2М CH_3COOH до рН 5 при $t = 20^\circ\text{C}$	6	Карбонатно связанные	Осаждение, соосаждение карбонатных и основных солей	
0,1 М $\text{NH}_4\text{OH} \cdot \text{HCl}$ + 0,01 М HNO_3 до рН 2 при $t = 20^\circ\text{C}$	8	Легкоредуцируемые	Осаждение, соосаждение и сорбция в основном окисей марганца	
0,2 М $(\text{COOH})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ + 0,2 М $(\text{COONH}_4)_2$ до рН 3 при $t = 20^\circ\text{C}$	24	Среднередуцируемые	Гидролитическая сорбция, осаждение и хемосорбция, связанные в основном с гидратированными окисями	
30 % H_2O_2 при $t = 90^\circ\text{C}$ до влажных солей; потом 1 М $\text{NH}_4\text{OOCCH}_3$	24	Органические и сульфидные	Осаждение слабо растворимых солей, хемосорбция ИТМ на предварительно элиминированных КС	Трудно ремобилизуемые и усвояемые
Концентрированные HNO_3 + HCl при $t = 90^\circ\text{C}$	12	Остаточные	Гетерогенное образование очень трудно растворимых и нерастворимых хелатов, внедрение в кристаллическую решетку Fe, Mn, Al окисей железа, марганца, алюминия	

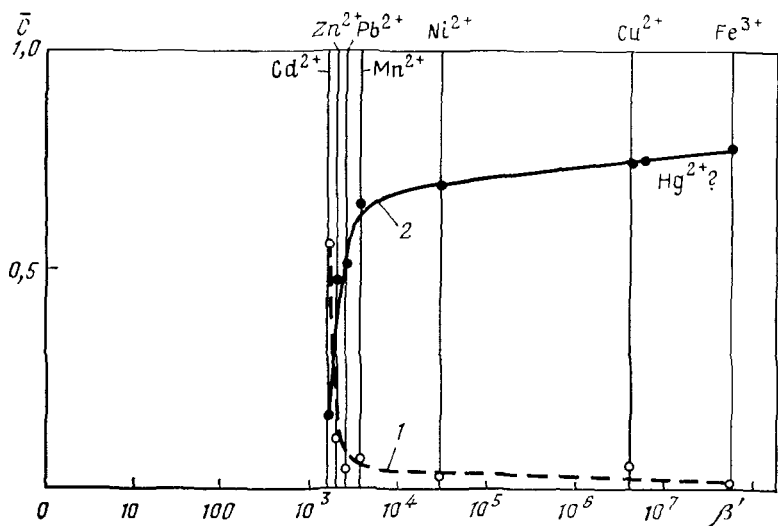


Рис. 48. Кривые зависимости содержания наиболее легко (1) и трудно (2) ремобилизуемыми фракциями от условной константы устойчивости β' комплексов ионов тяжелых металлов с фульвокислотами

параметр являются ведущими при элиминировании данного иона тяжелого металла и при какой форме происходит связывание. Процентный состав самой легко ремобилизуемой фракции (обменные катионы, которые задерживаются только механизмом физической сорбции) при задерживании в процессе миграции ионов тяжелых металлов в присутствии растворимых гуминовых веществ (рис. 48) имеет логарифмическую зависимость от значений констант устойчивости, уменьшаясь с их увеличением. Однако с увеличением значений констант образования по этой зависимости увеличивается процентный состав самой трудно ремобилизуемой фракции. Это объясняется предварительной сорбцией фульвокислот и (или) образованием нерастворимых комплексов с кальцием из фильтрующей среды, за которыми следует гетерогенное хелатообразование с ионами тяжелых металлов и их гидроокисных комплексов в жидкой фазе в соответствии с условными константами устойчивости. Обратим внимание на возможность определения константы образования комплекса иона ртути с фульвокислотой из сопоставления рис. 46 и рис. 48. Это значение оказывается приблизительно равным $1 \cdot 10^7$. В абсолютных значениях, однако, емкость элиминирования фильтрующей среды в этом случае, как и в случае с НТА, более низкая, т. е. комплексообразование может вызвать в известной степени не только повышение миграционной подвижности ИТМ, но и их вторичное ремобилизирование и загрязнение пресноводных систем.

Все сказанное еще раз подтверждает, что определение параметров миграции (и особенно коэффициента распределения), комплексно отражающих взаимодействие системы вода — порода, лучше проводить, учитывая как вещественный состав фильтрующей среды и подземных вод, так и формы миграции и элиминирования и механизмы взаимодействия между ними.

Формы миграции и их влияние на растения

Загрязнение подземных вод часто происходит вследствие инфильтрации загрязненных поверхностных вод через почвенный слой и зону аэрации. Корневая система растений, находящаяся в этой зоне, может усваивать некоторые из токсичных ингредиентов, что зависит от миграционных форм последних. Однако растения, изменяя некоторые основные гидрохимические параметры (например, pH, Eh и др.) в результате своей жизнедеятельности, могут влиять на миграционную подвижность загрязнителей. Это относится и к микрофлоре в самих подземных водах.

В качестве модельного растения мы выбрали горох — важную бобовую и кормовую культуру, которая использует неглубокие подземные воды, и при этом увеличивается вероятность встречи с миграционной формой тяжелых металлов и других загрязнителей. Поэтому целью наших исследований было изучение поглощения тяжелых металлов — меди и кадмия, происходящего раздельно и в комплексе с нитрилтриуксусной кислотой (НТА) и триполифосфатом натрия (ТПФ), корневой системой гороховых растений, выращенных как гидропонная культура (на водных растворах).

Гороховые растения сорта «Ран-1» выращивались в течение 20 сут в климатической камере при контролируемых условиях

Т а б л и ц а 23

Экспериментальные условия при модельных исследованиях с поглощением ИТМ растениями

Компоненты	Масса корней в сухом состоянии, г	Значения pH растворов	
		исходное	конечное
НТА	0,1676	5,365	5,21—5,25
ТПФ	0,1739	6,255	5,815
Cu ²⁺	0,1801	5,58—5,61	5,27—5,29
Cu ²⁺ + ТПФ	0,2036	6,10—6,15	6,10—6,11
Cu ²⁺ + НТА	0,1736	5,40—5,45	5,05—5,10
Cd ²⁺	0,1712	5,45—5,55	6,30—6,35
Cd ²⁺ + ТПФ	0,1710	6,12—6,15	6,27—6,28
Cd ²⁺ + НТА	0,1633	5,40—5,45	6,08—6,10

П р и м е ч а н и е. Исходные концентрации (в моль/л): НТА 10⁻⁵, ТПФ 10⁻⁵, Cu²⁺ 4,5·10⁻⁶, Cd²⁺ 7·10⁻⁶.

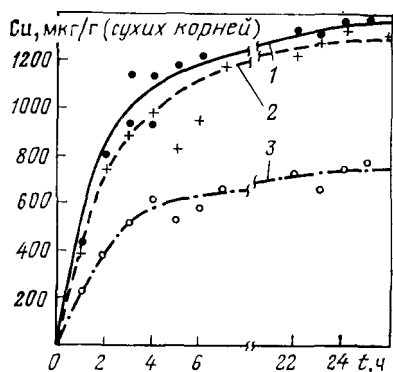


Рис. 49. Усвояемость меди растением.

1 — в отсутствие комплексобразующих веществ; в присутствии: 2 — ТПФ; 3 — НТА

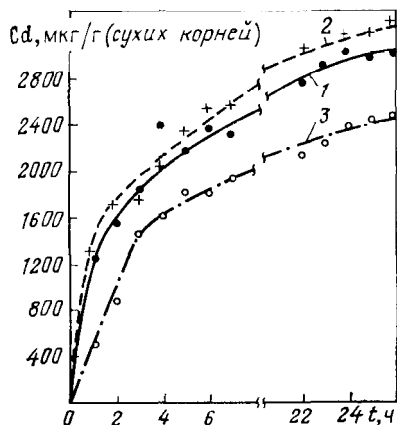


Рис. 50. Усвояемость кадмия растением.

1 — в отсутствие комплексобразующих веществ; в присутствии: 2 — ТПФ, 3 — НТА

(12-часовой фотопериод в 8000 лк, при $t=26^\circ\text{C}$ и 12-часовой ночи, при $t=22^\circ\text{C}$ и влажности 70 %) на растворе CaCl_2 с концентрацией $1 \cdot 10^{-4}$ М. Потом растения были перенесены на растворы комплексов меди и кадмия с НТА и ТПФ при непрерывном перемешивании. Изучалось изменение концентрации ионов в водной фазе при раздельном поглощении двух ионов.

В табл. 23 представлены варианты модельных опытов и данные об изменении рН растворов и веса корней растений при поглощении ими ионов тяжелых металлов.

Связывание ионов меди с НТА в стабильный комплекс приводит к ингибированию около 50 % поглощения меди корнями растений по сравнению с контрольной без НТА (аква- и хлоридные комплексы, исходной субстанцией которых является CuCl_2 , рис. 49). Более того, из-за сильной комплексообразующей способности НТА из контрольных растений варианта 1 (см. табл. 23) извлекается определенное количество Cu^{2+} . Триполифосфат натрия образуется на 6 порядков ниже стабильных комплексов с Cu^{2+} и Cd^{2+} и практически не влияет на усвояемость комплексов растениями. (Следует отметить, что за время проведения опытов не наступает заметный гидролиз полифосфата). Однако НТА вызывает ингибирование (до 25 %) поглощения Cd^{2+} (рис. 50).

Интересным является и ингибирующее влияние одного часто встречаемого в подземных водах иона кальция на поглощение других ионов растениями: при концентрациях $1 \cdot 10^{-4}$ М до 15 % для Cu^{2+} и около 50 % для Cd^{2+} . Следует обратить внимание

также, что в карстовых водах, где концентрации иона кальция высоки, он будет конкурировать с ионами других металлов как в процессах взаимодействия с лигандами, так и в «проходах» через мембраны клеток. Таким образом, кальций оказывает несколько иное влияние на действие комплексообразующих веществ: уменьшает проявления токсичности ионов тяжелых металлов и, что более важно, уменьшает их миграционную подвижность.

Изменение рН раствора вследствие жизнедеятельности растений гороха говорит о возможности обратного воздействия: растения — подземные воды, чью интенсивность нельзя недооценивать.

ИССЛЕДОВАНИЯ ПО ВЫБОРУ ИНДИКАТОРА ПРИ МИГРАЦИОННЫХ ОПЫТАХ

Индикаторы находят широкое применение при миграционных исследованиях. Если использовать индикаторы только для прослеживания движения вод, то они должны соответствовать следующим требованиям: а) хорошо смешиваться или растворяться в подземных водах; б) не изменять физико-химические характеристики воды (плотность, вязкость); в) быть инертными к процессам элиминирования (осаждения, сорбции, ионного обмена, гидролиза, биоаккумулирования, биогеохимического распада и превращения); г) обладать достаточно большой продолжительностью существования (для некоторых радиоактивных и биосубстанций); д) быть определяемыми в очень низких концентрациях; е) быть экономически и практически удобными для применения и не опасными для здоровья.

Проведенные миграционные исследования позволили сделать сопоставительные эксперименты для выяснения главным образом какие индикаторы при прочих равных условиях задерживаются в самой меньшей степени и, следовательно, могут быть использованы достаточно обоснованно для определения основных гидродинамических параметров миграции (n_0 , D) в фильтрующей среде.

Т а б л и ц а 24

Коэффициент распределения $K_{\text{стат}}$ некоторых флуоресцентных веществ

Флуоресцентные вещества	$K_{\text{стат}}$ (в л/кг) для		
	песка	известняка	торфа
Уранин	0,15	0,00	7,09
Эозин	0,70	0,04	23,0
Родамин Б	3,55	0,47	131,3

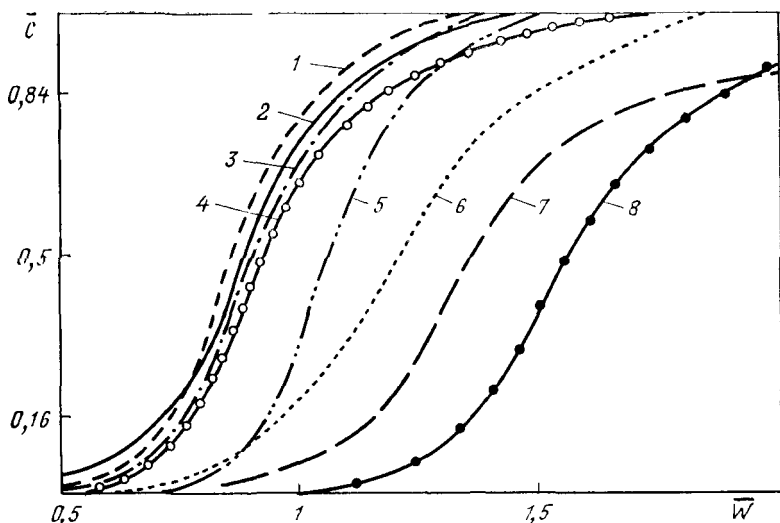


Рис. 51. Кривые миграции индикаторов в пористой среде.

Индикаторы: 1 — D_2O ; 2 — Cl^- ; 3 — ^{82}Br ; 4 — NO_3^- ; 5 — уранин; 6 — HPO_4^{2-} ; 7 — Na^+ ; 8 — F^- .

Для подбора представителя флуоресцентных веществ сначала провели опыты в статических условиях по определению коэффициентов распределения уранина, эозина и родамина Б, диаметр частиц песка в пробах изменялся от 0,063 до 6,3 мм, отношение твердой фазы к жидкой составило 1:2, начальная концентрация 10^{-6} г/л. Гидрохимические определения проводились спектральным флуориметром Перкин Элмер 204. В табл. 24 обобщены данные, рассчитанные по формуле (145) для $\chi_{стат}$.

Для проведения экспериментов в динамических условиях использовалась установка для исследования миграции загрязнителей при постоянной скорости фильтрации (см. рис. 38). При этом состав исходной жидкой фазы и фильтрующей среды был тот же, что и при опытах II серии. Для сопоставления использовали следующие индикаторы: Cl^- ($NaCl$), ^{82}Br ($Na^{82}Br$), HPO_4^{2-} (Na_2HPO_4), NO_3^- ($NaNO_3$), F^- (NaF), уранин (флуоресцин натрия $C_{20}H_{10}O_5Na_2$), Na^+ ($NaCl$, $Na^{82}Br$...). Определения концентрации этих нетоксичных индикаторов проводились по методике, описанной в работе «Унифицированные методы исследования качества вод». Для D_2O (2H_2O), который нами принят в качестве «идеального репера», была разработана методика, не требующая сложной аппаратуры. К 10 мл водной пробы прибавили 5 мкл ацетона и экстрагировали хорошо высушенным (над P_2O_5) 1,1,2-трихлортрифторэтаном. Интенсивность поглощения полученного раствора измеряли в кювете с толщиной слоя 5 см при помощи инфракрасного спектрофотометра Пи Юникен 1100, затем измеряется высота пика D_2O при частоте 2700 см^{-1} .

Параметры	Индикаторы							
	D ₂ O	Cl ⁻	⁸² Br	NO ₃ ⁻	Уранин	HPO ₄ ²⁻	Na ⁺	F ⁻
$\bar{W}_{0,5}$	0,87	0,89	0,91	0,93	1,07	1,22	1,37	1,56
$\Delta_i, \%$	0,0	2,3	4,6	6,9	23,0	40,2	57,5	79,3
$\bar{W}_{0,16}$	0,67	0,68	0,71	0,72	0,89	0,91	1,13	1,13
$\bar{W}_{0,84}$	1,05	1,10	1,12	1,19	1,24	1,50	1,82	1,90
ϵ	1,11	1,00	0,95	0,81	1,06	1,11	0,53	0,74

Результаты опытов с индикаторами приведены на рис. 51 и в табл. 25, где использована безразмерная координатная система $C=f(\bar{W})$ (по данным Б. Великова, П. Пенчева и др.). Известно, что по значению $\bar{W}_{0,5}$ можно вычислить эффективную пористость n_e по отношению к конкретному индикатору фильтрационной среды, заменив в формуле (148) n_0 на n_e . Активная пористость среды n_0 всегда меньше общей пористости n и характеризует ту часть объема пор, которая участвует в фильтрации чистой воды. Следовательно, идеальным индикатором (не подвергающимся процессам элиминирования) будет компонент, для которого n_e меньше n . Самое низкое значение n_e получено для дейтериево-окисного индикатора D₂O ($\bar{W}_{0,5}=0,87$), поэтому он принят за идеальный «реперный» индикатор, а активная пористость пробы песка оценивается как $n_0=n_e^{D_2O}$.

Оценим погрешность, которая возникает, если в качестве «репера» для определения n_0 использовать не D₂O, а другой индикатор. По выражению $\Delta_i = (n_e^i/n_0 - 1) \cdot 100 = (\bar{W}_{0,5}/\bar{W}_{0,5}^{D_2O} - 1) \cdot 100$ вычислена процентная погрешность в значениях активной пористости n_0 по i -му индикатору. Результаты, приведенные в табл. 25, показывают, что с погрешностью до 10 % в значениях активной пористости индикаторы Cl⁻, ⁸²Br и NO₃⁻ могут считаться практически инертными по отношению к физико-химическим процессам элиминирования. Другие индикаторы — уранин, HPO₄²⁻, Na⁺ и F⁻, погрешность для которых значительна (от 23 до 79 %), использовать не рекомендуется. Однако в том случае, когда последние вещества являются загрязнителями, то для них среда представляет собой лучший геохимический барьер. Высокое задерживание F⁻, очевидно, связано с образованием мало растворимых соединений с CaCO₃, содержание которых в пробе очень высоко (см. табл. 19). Замедление движения остальных индикаторов (уранин, HPO₄²⁻, Na⁺) объясняется сорбционными процессами.

Критерий ϵ (152) показывает, что для Na⁺, F⁻ и отчасти NO₃⁻ кинетика процесса взаимодействия с фильтрационной сре-

дой (например, сорбции) усложнена и (или) взаимодействие идет в неравновесных условиях. Это означает, что данные индикаторы не могут быть использованы даже для приблизительного определения коэффициента гидродисперсии D , определение которого вместе с активной пористостью является основной целью полевых индикаторных опытов. Полученные для пористой фильтрационной среды результаты с некоторым приближением могут быть распространены на трещиновато-карстовую среду.

В заключение отметим, что проведенные нами исследования и анализ литературных данных показывают, что для лабораторных условий наиболее подходящим «реперным» индикатором является дейтериевая окись. Можно также использовать Cl^- , $^{82}\text{Br}^-$ и отчасти NO_3^- . Следует отметить близость в миграционной подвижности одного нестабильного радионуклида $^{82}\text{Br}^-$ и стабильного изотопа $^{35}\text{Cl}^-$ при условии, что их миграционные формы одинаковы, хотя и ионные потенциалы не очень близки (ионные потенциалы изотопов одного и того же элемента равны). Для прогнозирования движения радионуклидов в подземных водоносных комплексах, кроме этих двух характеристик, достаточно знать время полураспада. При этом не обязательно проводить эксперименты с нестабильными радионуклидами. В натурных условиях, прежде всего для водовмещающих пород с малой проницаемостью, в качестве индикаторов можно рекомендовать галогениды, а при больших расстояниях между опытными скважинами могут быть использованы и другие подходящие радионуклиды. Для карстовых и других подобных пород можно применять флуоресцентные вещества, детергенты, возможно, споры и бактерии. В соответствии с конкретными гидрогеологическими условиями и поставленными задачами рекомендуется комбинировать индикаторы и методы их определения — от наиболее простых полевых экспресс-методик (кондуктометрия, спектрофотометрия, селективная ион-метрия, объемные методы), атомно-абсорбционных и плазменно-спектрометрических методов до нейтронно-активационного анализа и γ -спектрометрии.

* * *

Результаты экспериментальных лабораторных исследований позволяют сделать следующие выводы.

Главными физико-химическими процессами, способствующими элиминированию (удалению) пестицидов карбаминовой группы при миграции в зоне аэрации, являются сорбция и гидролитический распад, а в зоне насыщения — гидролитический распад. Высокие значения рН благоприятствуют самоочищению водоносных комплексов. При решении прогнозных задач коэффициент распределения K или соответствующий обобщенный параметр элиминирования для пестицидов следует корректировать (увеличивать) пропорционально скоростной константе гидролиза.

Миграция ионов тяжелых металлов в зоне насыщения играет определяющую роль при необратимом элиминировании (задержке), вызываемом, главным образом, гидролизом, осаждением карбонатов и основных солей, сорбцией и диффузией в тупиковых порах (при отсутствии органических комплексообразующих веществ). Этот массообменный процесс (или группа процессов), который отсутствует в большинстве теоретических моделей диффузионно-конвективного массопереноса, имеет ведущее значение во многих наблюдаемых миграционных процессах в пласте, и его следует учитывать. По-видимому, процессы необратимого элиминирования могут проявляться в начале фильтрационного пути загрязненных вод или около пусковой скважины (при проведении полевых миграционных опытов), коренным образом изменяя граничные условия.

В присутствии комплексообразующих веществ (например, растворенных гуминовых кислот в качестве нормальных гидрохимических ингредиентов или НТА как технического загрязнителя) преобладает хемогенное комплексообразование. В результате уменьшается интенсивность водных миграционных форм и фильтрационной среды и, соответственно, увеличивается миграционная подвижность токсичных неорганических загрязнителей. Частичное элиминирование ионов тяжелых металлов вызвано, прежде всего, гетерогенным хелатообразованием. При наличии комплексообразования расчетный миграционный параметр α следует корректировать величиной $\phi \ll 1$.

Техногенно попадающие в подземные воды тяжелые металлы будут задерживаться, прежде всего, в легко ремобилизуемых формах, поэтому при прогнозировании миграции загрязнителей следует учитывать возможность вторичного загрязнения при изменении гидрогеохимических условий (минерализация, pH, Eh, наличие комплексообразующих веществ). В этом плане полезны и опыты, учитывающие влияние форм связывания (элиминирования) и миграции ионов тяжелых металлов на их усвояемость живыми организмами.

Можно утверждать, что часто рекомендуемые в литературе статические опыты для исследования массообменных процессов не могут служить базой при количественном исследовании фильтрационного массопереноса в пласте. Условия взаимодействия в таких опытах весьма отличаются от тех, которые свойственны водоносному пласту. Только в редких случаях, когда явно доминирует равновесная сорбция, правильно выбраны контактное время и отношение твердой фазы к жидкой, значения коэффициентов распределения можно сопоставить с полученными в динамических условиях. В статических опытах можно получить более реальные (не только ориентировочные) значения максимальной емкости элиминирования и некоторые скоростные константы.

Количественную оценку и интерпретацию данных, полученных в динамических условиях, удобнее проводить по методике

трех характерных точек, но она корректна только в равновесных условиях, которые не всегда существуют в водоносных комплексах. Когда ситуация усложнена, необходимы новые концепции и математические модели с применением ЭВМ.

Проведенные лабораторные эксперименты в статических и динамических условиях по описанным методикам позволяют более обоснованно выбрать индикатор в конкретных миграционных опытах, а также модель массопереноса и параметры, характеризующие главные физико-химические (гидрогеохимические) процессы. Результаты исследований могут быть использованы и при прогнозировании роли гидрохимических процессов при искусственном пополнении запасов подземных вод и их очистке для целей питьевого водоснабжения.

Глава 5

ПОЛЕВЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МИГРАЦИИ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ МИГРАЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ЭВМ

Об определении миграционных параметров, в том числе с применением ЭВМ, написано много работ [9, 24, 48 и др.], в которых рассмотрены различные методологические аспекты постановки опытно-миграционных исследований (ОМИ) и обработки их результатов. В настоящей главе изложены некоторые результаты ОМИ, проведенных в типичных для НРБ гидрогеологических условиях, и диагностические возможности программ CORM (см. гл. 3). В отличие от других программ она обладает более широкими возможностями диагностировать выполненные опыты и повышенной достоверностью определения миграционных параметров, так как позволяет представить в изображениях все пять основных моделей массопереноса и оценить качество идентификации опытных данных теоретическим моделям по количественным критериям SSD и R . В этом случае для диагностики используются не отдельные характерные точки выходной кривой $C(t)$ или ее прямолинейная анаморфоза (при которой разброс точек может «скрыть» многие особенности процесса массопереноса), а вся выходная кривая, что повышает достоверность процесса идентификации (см. ниже). Следует отметить, что в опубликованных работах, как правило, слабо освещен вопрос о степени однозначности результатов ОМИ. Чаще всего, обстановка опыта определяется общим гидрогеологическим анализом и оценкой предельных схем, а данные обрабатываются на основании одной из известных моделей массопереноса [24, 30, 41]. Такой анализ действительно необходим и должен выполняться, однако интерес представляет идентификация полученных выходных кривых типового опыта, различным моделям массопереноса для выявления степени их различия и, как следствие, уровня достоверности определе-

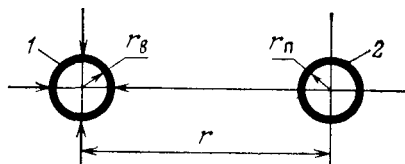
ния по ним параметров массопереноса. Исследования показали, что далеко не всегда удается получить однозначную идентификацию модели массопереноса, даже если хорошо проведен предварительный анализ условий миграционного опыта и выяснены наиболее возможные в этих условиях модели массопереноса. Интерпретация по программе CORM некоторых опубликованных опытов, для которых модель была достаточно обоснована, показала полную возможность интерпретировать те же опыты примерно равноценно по качеству идентификации, используя и другие модели массопереноса.

ПРОВЕДЕНИЕ ОМИ В УСЛОВИЯХ ОТКАЧКИ И ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ВЫХОДНЫХ ДАННЫХ С ПРИМЕНЕНИЕМ ПРОГРАММЫ CORM

Преобладающая часть наших ОМИ проводилась в условиях откачки — при запуске индикатора в скважину, находящуюся вблизи откачивающей. Считается [24, 41 и др.], что эта схема не так представительна для исследования процессов миграции, как опыты в естественных потоках или в условиях нагнетания индикатора, и рекомендуют ее только для определения активной пористости (трещиноватости) водоносных горизонтов. Связано это, прежде всего, с возможностями известных методов для интерпретации данных подобного опыта, которые требуют [4, 9] ввода индикатора как «мгновенного» импульса и регистрации четко выраженного максимума индикаторной волны в откачивающей скважине. Поскольку приведенные выше требования не имеют значения для интерпретации данного опыта с применением программы CORM (миграционные параметры могут определяться на основе всей выходной кривой $C(t)$ и при произвольном изменении концентрации в пусковой скважине), мы приняли схему индикаторных опытов в условиях откачки как основную. Такая схема позволяет: во-первых, проводить ОМИ в более короткий срок, чем при опытах с естественными потоками; во-вторых, провести ОМИ с меньшим количеством индикатора, чем схема индикаторных нагнетаний; в-третьих, непосредственно определить количество индикатора, поглощенного фильтрационной средой во время опыта, сравнивая введенное (в пусковую скважину) и вынесенное (из откачивающей скважины). Это положение имеет исключительное значение, особенно для сильно сорбируемых компонентов.

Опишем кратко использованную методику проведения индикаторных опытов и подготовку входных данных для того, чтобы полученные экспериментальные результаты могли быть интерпретированы с применением программы CORM. Типовая схема кустового участка для миграционных исследований показана на рис. 52. Перед проведением ОМИ все скважины должны быть хорошо прочищены и определен фоновый химический состав подземных вод. Индикаторы вводятся либо каждый самостоятельно, либо комбинированно. В случае комбинирован-

Рис. 52. Схема проведения индикаторных опытов в условиях откачки. 1 — откачивающая скважина; 2 — пусковая скважина; r — расстояние между скважинами; r_v и r_n — радиус откачивающей и пусковой скважин



ного ввода индикаторы должны подбираться так, чтобы между ними не протекали химические реакции, вследствие которых могут образовываться труднорастворимые соединения (см. гл. 4).

Для проведения опытов в условиях стационарного (квазистационарного) режима фильтрации готовят индикаторный раствор и быстро вливают в пусковую скважину. Во время запуска с целью равномерного распределения концентрации по всему стволу скважины вода интенсивно перемешивается (предпочтительно циркуляционным насосом); затем регистрируются изменения концентрации $C_n(t)$ в пусковой и откачивающей (выходной) $C_v(t)$ скважинах. Из пусковой скважины пробы следует отбирать сразу после запуска индикатора (приблизительно по логарифмическому закону во времени), из выходной — равномерно во времени. Кроме того, в процессе опыта необходимо контролировать изменения электрического сопротивления проб и основных показателей гидрогеохимической обстановки (рН, Eh). Опыт считается законченным, когда концентрация в выходной скважине становится приблизительно равной фоновой.

Входные данные для программы CORM подготавливаются по следующей методике, разработанной на основании полученных зависимостей (см. гл. 3).

1. Данные, полученные с кривой $C_0(t)$, представляются в виде таблицы или используются данные, полученные с кривой $C_n(t)$ в пусковой скважине. Эти данные трансформируются путем умножения значения концентрации на коэффициент K_p , учитывающий разбавление индикатора в откачивающей скважине, — $K_p = 0,64 r_n / r$ (см. рис. 52), или при отсутствии экспериментальной кривой $C_n(t)$ вычисляется расчетом по формулам [27]

$$C_0(t) = 0,64 (r_n / r) C^n \exp \left(- \frac{0,2 Q t^2}{r r_n m} \right), \quad (154)$$

$$C^n = M / (V_1 + V_2), \quad (155)$$

где Q — расход откачки; m — мощность водоносного пласта; C^n — начальная концентрация в момент импульса (ввода индикатора); M — масса введенного индикатора; V_1 и V_2 — объем столба воды в пусковой скважине и вылитого индикаторного раствора. Кривая $C_0(t)$ определяется дискретно до времени t_{\max} .

2. Кривая $C_0(t)$ до времени t_{\max} может быть получена на базе реально определенных концентраций в откачивающей скважине, и снятые с нее затем данные представляются в виде таблицы.

3. Расстояние x принимается равным r , а средняя скорость фильтрации определяется по формуле [4, 27 и др.]

$$v = \frac{Q}{\pi m (r + r_b)}. \quad (156)$$

4. Время t_R получается после экстраполяции кривой $C_b(t)$, а время t_{\max} выбирается одним из двух способов: или оно равно продолжительности наблюдения для $C_b(t)$, или соответствует моменту, когда начинаются вариации $C_b(t)$ около какого-то среднего значения.

Отметим, что если в качестве «выходной» скважины используется не сама откачивающая, а какая-нибудь другая (например наблюдательная), расположенная на одном луче между пусковой и откачивающей, методика интерпретации данных опыта с применением CORM не изменится. В этом случае [27] надо только принять, что $K_p=1$ (т. е. нет разбавления индикатора в выходной скважине), а расстояние r_b рассматривать не как радиус откачивающей скважины в формуле (156), а как расстояние от пусковой до выходной скважины.

Описанная методика проведения индикаторных опытов в условиях откачки многократно использовалась в конкретных полевых исследованиях, результаты некоторых рассматриваются ниже.

ОПЫТНО-МИГРАЦИОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В НИЖНЕМЕЛОВОМ КАРСТОВОМ ВОДОНОСНОМ ГОРИЗОНТЕ (РАЙОН г. ШУМЕН, НРБ)

Индикаторные опыты были проведены в процессе опытно-эксплуатационной откачки из скважины, предназначенной для промышленного водоснабжения. В качестве индикаторов использовались флюоресцин (Фл), поверхностно-активное вещество (ПАВ) и бромидный ион (Br^-). Цель опытов — исследование миграции трех индикаторов в условиях гетерогенной (трещинно-карстовой) среды и экспериментальная проверка методики идентификации и интерпретации ОМИ с использованием программы CORM.

Краткая характеристика участка. Опытный участок сложен закарстованными известняками нижнемелового (валанжинского) водоносного горизонта, который является одним из самых мощных и широко распространенных в НРБ водоносных горизонтов. Конструкции скважин и геологический профиль в районе участка показаны на рис. 53. Мощность горизонта, вскрытая скважинами, превышает 525 м, активно закарстованной зоны — не более 100 м. Она залегает на глубине в интер-

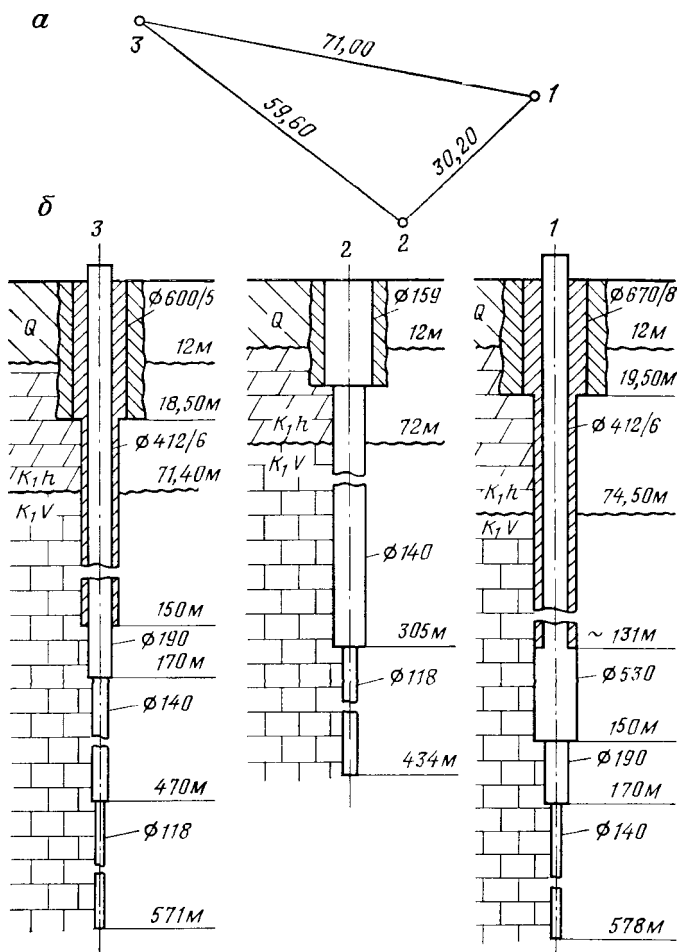


Рис. 53. Схема размещения (а), конструкции скважин и геологический профиль (б) в районе опытного участка вблизи г. Шумен (НРБ)

вале от 180 до 280 м и доказана поинтервальным опробованием откачкой в выходной скважине. Водопроницаемость водоносного горизонта в среднем составила 1750 м²/сут.

Индикаторные опыты проведены в условиях квазистационарной откачки из выходной скважины с дебитом $Q=22,5$ л/с. В пусковую скважину, находящуюся на расстоянии $r=30,2$ м от откачивающей, последовательно были влиты растворы: 1) бромида калия (30 кг КВг растворены в 1000 л воды); 2) ПАВ (130 кг ПАВ — в 1500 л воды); 3) флюоресцина (40 г Фл — в 500 л воды). После запуска последнего индикатора

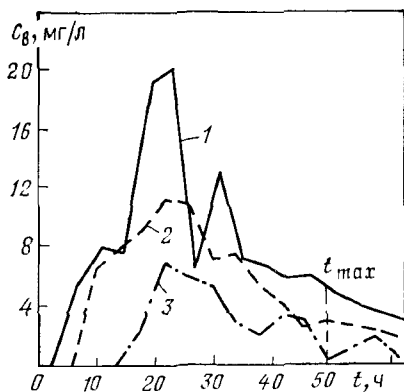


Рис. 54. Изменение концентрации ПАВ, Вг⁻ и Фл в откачивающей скважине во время индикаторного опыта.

1 — ПАВ (в мг/л); 2 — Вг⁻ (в мг/л); 3 — Фл (в мг/л × 10⁻³)

тора в продолжение 6 сут через каждые 4 ч были отобраны пробы воды из откачивающей скважины. Из-за технических затруднений экспериментальным путем не смогли определить изменение концентрации индикаторов в пусковой скважине, поэтому граничное условие $C_0(t)$ при обработке данных опыта рассчитали аналитически по формуле (154). Изменение концентрации Вг⁻, ПАВ и Фл в откачивающей скважине как функции времени с момента их запуска в пусковую скважину показано на рис. 54.

Интерпретация данных ОМИ с применением CORM.
С целью исследования степени

однозначности диагностики опытных данных и результатов идентификации и выявления «работающих» моделей была использована способность программы CORM выполнять диагностику по пяти основным моделям конвективного массопереноса (см. гл. 3).

Для гомогенной среды по вариантам: А — по схеме поршневого вытеснения с учетом равновесной сорбции и необратимого поглощения; В — с учетом дисперсии и равновесной сорбции; С — с учетом дисперсии, равновесной сорбции и необратимого поглощения. Для гетерогенной среды по вариантам: D — с учетом равновесной сорбции в основном слое и диффузии в блоках (схема Ловерье); Е — при наличии необратимого поглощения в основном слое. Заметим, что предварительный гидрогеологический анализ условий опытного участка и проведение опыта показывают, что наиболее вероятными могут быть модели гетерогенной среды (D и E).

Соответственно методике интерпретации данных ОМИ с применением CORM подготовлена следующая исходная информация:

1. Определена функция $C_0(t)$ для различных индикаторов в пусковой скважине по формуле (154). Радиус скважины принят равным 0,07 м, мощность m активно закарстованной зоны 100 м. В этом случае формула (154) примет вид

$$C_0(t) = 0,00148 C^0 \exp(-0,0766t). \quad (157)$$

Начальная концентрация C^0 , определенная в соответствии с формулой (155) для отдельных индикаторов, составила

Т а б л и ц а 26

Значения $C_0(t)$ для отдельных индикаторов

$t, \text{ч}$	$C_0, \text{мг/л}$		
	Br^-	ПАВ	Фл
0	5,33	29,43	11,00
1	4,93	27,30	9,96
2	4,57	25,26	9,23
5	3,60	19,84	7,27
10	2,48	13,39	5,00
20	1,15	6,37	2,33
50	0,115	0,64	0,23

(в мг/л): Br^- 3600; ПАВ $2 \cdot 10^4$; Фл 7,27. На основании формулы (157) и по значениям концентрации C^0 для Br^- , ПАВ и Фл были определены величины $C_0(t)$, представленные в табл. 26.

2. Кривые $C(t)$ для отдельных индикаторов составлены на базе опытных кривых $C_b(t)$ в откачивающей скважине, но ограниченных до времени $t_{\max} = 49,54$ ч, так как после этого момента изменение концентрации незначительно и находится в границах погрешностей химических анализов (см. рис. 54).

3. Средняя скорость фильтрации v вычислена по линии тока между пусковой и откачивающей скважинами по формуле (156). При $v_b = 0,08$ м средняя скорость $v = 0,0085$ м/ч.

Результаты решения, полученные на ЭВМ ЕС-1022 (общая продолжительность машинного времени для трех примеров — 1,24 мин), обобщены в табл. 27. По этим результатам можно сделать некоторые общие выводы об условиях миграции различных индикаторов в процессе опыта и возможных аспектах интерпретации полученных данных.

1. Самую качественную идентификацию для Br^- и Фл дает вариант С (модель гомогенной среды с необратимым поглощением), имеющий минимальные значения SSD (см. табл. 27). При этом процессы необратимого поглощения более интенсивны для Br^- , чем для Фл, о чем свидетельствуют его более высокие значения параметра γ . Значения параметра n_e определены по данным миграции и для обоих индикаторов очень близки, соответственно 0,0045 и 0,0052 (вариант С). Это позволяет сделать вывод, что в конкретном случае значения параметра n_e практически не зависят от типа индикатора, т. е. можно считать, что он характеризует в основном только емкостные свойства фильтрационной среды. Необратимое поглощение Br^- и Фл можно объяснить, по-видимому, потерей вещества в тупиковых порах и в трещинах среды. Различная степень задержания обоих индикаторов отражается и на величине коэффициента гидродисперсии D , определенной по дан-

Т а б л и ц а 27

Результаты определения миграционных параметров по данным миграции Вг⁻, ПАВ и Фл

Варианты моделей	Индикаторы	n_e	$\gamma, \text{ч}^{-1}$	$D, \text{м}^2/\text{ч}$	$B, \text{ч}^{-1/2}$	$SSD, \text{ч}$	R
A	Вг ⁻	0,00229	0,0038	—	—	0,13672	0,99867
	ПАВ	0,00146	0,00022	—	—	0,29248	0,99070
	Фл	0,00453	0,00011	—	—	0,07813	0,98293
B	Вг ⁻	0,01125	—	0,14574	—	1,39844	0,98631
	ПАВ	0,00555	—	0,16512	—	0,46069	0,98531
	Фл	0,00523	—	0,00322	—	0,00391	0,99915
C	Вг ⁻	0,00448	0,00029	0,03587	—	0,00391	0,99996
	ПАВ	-0,00629	0,00067	-0,34133	—	0,25293	0,99196
	Фл	0,00515	0,00001	0,00288	—	—	1,00000
D	Вг ⁻	0,00076	—	—	0,00153	0,00391	0,99996
	ПАВ	0,00061	—	—	0,00087	0,10192	0,99679
	Фл	0,00421	—	—	0,00038	0,05078	0,98894
E	Вг ⁻	0,00091	0,00004	—	0,00139	0,00391	0,99996
	ПАВ	-0,00047	-0,00028	—	0,00199	0,01782	0,99944
	Фл	0,00341	-0,00027	—	0,00132	0,01953	0,99580

ным миграции (например, для Вг⁻ $D=0,036 \text{ м}^2/\text{ч}$; Фл= $0,003 \text{ м}^2/\text{ч}$; см. табл. 27).

Отметим, что только для Вг⁻ модели гетерогенной среды (варианты D и E) практически равнозначны варианту C гомогенной среды по качеству идентификации экспериментальных данных ОМИ. Однако определенные на их базе миграционные параметры не имеют ясного физического смысла. Это относится преимущественно к параметру n_e (например $n_e = 0,00076$), который, очевидно, не столько имеет смысл степени трещиноватости, сколько его надо воспринимать как некоторый обобщенный параметр модели массопереноса, которая проявила себя в процессе ОМИ.

2. Самую качественную идентификацию для ПАВ дают модели E и D (гетерогенная среда), имеющие низкие значения SSD (см. табл. 27). Однако полученные по этим моделям миграционные параметры не имеют физического смысла. Например, параметр n_e получается с отрицательным знаком (вариант E) или имеет нереально малое значение ($n_e=0,00061$) для варианта D. В общем можно отметить, что миграция ПАВ не описывается достаточно удовлетворительно известными моделями массопереноса (они заложены в программе CORM). Это связано со способностью ПАВ к распаду, а это процесс, который, очевидно, не описывается удовлетворительно массообменными членами в моделях массопереноса (см. гл. 3). В связи с этим процесс миграции ПАВ в подземных водах нуждается в дальнейшем изучении.

ОПЫТНО-МИГРАЦИОННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ В ВОДОНОСНОМ ГОРИЗОНТЕ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ АЛЛЮВИАЛЬНЫХ ОТЛОЖЕНИЙ (РАЙОН г. СОФИИ, НРБ)

Основная цель ОМИ состояла в экспериментальном исследовании условий миграции ионов марганца в подземных водах аллювиальных галечниково-песчаных отложений со сравнительно большим количеством пылеватой и глинистой фракции и возможных условий достоверной диагностики и интерпретации полученных результатов.

Опытный куст, включающий три скважины (рис. 55), был сооружен в центральной части г. Софии. В этом районе проведены исследования, которые позволили весьма детально выяснить гидрогеологические условия опытного участка в плане и разрезе. Сверху залегают суглинки мощностью около 5 м, которые можно считать относительным водоупором. Ниже находятся водоносные четвертичные отложения, представленные в основном галькой с песчаным заполнителем, которые образуют субнапорный водоносный горизонт, имеющий распространение на широкой площади. Галька содержит тонкослоистые глинистые и песчаные прослойки и линзы, которые залегают хаотично и не затрудняют водообмен между галечными слоями, и можно считать, что водоносный горизонт по глубине представляет относительно однородное тело. Песчано-галечниковая толща в зоне опытного куста характеризуется примерно следующим гранулометрическим составом: валуны и галька 2—200 мм—60 %; песок 0,1—2 мм—32 %; пыль 0,015—0,1 мм — 8 %. Под четвертичным горизонтом залегает выдер-

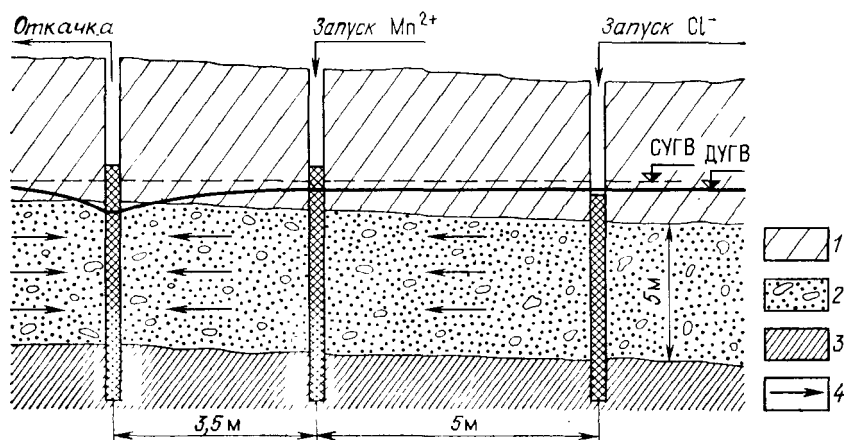


Рис. 55. Схема опытного участка в районе г. София (НРБ).

Отложения: 1 — суглинки, 2 — песчано-галечниковые, 3 — глина, 4 — направление притока воды

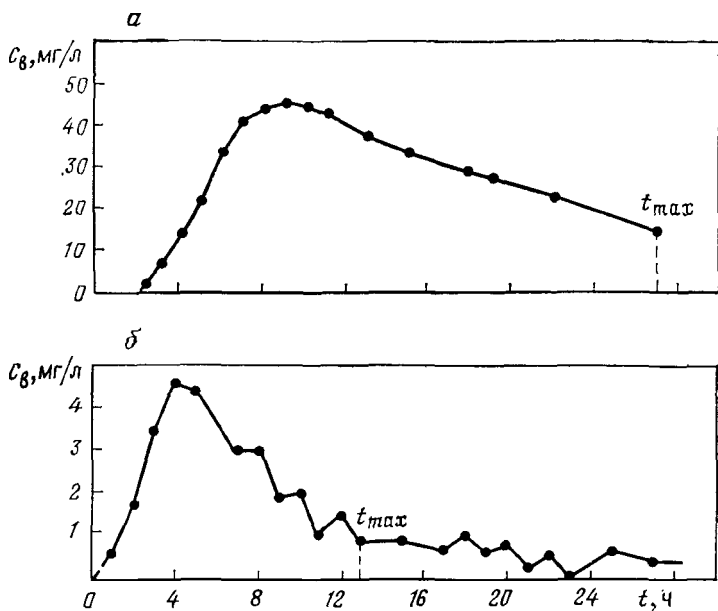
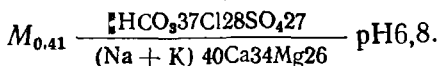


Рис. 56. Изменение концентрации Cl^- (а) и Mn^{2+} (б) в откачивающей скважине

жанный пласт плиоценовых глин, который в районе куста имеет мощность более 3 м. Подземные воды пресные, с химическим составом, выраженным формулой Курлова:



Опытной откачкой установлено, что водопроницаемость горизонта около 240 м²/сут, коэффициент фильтрации равен в среднем 45 м/сут, коэффициент упругой водоотдачи — 0,003.

Особенности методики проведения ОМИ. На опытном кусте последовательно в процессе откачки были проведены два индикаторных опыта — один с Cl^- -ионом, второй с Mn^{2+} -ионом (см. рис. 55). Расход откачивающей скважины был 1,5 л/с, пробы из нее отбирались каждый час в течение 30 ч для первого и около 90 ч — для второго опыта. Выходные кривые для Cl^- и Mn^{2+} показаны на рис. 56. Видно, что кривая $C_b(t)$ для этих индикаторов имеет хорошо выраженную асимметричную форму и продолжительный «шлейф» (особенно для Mn^{2+}) после прихода основной массы компонента. Это является диагностическим признаком того, что миграция индикаторов, вероятно, сопровождается процессами необратимого поглощения, или что фильтрационная среда проявляет себя как гетерогенная во время опыта.

Т а б л и ц а 28

Значения функции $C_0(t)$ для Cl^- и Mn^{2+}

$t, \text{ч}$	$C_0(t), \text{мг/л}$	
	Cl^-	Mn^{2+}
0	282	169
0,1	278	162
1	238	112
2	201	174
5	121	21,6
10	51,9	2,76
15	22,3	0,35
20	9,5	—
30	1,8	—

Интерпретация данных ОМИ с применением CORM. Обработка данных выполнена согласно разработанной методике. В связи с тем что граничные концентрации в процессе опыта измерить не удалось, математические выражения для $C_0(t)$, определенные из уравнения (154), с учетом ряда параметров имеют следующий вид:

для иона хлора

$$C_0(t) = 282 \exp(-0,1694t) \quad (158)$$

при $M = 6,25 \cdot 10^6$ мг/л, $V_1 = 170$ л, $V_2 = 80$ л, $r_n = 0,15$ м, $r = 8,5$ м, $r_w = 0,2$ м, $Q = 5,4$ м³/ч, $m = 5$ м;

для иона марганца

$$C_0(t) = 169 \exp(-0,4114t) \quad (159)$$

при $M = 1,54 \cdot 10^6$ мг/л, $V_1 = 170$ л, $V_2 = 40$ л, $r_n = 0,15$ м, $r = 3,5$ м, $r_w = 0,2$ м, $Q = 5,4$ м³/ч, $m = 5$ м. По этим зависимостям рассчитаны значения функции $C_0(t)$ для двух индикаторов (табл. 28).

Интервал времени t_{\max} , по которому составлена кривая $C_0(t)$, используемая при интерпретации данных с помощью CORM, был разным для Cl^- и Mn^{2+} . Для Cl^- время t_{\max} совпадает с фактической продолжительностью наблюдений и равно 27 ч, а для Mn^{2+} — время $t_{\max} = 12,78$ ч, т. е. кривая $C_0(t)$ ограничивается моментом, когда начинается «шлейф» (см. рис. 56). Время запаздывания t_R , как видно из рис. 56, установлено экстраполяцией и равно 2 ч для Cl^- и 0,42 для Mn^{2+} . Средняя скорость фильтрации вычислена по уравнению (156): $v_{\text{Cl}^-} = 0,041$ м/ч и $v_{\text{Mn}^{2+}} = 0,096$ м/ч. Полученные результаты идентификации и интерпретации опытных данных обобщены в табл. 29. Анализ результатов позволяет сделать следующие выводы.

Для иона хлора. Массоперенос Cl^- лучше всего описывается моделями гетерогенной среды (варианты Е и D), для

Таблица 29

Результаты определения миграционных параметров по ионам хлора и марганца при реальной кривой $C_0(t)$

Вариант модели	n_e	$\gamma, \text{ч}^{-1}$	$D, \text{м}^2/\text{ч}$	$B, \text{ч}^{-1/2}$	$SSD, \text{ч}$	R
Для иона хлора						
A	0,01999	0,00762	—	—	0,06250	0,99829
B	0,16019	—	0,33128	—	0,42627	0,98828
C	0,06071	0,00546	0,09652	—	0,00635	0,99983
D	0,00437	—	—	0,02200	0,00244	0,99993
E	0,00441	0,00002	—	0,02195	0,00171	0,99995
Для иона марганца						
A	0,05123	0,09580	—	—	0,01440	0,99966
B	-0,16865	—	-0,13910	—	0,01343	0,99968
C	-0,15290	0,00687	-0,12913	—	0,01245	0,99970
D	-0,04553	—	—	0,19421	0,02466	0,99941
E	0,00857	0,5373	—	0,08545	0,00171	0,99996

которых значения SSD минимальны (см. табл. 29). Однако надо отметить, что модель гомогенной среды с необратимым поглощением (вариант С) описывает экспериментальные данные опыта примерно равноценно модели гетерогенной среды. Миграции иона хлора сопутствует интенсивная потеря вещества по пути фильтрации, о чем свидетельствуют балансовые вычисления количества вещества, которое было задержано фильтрационной средой во время опыта. Из выходной скважины за 24 ч вынесено 4,77 кг Cl^- , а в пусковую скважину запущено 6,25 кг, т. е. около 24 % от общего количества использованного индикатора было задержано в тупиковых порах водоносного горизонта.

Миграционный параметр n_e в вариантах D и E гетерогенной среды имеет нереально низкие значения ($n_e=0,004$) для активной пористости аллювиальных отложений и не должен восприниматься как параметр, отражающий емкостные свойства фильтрационной среды. Однако этот параметр, определенный на базе модели гомогенной среды (вариант С), дает более реальное для активной пористости значение ($n_e=0,06$). Несмотря на то что активная пористость для галек с песчаным заполнителем близка к общей пористости и она в конкретном случае составляет около 0,15—0,20, мы считаем полученное значение активной пористости ($n_0=0,06$) достоверным, потому что, по-видимому, в условиях разнотерности большая часть порового пространства занята тупиковыми порами, которые не участвуют в фильтрационном процессе.

Следует отметить, что модель гомогенной среды с равновесной сорбцией (вариант В), которая обычно используется для интерпретации данных индикаторных опытов с инертными

компонентами, в конкретном опыте дает самое низкое качество интерпретации опытных данных (имеет максимальное значение SSD , см. табл. 29). Это связано с тем, что модель В не учитывает необратимого поглощения (потери) вещества в ту-никовых порах среды, которое, как видно, имеет более существенное значение в процессе массопереноса, чем механическая дисперсия.

Для иона марганца. Анализ табл. 29 показывает, что все модели (исключая варианты А и Е) дают физически нереальные (отрицательные) значения эквивалентной пористости n_e и гидродисперсии D . Это связано с исключительно интенсивным поглощением Mn^{2+} фильтрационной средой, что подтверждается балансом количества Mn^{2+} , задержанного фильтрационной средой во время опыта. В пусковую скважину C_1 было запущено 1,540 кг Mn^{2+} , а из выходной скважины за 13 ч вынесено (см. рис. 56, б) только 0,161 кг. За период продолжительностью от 13 до 80 часов при средней концентрации Mn^{2+} — 0,41 мг/л вынесено еще 0,166 кг, т. е. за все время опыта вынесено суммарно 0,327 кг, или фильтрационной средой задержано более 79 % запущенного в качестве индикатора марганца.

Интересен вопрос, почему модель гомогенной среды с необратимым поглощением (вариант С), которая теоретически должна «работать» хорошо, в конкретном случае дает отрицательные значения n_e и D (см. табл. 29). Как видно, кривая $C_b(t)$ (см. рис. 56, б) в течение 12 ч после начала опыта имеет обычную форму, характерную для опытов со сравнительно слабосорбируемыми компонентами при импульсном вводе. Если бы ион марганца поглощался равномерно всей средой (подобно иону хлора), то модель С должна была бы давать физически реальные миграционные параметры. Очевидно, большая часть Mn^{2+} элиминируется еще вблизи пусковой скважины. Таким образом, непосредственно в водоносный пласт поступает индикатор с гораздо более низкой концентрацией, чем та, которая определена по формуле (159). Из этого следует, что для получения реальных значений миграционных параметров на основе модели С опытные данные индикаторного опыта должны быть интерпретированы такой кривой $C_0(t)$, которая отвечала бы реально поступившему количеству индикатора в водоносный горизонт. Так как предварительно неизвестно, какое количество марганца задержано непосредственно в зоне пусковой скважины, то путем последовательной интерпретации данных, полученных в результате опыта, по различным (теоретически составленным) кривым $C_0(t)$ было определено действующее в ходе опыта граничное условие. Оказывается, что модель С «работает» хорошо (дает физически реальные величины миграционных параметров), когда абсолютные значения кривой $C_0(t)$ для Mn^{2+} (см. табл. 28) уменьшены приблизительно в четыре раза, т. е. если принять, что 60—75 % запущенного количества марганца задерживается в зоне пусковой сква-

Т а б л и ц а 30

Результаты определения миграционных параметров по иону марганца при скорректированной кривой $C_0(t)$

Вариант модели	n_e	$\gamma, \frac{1}{\text{ч}}$	$D, \frac{\text{м}^2}{\text{ч}}$	$B, \frac{1}{\text{ч}^2}$	$SSD, \frac{1}{\text{ч}}$	R
A	0,05122	0,05699	—	—	0,01343	0,99909
B	—0,86418	—	—0,78560	—	0,22314	0,98484
C	0,34271	0,07477	0,127984	—	0,00122	0,99992
D	—0,00645	—	—	0,11565	0,00224	0,99986
E	0,00848	0,01483	—	0,08562	—	0,99998

жины. Результаты интерпретации данных при скорректированной кривой $C_0(t)$ приведены в табл. 30. Несмотря на то что значения параметров вычислены ориентировочно, они убедительно подтверждают достоверность сделанных ранее предположений относительно особенности миграции ионов марганца, а именно что основная его часть задерживается в водоносном пласте в зоне поступления индикатора, после чего меньшая его часть движется с водой в составе слабосорбируемых миграционных форм. Отметим, что сделанные выше выводы хорошо согласуются с результатами лабораторных экспериментов, описанных в гл. 4, где способность иона марганца и ионов других тяжелых металлов элиминироваться вблизи «пускового сечения» выявлена и детально рассмотрена с физико-химических позиций.

* * *

Несмотря на относительно ограниченный объем опытно-миграционных исследований, интерпретированных при помощи программы CORM, на их основе можно сделать некоторые принципиальные выводы как по отношению применимости отдельных моделей массопереноса для интерпретации данных ОМИ, так и по отношению физического смысла определяемых миграционных параметров.

1. Самое лучшее качество идентификации и интерпретации данных ОМИ как в лабораторных, так и в полевых условиях дают трехпараметрические модели массопереноса. Вариант С (для гомогенной среды) — конвективный перенос плюс дисперсия, равновесная сорбция и необратимое поглощение. Вариант Е (для гетерогенной среды) — конвективный перенос плюс равновесная сорбция и необратимое поглощение в основном слое и диффузия в ограничивающих слабопроницаемых слоях. Это связано с тем, что в обоих моделях имеется массообменный член, учитывающий процессы необратимого поглощения, которые, как выяснилось выше, имеют весьма существенное значение в массопереносе.

Из двухпараметрических моделей лучше «работает» мо-

дель D гетерогенной среды. Вариант D (схема Ловерье) — конвективный перенос и равновесная сорбция в основном слое и диффузия в ограничивающих слабопроницаемых слоях. Эта модель часто приближается по качеству идентификации к трехпараметрическим моделям.

Классическая модель гомогенной среды — вариант В (дисперсионная модель) — конвективный перенос с равновесной сорбцией, почти во всех интерпретированных опытах дает самое низкое качество идентификации и интерпретации экспериментальных данных. Это связано, по-видимому, с отсутствием массообменного члена, учитывающего процессы необратимого поглощения вещества в тупиковых порах среды.

2. Анализ полученных результатов интерпретации ОМИ при помощи CORM показывает, что предварительные оценки справедливости отдельных моделей массопереноса на основе общих геологических представлений фильтрационной среды (гомогенная или гетерогенная) далеко не всегда отвечают адекватно действительной их применимости (доказанной сопоставительным анализом качества идентификации). Например, при опытах в трещинно-карстовой среде самая качественная интерпретация опытных данных получается для модели гомогенной среды (вариант С). Это подтверждает еще раз необходимость обработки данных по всем моделям массопереноса (как это выполняется в программе CORM).

3. В определенные по отдельным моделям массопереноса миграционные параметры нельзя вкладывать слишком узкий физико-химический смысл, поскольку они отражают обобщенно разнообразные процессы взаимодействия фильтрационной среды с мигрирующим компонентом. Это особенно относится к параметру n_e . Анализ полученных значений этого параметра утверждает, что очень редко на основе этих значений можно оценить активную пористость фильтрационной среды, даже если в качестве индикатора используются такие «инертные» компоненты, как Cl^- , флуоресции или ^{131}I . Все-таки значения n_e , полученные на основе модели гомогенной среды и прежде всего варианта С, обычно лучше соответствуют нашим представлениям об активной пористости, нежели значения, определенные на основе модели гетерогенной среды (варианты D и E).

Таким образом, из всех пяти моделей массопереноса в качестве основной при решении практических прогнозных задач миграции загрязнителей в водоносных горизонтах следует считать вариант С. Чтобы подтвердить этот вывод, необходимо, конечно, проинтерпретировать с помощью CORM более обширный фактический материал, в основном из полевых ОМИ, выяснить влияние масштабного эффекта на устойчивость значений миграционных параметров и связать применимость модели массопереноса с особенностями гидрогеохимической обстановки.

ПРОГНОЗ ВЛИЯНИЯ ОРОШЕНИЯ НА КАЧЕСТВО ПОДЗЕМНЫХ ВОД

ГИДРОГЕОХИМИЧЕСКИЕ ПРОГНОЗЫ В ПРОБЛЕМЕ ОХРАНЫ ПОДЗЕМНЫХ ВОД НА МЕЛИОРИРУЕМЫХ ТЕРРИТОРИЯХ

Охрана окружающей среды (орошения) связана с предотвращением ухудшения качества подземных вод, вторичного засоления и подтопления орошаемых и богарных земель. Эти негативные изменения устанавливаются по результатам гидрогеолого-мелиоративных прогнозов, характеризующим в совокупности изменения гидрогеодинамической и гидрогеохимической обстановок под влиянием орошения. По этим данным выявляются неблагоприятные тенденции в развитии почвенных, инженерно-геологических и других процессов на орошаемых территориях. Наиболее сложные и трудно устранимые негативные последствия связаны с гидрогеохимическими процессами, которые протекают в самой верхней части гидрогеологического разреза земной коры — в зоне аэрации и грунтовых водах. Водные режим и баланс подземных вод легче поддаются регулированию и направленному изменению. Гидрогеохимические процессы обладают большой инертностью, часто вызывают необратимые изменения, характеризуют сложный комплекс гидродинамических и физико-химических взаимодействий, которые протекают в системе горная порода — подземная вода. В связи с этим гидрогеохимический режим и солевой баланс труднее регулируются и слабо поддаются направленному изменению. Отсюда следует, что прогноз изменений, возникающих в гидрогеохимических процессах на мелиорируемых землях, — важнейшая составляющая гидрогеологических прогнозов. При этом основным фоном, определяющим направленность их течения, является гидродинамический режим и структура потока грунтовых вод, формирующиеся при взаимодействии грунтовых вод с поливными, инфильтрующимися через зону аэрации.

В мелиоративной практике гидрогеологические прогнозы, в том числе и гидрогеохимические, рассматриваются обычно только с мелиоративных позиций. Выявляются площади при подтоплении, на которых может начаться развитие вторичного засоления, может возникнуть неблагоприятная мелиоративная обстановка, резко ухудшающая условия использования сельскохозяйственных земель, и, чтобы улучшить эти условия, необходимо проектировать определенные агротехнические мероприятия. Однако результаты гидрогеологических прогнозов имеют более общее значение и должны трактоваться с позиций не менее чем трех проблем: мелиоративной, охранной и экологической. Структурная схема содержания и назначения гидрогеологических прогнозов на мелиорируемых территориях показана на рис. 57.

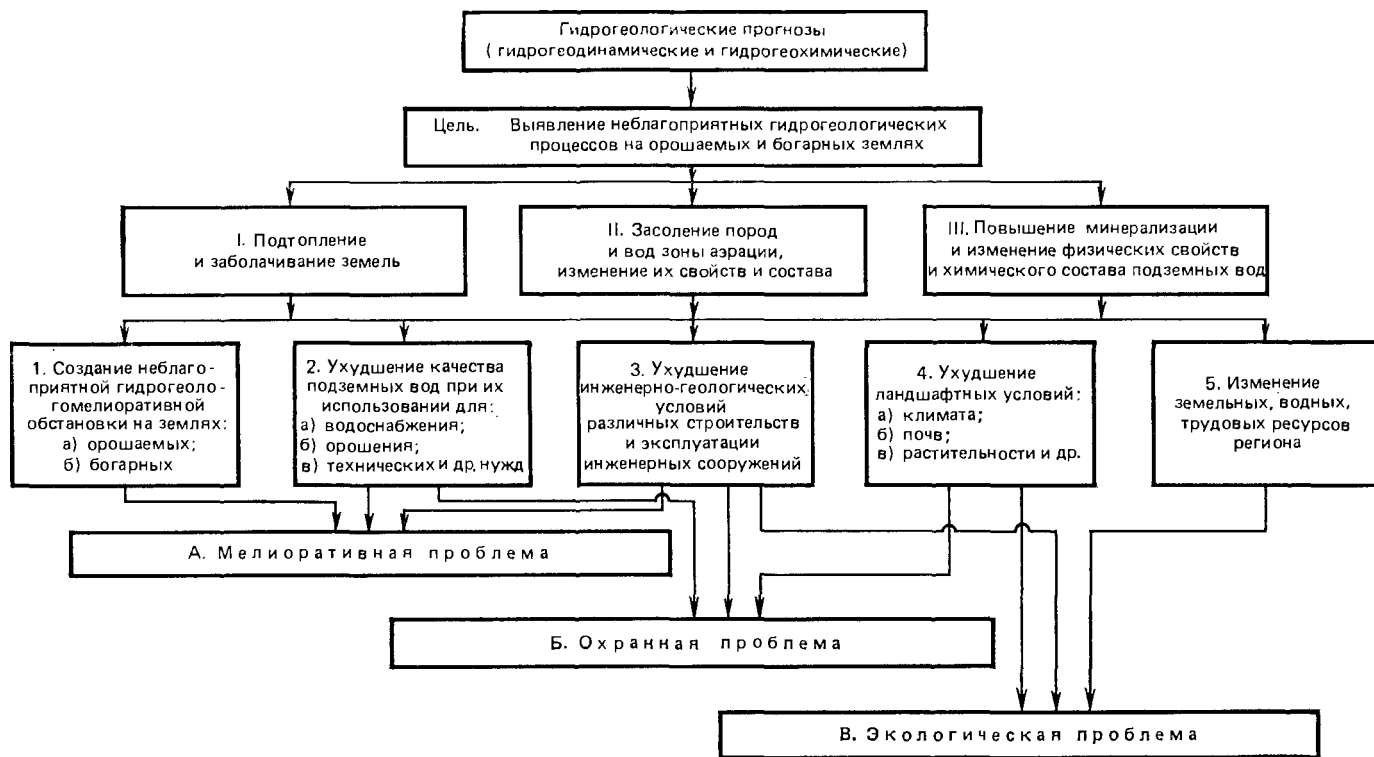


Рис. 57. Структурная схема назначения гидрогеологических прогнозов на мелнируемых землях. По И. К. Гавиц

Охранная проблема включает прежде всего предупреждение ухудшения качества подземных вод водоносных горизонтов и зоны аэрации, связанных с повышением их минерализации, появлением токсичных солей вследствие геохимических изменений состава вод, загрязнением пестицидами и другими компонентами при орошении. Эти гидрогеохимические изменения в совокупности с гидродинамическими во многом определяют и ухудшение гидрогеологических и инженерно-геологических свойств и в первую очередь пород зоны аэрации, вызывая их деструктуризацию, увеличение дисперсности, изменение пористости и, как следствие, ухудшение прочностных, фильтрационных и других свойств.

Экологическая проблема включает не только предупреждение нежелательных изменений в ландшафтных условиях, но и в более общем случае соотношения водных, земельных и трудовых ресурсов. Возникновение значительных зон подтопления и засоления земель не только на орошаемых землях, но и вне массивов орошения может привести к угнетению растительности на большой площади, изменению климата и в итоге к общему ухудшению природной, хозяйственной и даже социальной обстановки региона.

Следовательно, гидрогеологические и в том числе гидрохимические прогнозы на мелиорируемых и прилегающих к ним территориях играют важнейшую роль в решении задач охраны подземных вод от нежелательных изменений их качества. В связи с этим могут существенно измениться условия использования подземных вод в хозяйственно-питьевом и промышленном водоснабжении, повторном использовании этих вод для орошения и др.

Методам составления гидрохимических прогнозов на орошаемых территориях посвящена достаточно обширная литература, в которой значительное место отведено использованию теории массопереноса. Это работы С. Ф. Аверьянова, Н. Н. Веригина, Л. М. Рекса, В. А. Барона, В. Г. Самойленко, Д. Ф. Шульгина и др. Однако, несмотря на большое число имеющихся аналитических решений и интересных вычислительных программ для ЭВМ, позволяющих математически исследовать достаточно разнообразные и сложные случаи массопереноса, многие важные в методологическом отношении общие вопросы составления и оценки результатов гидрогеохимических прогнозов разработаны недостаточно. В первую очередь это вопросы миграционной или гидрогеохимической схематизации, обоснования достоверности выбора модели массопереноса и определяемых по ней миграционных параметров на основе данных опытно-миграционных работ, выбора прогнозной модели для изучаемых гидрогеохимических процессов, инженерная оценка достоверности полученных результатов и др. Остановимся подробнее на тех, которые исследуются в настоящей книге и в той или иной мере будут затронуты ниже.

Анализ литературы по гидрогеологическому прогнозированию [39] и собственный опыт в этой области [3, 7, 39] позволяют сделать вывод о том, что гидрогеологические и гидрогеохимические прогнозы являются в настоящее время одним из мощных (по своим возможностям) видов гидрогеологических исследований при изысканиях. Такая постановка ведет к появлению важных в методологическом отношении положений, которые довольно общие и относятся к любым прогнозам.

1. Как и изыскания, гидрогеологические прогнозы должны быть стадийными и заранее планироваться, на каждой последующей стадии в зависимости от результатов предыдущей должны уточняться их содержание, задачи и методы, которыми они будут выполняться.

2. Прогнозы должны обладать также свойствами целостности, обратной связи, адаптации и оптимальности.

3. Эти принципы должны относиться ко всем основным этапам прогноза.

— схематизации (гидродинамическая и гидрогеохимическая) гидрогеологических условий;

— выбору и обоснованию математических моделей изучаемых процессов;

— методам составления прогнозов и инженерной оценке их результатов;

— контролю за результатами прогнозов по данным режимных наблюдений и регулированию создающейся гидрогеохимической обстановки.

Связь прогнозов со стадийностью изысканий всегда использовалась гидрогеологами. Однако очень часто задачи и методы прогноза определяются в весьма общей форме. Методика изысканий не имеет тесной связи с предполагаемыми методами прогноза. Нередко, особенно в мелиоративной практике, методы прогноза определяются только в процессе камеральной обработки материалов изысканий, в результате чего часто выясняется нехватка одних данных и излишек других. Принцип планирования требует предварительного конкретного обдумывания задач и методов прогноза для всех стадий до начала изысканий. Совершенно ясно, что гидрогеологи должны использовать не только интуицию и опыт, но и применять количественный метод, который позволяет достаточно быстро рассматривать конкурирующие типовые варианты подхода к изысканиям и выбирать из них наиболее целесообразный. Таким методом является разведочное моделирование. Отметим, что подобное планирование — один из элементов целенаправленного руководства разведочным процессом. Такое планирование включает положение о целостности, адаптации и обратной связи прогнозов. О том, что изыскания должны строиться с учетом этих принципов, говорится в работах М. В. Раца, Г. К. Бондарика, И. С. Комарова и др. по инженерной геологии, а также в работах Л. С. Язвина, В. А. Мироненко, И. К. Га-

вич, В. В. Перцовского и др. по гидрогеологии. Эти принципы должны соблюдаться и при прогнозировании [7, 39]. Непрерывность говорит о том, что постоянно по мере накопления информации от стадии к стадии гидрогеологические прогнозы должны уточняться. При этом также уточняются схематизация гидрогеологических условий, выбор и обоснование расчетных параметров, совершенствуется модель объекта, более полно в ней отражается установленный механизм ее функционирования, т. е. идущие в ней гидродинамические и гидрогеохимические (и другие) процессы, математическая форма их описания и, как следствие, методы выполнения самих прогнозов. Такое последовательное совершенствование прогнозных моделей объекта включает принцип адаптации, но он был бы неполным, если не сказать о корректировке самой схемы изысканий, объемов и видов работ, методике их выполнения для каждой последующей стадии по результатам составленных прогнозов на предыдущей. С таким назначением прогнозы пока не рассматриваются. Обратим внимание на то, что при целенаправленном планировании изысканий возможные варианты их могут выполняться на математических моделях, построенных для конкретной территории, или в более общем виде процесс разведки может представляться на математических моделях, отображающих типовые гидрогеологические условия.

Принцип обратной связи предполагает, что итогом прогноза должна быть оценка его качества по результатам работы основного инженерного сооружения и эффективности его действия. По отношению к мелиоративным задачам с учетом вопросов охраны подземных вод и природной среды в целом в этом случае следует иметь в виду не только мелиоративную оценку территории, но и оценку изменения качества и количества подземных вод и нарушение существующего экологического равновесия. Как конечный результат прогноза следует оценка работы всей оросительной системы в целом, например по повышению урожая или сохранению в заданных пределах качества и количества подземных вод, а также природной обстановки всей территории, включая и земли, на которых сказывается влияние орошения. Это очень сложная задача, поэтому в качестве первых подходов ее решения можно рассматривать как конечный результат гидрогеологического прогноза работу отдельных элементов оросительной системы, например работу дренажных сооружений или водозаборов, располагающихся на изучаемой территории.

Важным элементом в адаптации и реализации обратной связи при прогнозах является корректировка по результатам прогноза схемы организации и ведения наблюдений за режимом и балансом подземных вод и в зоне аэрации, структуры наблюдательной сети (число и размещение точек и др.).

Принцип оптимальности прогнозов предполагает получение рационального комплекса информации, обеспечивающей эко-

номически эффективное решение конечной инженерной задачи, целенаправленное выполнение изысканий и рациональное ведение контроля за режимом и балансом подземных вод по созданной сети наблюдательных точек.

Принцип целостности для процесса изысканий и прогнозирования в известных нам работах не обсуждался. Развитие системного подхода, в том числе в гидрогеологии, позволяет утверждать, что в настоящее время названные выше принципы построения изысканий и составления прогнозов должны быть дополнены еще одним, суть которого заключается в следующем. При изучении объекта следует иметь в виду, что он как система должен быть соединен многочисленными разными связями с аналогичными по размерам (рангу) гидрогеологическими и другими объектами-системами, должен входить как составная часть в такие же, но только более крупные (нижнего ранга) системы. В то же время слагающие его элементы также являются системами, но более высокого ранга. Для всех них типичны свои связи и взаимодействия. Это значит, что при выделении объекта для изучения мы должны определить его ранг, найти все связи с внешней (по отношению к нему) и внутренней средами и оценить, какие потери и преимущества мы получаем в результате разрыва связей, а в процессе изысканий и прогнозирования от стадии к стадии оценить эти связи, потери и преимущества и ввести необходимую корректировку.

Все названное особенно важно иметь в виду при схематизации гидрогеологической обстановки объекта, оценке его гидродинамических и гидрогеохимических условий. При этом отметим, что по принципу целостности, или системности, необходимо к данному объекту-системе каждый раз применять двойной подход. С одной стороны, объект надо рассматривать как единое целое, а с другой — как выделенную многокомпонентную систему, состоящую из различного набора подсистем, каждая из которых по своим границам и условиям функционирования может тоже рассматриваться как самостоятельная система, не совпадающая (или совпадающая) с границами принятого объекта.

Отсюда вытекает, что схематизация и построение модели независимо от назначения — гидродинамическая или гидрогеохимическая — обязательно ведутся по некоторым единым позициям, но в то же время они имеют свою специфику.

Общим является подход как к системе, согласно которому независимо от назначения схематизации и содержания модели устанавливаются: границы объекта-системы и действующие на них граничные условия; структура системы и ее параметры (форма, размеры слагающих ее элементов, их пространственно-временное соотношение и их физические характеристики), а также связи и взаимодействия, т. е. процессы и их параметры. Это говорит о том, что как для процессов фильтрации, так и процессов миграции свойственны масштабные эффекты,

т. е. в зависимости от их интенсивности, длительности и схемы взаимодействия с сооружением общие гидрогеохимические и гидродинамические условия схематизируются различно и аппроксимируются разными математическими моделями, которые могут изменяться по мере развития гидродинамических и гидрогеохимических процессов. Особенно важна специфика схематизации таких процессов и в том числе миграционная. Обратим внимание на то, что многие критерии и упрощения, пригодные для геофильтрационной схематизации, могут и, это доказано на практике, оказаться недейственными при миграционной схематизации. Требуется искать иные подходы и критерии оценки допустимости упрощений, принимаемых при гидрогеохимических исследованиях. Например, схема гетерогенной среды, пригодная для инженерного решения геофильтрационной задачи, может оказаться неприемлемой для исследования миграционных (гидрогеохимических) процессов на этом же объекте или наоборот, осреднение геофильтрационных параметров k , T , n_0 при изучении гидродинамического режима может оказаться недопустимым при прогнозировании гидрогеохимических процессов.

В гидрогеохимической схематизации важны два момента: 1) необходимость предварительного анализа и изучение гидродинамической структуры объекта, которая определяет основные тенденции в развитии гидрогеологических процессов (предварительное установление размеров и параметров гидродинамической системы, сферы и характера проявления в ней фильтрационных процессов за время предполагаемого гидрохимического прогноза); 2) установление и выделение ведущих гидрогеохимических процессов, последовательности и характера их развития и отвечающих им возможных моделей массопереноса. Эти принципы и особенности схематизации далее будут рассмотрены на конкретном примере Восточного Предкавказья.

Соблюдение названных выше принципов при прогнозировании требует иных подходов к планированию и проведению изысканий, чем это сейчас принято на практике. Гидрогеологу необходимо увидеть результат реализации различных вариантов разведки до проведения изысканий. Такая возможность появляется при использовании разведочного или имитационного моделирования, разработанного нами в начале 60-х годов применительно к планированию разведки при оценке запасов подземных вод. Оно развивается и в настоящее время В. В. Перцовским и В. В. Кожетевым, а также В. А. Манукяном, О. В. Галактионовой для оптимизации гидрогеолого-мелиоративных изысканий, В. А. Мироненко, Е. А. Ломакиным и другими исследователями с целью решения проблем планирования опытно-фильтрационных опробований. Последние называют разведочное моделирование имитационным. Разведочное моделирование, на наш взгляд, более полно отражает главное в этом подходе.

Разведочное моделирование (РМ) — целенаправленное моделирование разведочного процесса (или отдельных его составляющих) на вычислительной машине путем имитации некоторых типовых (или предполагаемых) гидрогеологических условий и воздействий на них проектируемых сооружений, по результатам которого выявляются главные факторы, определяющие создающуюся гидрогеологическую (в том числе и экологическую) обстановку и условия работы инженерного сооружения, и на основе этого вырабатывается наиболее рациональный вариант разведки (гидрогеологических изысканий).

Разведочное моделирование может быть применено на любой стадии и в том числе на стадии эксплуатационной разведки. В этом случае цель его — выработать наилучший вариант эксплуатации подземных вод (или техногенного воздействия на них). Таким образом, РМ имеет следующие особенности.

1. Ставит цель управления процессом разведки или эксплуатации, решая долгосрочные и (или) оперативные задачи.

2. Выполняется на математических моделях типовых или предполагаемых гидрогеологических условий путем имитации различных вариантов разведки с оценкой качества их работы по определенным критериям (качественным или количественным) с широким применением вероятностно-статистических и информационных методов обработки исходной и получаемой информации.

3. Позволяет строить с помощью ЭВМ детерминированные, вероятностно-статистические или комплексные модели объекта. Особенно удобны регрессионные модели, построенные на основе теории планирования эксперимента, позволяющие вести «машинную» разведку и оценку объекта, а также оценивать как самостоятельную задачу гидрогеологического прогнозирования тех последствий, которые при этом возникают. Коэффициенты таких моделей позволяют ранжировать факторы (параметры, характеристики объекта или процесса) по степени их влияния на прогноз с учетом тех диапазонов их изменения, которые были приняты при построении моделей, а сами модели характеризуются определенной степенью надежности.

4. Дает возможность для каждого фактора диапазонной оценкой (при осреднении других) построить графики чувствительности, на основе анализа которых можно (уже не только эмпирически, интуитивно) выбирать методы и виды гидрогеологических исследований или опробований.

Перечисленные особенности РМ рассмотрены в работах [7, 39]. Для стадии эксплуатационной разведки и выбора оптимального варианта эксплуатации подземных, слабоминерализованных вод они описаны в главе 8 настоящей книги.

Рассмотрим задачу РМ применительно к проблеме оценки влияния поливов на качество подземных вод орошаемой

территории. В данном случае поставим задачу следующим образом: требуется, используя результаты выполненных ранее изысканий и воднобалансовых исследований, составить предварительный прогноз изменения гидрогеохимических условий под влиянием орошения и, как следствие этого, возможных изменений качества грунтовых вод на данной территории с целью использования этих результатов в дальнейшем планировании детальных гидрогеолого-мелиоративных изысканий на аналогичных территориях. В рассматриваемой задаче выполненный ориентировочный гидрохимический прогноз отвечает примерно стадии схемы и результаты его могут использоваться с целью решения мелиоративных задач и задач охраны подземных вод от загрязнения, если принять, что повышение минерализации грунтовых вод под влиянием орошения есть загрязнение.

Гидрогеохимический прогноз выполняется в следующей последовательности.

1. Приводятся описание общих гидрогеологических, гидродинамических и гидрогеохимических условий и соответствующие им схематизации.

2. Рассматриваются возможные модели солепереноса (массопереноса) в зоне аэрации с учетом, что изменение качества поливных вод в процессе этого движения вызывает изменение минерализации грунтовых вод.

3. Изучаются экспериментальными исследованиями возможные модели солепереноса и определяются соответствующие им миграционные параметры.

4. Выполняется гидрогеохимический прогноз как совокупность нескольких прогнозов:

- гидродинамический как подъем уровня грунтовых вод под влиянием орошения и влагоперенос в зоне аэрации и тем самым определяются исходные значения скоростей фильтрации (инфильтрации) для солепереноса;

- гидрогеохимический (солеперенос) в зоне аэрации как изменение солесодержания поровых вод и инфильтрующихся поливных вод через породы зоны аэрации на пути от поверхности земли до уровня грунтовых вод;

- гидрогеохимический как изменение минерализации грунтовых вод под влиянием орошения.

Особенность предварительного гидрогеохимического прогноза — выполнение его для типового точечного объекта, за который принят элементарный вертикальный объем призмы площадью поперечного сечения в 1 м^2 , охватывающий разрез от поверхности земли до первого водоупора и который включает располагающиеся на нем грунтовые воды. Этот эталонный объект находится на типовом воднобалансовом участке, который располагается на ключевом участке, где были выполнены ранее детальные гидрогеологические изыскания и специальные водно- и солебалансовые исследования.

Методика составления такого прогноза является частью комплексных научных исследований, выполненных МГРИ и институтом Севкавгипроводхоз при изучении процессов влаго- и солепереносов в лёссовых породах Восточного Предкавказья.

СХЕМАТИЗАЦИЯ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ И ГИДРОХИМИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ОПРЕДЕЛЕНИЮ МИГРАЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ

Наиболее полная информация о процессах влаго- и солепереносах и их прогнозировании может быть получена на специально оборудованных воднобалансовых участках, где проводятся одновременные комплексные длительные наблюдения за режимом и балансом грунтовых вод (зоны насыщения); режимом влаго- и солепереноса в породах зоны аэрации. Являясь типовыми для региона (в геолого-генетическом и гидрогеологическом отношении), такие участки позволяют постоянно вести опробование всего разреза зон аэрации и насыщения, использовать комплекс лабораторных и полевых работ для получения представительных данных о параметрах и особенностях протекания процессов влаго- и солепереноса в естественных условиях и при орошении и выявить затем для участков и территории в целом комплекс действующих гидродинамических и гидрогеохимических процессов. Как показывают исследования, в процессе орошения, особенно на лёссовых породах, происходят значительные изменения в структуре и некоторых свойствах пород орошаемых массивов. Это обстоятельство указывает на то, что схематизация гидрогеологических и, в первую очередь, гидрогеохимических условий и выбор моделей массопереноса должны проводиться с целью: 1) обоснования схемы гидрогеохимического опробования и определения миграционных параметров лабораторными или полевыми методами и 2) проведения гидрогеохимического прогноза. И в том, и в другом случае схематизации могут отличаться и в качестве исходных могут быть взяты разные модели солепереноса. В данном разделе рассмотрим принцип геофильтрационной и гидрогеохимической схематизации, применяемой к определению миграционных параметров.

Природные условия воднобалансовых участков. Влаго- и солеперенос в зоне аэрации [3] исследовались на двух специально созданных воднобалансовых участках — Елизаветинском и Совруновском, расположенных на землях перспективного орошения в Восточном Предкавказье на территории четвертой очереди Большого Ставропольского канала (БСК-4). Одной из задач было изучение гидрохимических параметров пород зоны аэрации с целью последующего прогнозирования солевого режима.

Елизаветинский участок расположен на восточном склоне Ставропольской возвышенности, геоморфологически это водо-

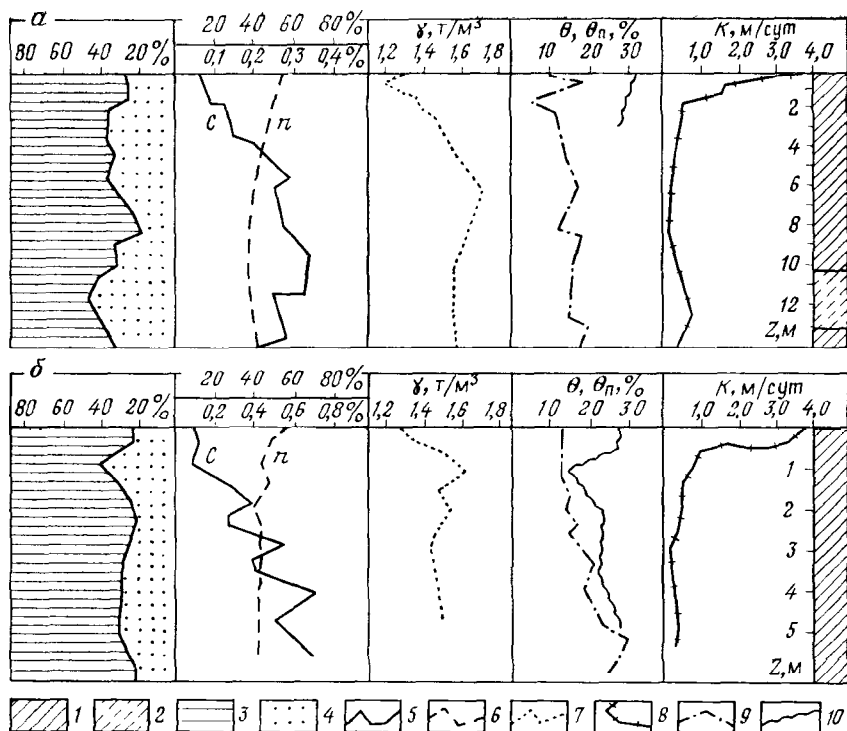


Рис. 58. Изменение состава и свойств породы зоны аэрации на Елизаветинском (а) и Совруновском (б) участках

1 — суглинок; 2 — супесь; содержание фракции: 3 — пылевой; 4 — песчаной; 5 — степень засоления породы; 6 — пористость; 7 — объемная масса скелета грунта; 8 — коэффициент фильтрации; 9 — естественная влажность θ ; 10 — полная влагоемкость

раздельный склон, сложенный супесчано-суглинистыми лёссовыми породами мощностью 15—20 м с мало мощным прослоем погребенных почв и мелких песков. До глубины 2—2,5 м породы характеризуются многочисленными кротовинами, корнеходами, ходами землероев и существенными изменениями водно-физических и фильтрационных свойств (рис. 58). Ниже изменения менее интенсивны. Максимумы засоления пород приурочены к глубине 7—8 м (0,4 %), преобладающий тип засоления — сульфатный. Грунтовые воды имеют минерализацию 4—5 г/л и сульфатный натриевый состав. Движение их направлено на восток, естественный уклон потока 0,002. Питание осуществляется в основном в холодные полугодия инфильтрацией атмосферных осадков.

Совруновский участок расположен на правом водораздельном склоне р. Калаус. Зона аэрации мощностью от 2,5 до

19,5 м сложена золово-делювиальными суглинками, в верхней части со значительными изменениями водно-физических и фильтрационных свойств пород (см. рис. 58). Степень засоления пород колеблется от слабой до сильной, преобладает сульфатный тип засоления. Грунтовые воды характеризуются сульфатно-хлоридным натриевым составом с минерализацией 10 г/л. Питание осуществляется инфильтрацией атмосферных осадков.

Особенности процессов влагопереноса. Более чем трехлетние наблюдения за влагопереносом в зоне аэрации [22] показали, что в естественных условиях в разрезе выделяются четыре зоны, в которых по-разному развиваются процессы влагопереноса: в первой, мощностью 0,5—2,0 м, отмечается существенное изменение потенциалов влаги после выпадения атмосферных осадков, режим влагопереноса здесь наиболее динамичен, объемная влажность пород в летнее время составляет 20—23 %, в осенне-зимне-весенний период 25—28 %; во второй, мощностью от 2,0 до 5,0 м, характеризуется меньшей динамичностью процессов влагопереноса, наибольшее увлажнение происходит в осенне-зимне-весенний период, объемная влажность пород 25—28 %, в летний уменьшаются влагозапасы; в третьей, мощностью от 5,0 до 9,0 м, отличается стабильным влагосодержанием и постоянным нисходящим движением влаги, содержание которой колеблется от 24 до 27 %; четвертая, мощностью от 9,0 м до уровня грунтовых вод, включающая область капиллярного влагонасыщения, отвечает принятой зоне капиллярной каймы, влажность пород в этой зоне с глубиной увеличивается и приближается к полной влагоемкости 33 % вблизи уровня грунтовых вод.

Как ясно из описания, геологическая среда, в которой в естественных условиях происходят процессы переноса солей, характеризуется структурной, литологической и фильтрационной неоднородностью и является гетерогенной (на макроуровне).

При изучении процессов влаго- и солепереноса выявились значительные изменения свойств пород зоны аэрации. По результатам капилляриметрических исследований (табл. 31) установлено увеличение объема пор наименьшего размера под воздействием увлажнения и иссушения.

Под влиянием длительной фильтрации воды и растворов изменение числа пластичности имеет общую тенденцию к уменьшению вплоть до перехода суглинков легких в супеси; для всех пород характерно уменьшение пористости от 2 до 10 %, увеличение объемной массы скелета грунта от 1 до 9 % при неизменной плотности, что связано с коагуляцией крупных пор частицами малых размеров 0,005—0,021 мм и подтверждается увеличенным количеством частиц данной фракции в гранулометрическом составе пород. Уменьшение макронеоднородности пород и увеличение роли микронеоднородности будет происходить и в процессе орошения, что следует учитывать при составлении

Таблица 31

Результаты капилляриметрических исследований легкого суглинка.
По А. М. Лаврентьеву

Образец	Цикл	Объем пор диаметром, мкм		
		более 15	15—3,5	менее 3,5
4	1	14,9	8,0	21,8
	2	13,7	6,4	24,6
	3	13,5	6,0	25,0
5	1	12,3	14,2	19,5
	2	13,9	10,8	20,9
4,5	1	15,2	15,7	18,2
	2	12,6	13,6	18,8
	3	10,8	11,4	20,4

гидрогеохимических прогнозов, тем более что этот процесс может вести к увеличению числа «застойных» участков.

Особенности гидрохимического режима. Наблюдения за динамикой солей в породах зоны аэрации проводилось в 1980—1981 гг. на Елизаветинском участке, где породы зоны аэрации незасоленные и слабозасоленные, и на Совруновском, зону аэрации которого составляют сильно засоленные породы. На каждом участке был пробурен куст гидрохимических скважин. Каждая скважина куста бурилась в один из сезонов года (осенний, зимний, весенний, летний), с отбором проб пород на влажность, водные вытяжки из определенных интервалов глубин и отбором проб воды из водоносного горизонта.

Установлено, что в летний период при высокой температуре в почвенном слое и породах зоны аэрации увеличивается растворимость сульфатов, и при небольшом их содержании из твердой фазы они практически все переходят в почвенный раствор. Почвы обогащаются легкорастворимыми солями NaCl , MgCl_2 , Na_2SO_4 , MgSO_4 . В июле в зоне аэрации, по-видимому, преобладали нисходящие потоки влаги, при глубинах залегания грунтовых вод превышающих глубину максимального испарения. В результате этого произошло смещение максимумов засоления на Елизаветинском участке на глубину 10—12 м, Совруновском — 4 м. Средняя естественная влажность пород зоны аэрации на Елизаветинском участке 15 %, на Совруновском — 15—20 %. Грунтовые воды на этих участках соответственно имели минерализацию 4,4 г/л сульфатно-хлоридный натриево-магниевый состав и 10,8 г/л сульфатно-хлоридный натриевый состав. В осенний период наблюдается значительное охлаждение поверхности почвенных горизонтов и пород, сильно понижается растворимость сульфатов, происходит выпадение солей в осадок и накопление их в верхних слоях зоны аэрации. Это подтверждается увеличением в составе водных вытяжек содержа-

ния ионов SO_4 и Ca , что свидетельствует о выпадении гипса в зоне аэрации. Значительных изменений в количестве ионов Cl , Na , Mg , HCO_3 не наблюдается. Исключение составляет увеличение содержания ионов Na на Совруновском участке и Mg на Елизаветинском. По-видимому, это связано с образованием сульфатов натрия и магния. Влажность пород практически не изменилась. Минерализация грунтовых вод уменьшилась на Елизаветинском участке до 4,29 г/л, Совруновском — до 10,55 г/л. Произошло перераспределение солевого состава воды: на Елизаветинском уменьшилось количество Cl , Ca , Mg и увеличилось количество SO_4 и Na ; Совруновском — уменьшилось количество SO_4 и Na и увеличилось количество Cl , Ca и Mg . Это зависит от взаимодействия грунтовых вод с поровыми растворами, поступающими из зоны аэрации. На Совруновском участке ион SO_4 в большей степени связан с ионом Ca , что привело к почти полному осаждению гипса и обеднению поровых растворов SO_4 ; на Елизаветинском — ион SO_4 участвует в образовании не только гипса, но и более растворимых солей, о чем свидетельствует его повышенное значение в поровых растворах, поступивших в грунтовые воды и обогативших их ионом SO_4 . Соотношения между остальными ионами зависят от особенностей первоначального (летнего) содержания их на каждом участке. В зимний период после осенне-зимнего промывания осадками почв и пород зоны аэрации наблюдаются значительные уменьшения количества ионов Ca и SO_4 в водных вытяжках и небольшое — ионов Mg , Na , Cl , содержание иона HCO_3 на протяжении всех периодов практически не изменяется. Влажность пород зоны аэрации на Елизаветинском участке 15—20 %, Совруновском — 20—25 %. В весенний период при увеличении температуры в почвах и верхних слоях зоны аэрации под влиянием внутригрунтового испарения и транспирации растений начинается подтягивание легкорастворимых солей в верхние горизонты. Наблюдается увеличение содержания ионов Cl , Mg , Na и SO_4 , содержание HCO_3 постоянно. Максимумы засоления смещаются в верхние слои зоны аэрации, влажность пород составляет 15—20 %. Грунтовые воды увеличивают минерализацию по сравнению с осенним периодом на Елизаветинском участке до 4,88 г/л, Совруновском — до 12,72 г/л. В составе вод Елизаветинского участка произошло небольшое увеличение содержания практически всех ионов, Совруновского — значительно увеличилось количество ионов SO_4 , Na , Ca , Mg , уменьшилось содержание Cl . Такой состав грунтовых вод сформировался за счет выноса солей из пород зоны аэрации и поровых растворов в период зимних (частично осенних) промывок атмосферными осадками.

Таким образом, труднорастворимые соли в породах накапливаются в результате преобладания процессов испарения, транспирации и при резких изменениях температуры в летний, осенний и поздний весенний периоды. Поздней осенью, зимой и

ранней весной увлажнение пород зоны аэрации атмосферными осадками вызывает растворение легкорастворимых солей и вынос их нисходящими потоками влаги в грунтовые воды. Сульфаты натрия и гипс фиксируются в местах выпадения их в осадок, остаются они в породах зоны аэрации и лишь небольшое количество поступает в грунтовые воды. Эти сезонные изменения увязываются с сезонностью, установленной А. В. Ковдой.

Литологическое строение, особенности влагопереноса и гидрохимического режима в зоне аэрации позволили разделить ее на слои, по мощности кратные 3 м, т. е. 0—3, 3—6, 6—9, 9—12 м (подробнее такое деление обосновывается ниже). В соответствии с этим строилась схема опробования и изучения пород зоны аэрации полевыми и лабораторными методами. Солеперенос в слое пород 0—3 м изучался в полевых условиях на «целиках» пород и лабораторных условиях на больших монолитах, отобранных из котлованов, и малых, отобранных из скважин. Изучение особенностей солепереноса на глубинах более 3 м проводилось в лабораторных условиях на малых монолитах, отобранных из каждого слоя и каждой литологической разновидности пород.

ХАРАКТЕРИСТИКА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В СИСТЕМЕ ПОРОДА — ВОДА

Рассмотрим среду, в которой будем изучать процессы солепереноса. В естественных условиях принимаем, что строение среды гетерогенно-блоковое, и считаем породы зоны аэрации «разбитыми» на «блоки», что определяет ее неоднородность на макроуровне. В процессе длительного орошения гетерогенное строение будет постепенно приближаться к гомогенному с переходом макронеоднородности в микронеоднородность, и это целесообразно учесть при изучении процессов солепереноса.

В гетерогенной среде солеперенос происходит конвективно-диффузионным путем и сопровождается явлением макродисперсии среды, возникающим при фильтрационной неоднородности, представленной проницаемыми каналами и слабопроницаемыми блоками, а также массообмена между ними. В гомогенной среде массоперенос осуществляется конвективно-диффузионным путем, при котором процесс микродисперсии обуславливается фильтрационной дисперсией и усиливается наличием «тупиковых» пор. Уменьшение скорости фильтрации в такой среде приводит к подавлению роли конвективного переноса и увеличению роли молекулярно-диффузионного переноса.

Каждый из выделенных механизмов солепереноса сопровождается следующими физико-химическими процессами, установленными по анализу гидрохимического режима на воднобалансовых участках: 1) сорбция и десорбция ионов в основном SO_4 , на как наиболее преобладающих токсичных ионов в составе солей в породах зоны аэрации и грунтовых водах; 2) незначи-

тельное растворение труднорастворимых солей при промыве зоны аэрации атмосферными осадками; 3) выпадение в осадок труднорастворимых солей в сухое время года при восходящем токе влаги и при резком снижении температуры в осенний период; 4) возможность возникновения обменных реакций в почвах при вторичном их засолении.

Вклад первого процесса в перенос солей наибольший, так как он действует постоянно. Значение остальных менее весомо, исключение составляет роль обменных реакций, которые на данном этапе не изучались и включены в обобщенное понятие сорбция. Таким образом, солеперенос в породах зоны аэрации описывается моделью конвективно-диффузионного переноса при наличии процессов сорбции — десорбции. Параметры солепереноса, получаемые по выбранным моделям, будут обобщенными (комплексными) и будут включать влияние неучтенных в модели физико-химических процессов.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ СОЛЕПЕРЕНОСА В ПОРОДАХ ЗОНЫ АЭРАЦИИ

Основные расчетные модели массопереноса и отвечающие им дифференциальные уравнения приведены в главе 3. Для принятой структуры солепереноса в гетерогенной среде общая математическая модель соответствует уравнению (92) варианту *D*, в котором члены, характеризующие обмен со слабопроницаемыми слоями, видоизменяются, и дифференциальное уравнение можно записать в виде [30]

$$n_e \partial C / \partial t + v \partial C / \partial z + \bar{p} v_p = 0, \quad (160)$$

где \bar{p} — площадь поверхности слабопроницаемых блоков в единице объема породы, отнесенная к площади поперечного сечения потока; v_p — скорость массообмена (диффузионного переноса) между проницаемыми каналами и слабопроницаемыми блоками. Будем далее называть такую расчетную модель моделью макродисперсии, физико-химические процессы, сопровождающие солеперенос, учитываются эффективной пористостью n_e . Приняв, что перенос вещества в проницаемых каналах происходит конвективным путем, а обмен между ними и слабопроницаемыми блоками — диффузионным, можно записать уравнение (160) в виде системы дифференциальных уравнений [37]

$$v \partial C / \partial z = \alpha (C^* - C); \quad n_e \frac{\partial C^*}{\partial t} = \alpha (C - C^*); \quad (161)$$

$$\text{при } C(0, z) = C^*(0, z) = C_0; \quad C(0, t) = C^0,$$

где C и C^* — средние интегральные значения концентрации порового раствора в каналах и блоках; α — коэффициент массо-

обмена между блоками и каналами ($\alpha = \alpha_v + \alpha_D$; составляющие коэффициента массообмена: α_v — конвективная, α_D — диффузионная); n_e — эффективная пористость блоков.

Для гетерогенно-блоковой среды модель массопереноса двухпараметрическая (n_e, α). Расчетные схемы разработаны для условий полного насыщения с установившимся режимом влажности. Если режим влажности в зоне аэрации не установившийся, то влага при значениях больше полевой влагоемкости движется по крупным каналам, а от них внутрь блоков. При этом значения коэффициентов α и n_e будут изменяться во времени по направлению вертикальной координаты, что учитывается заменой параметров, характеризующих зону полного насыщения, на параметры зоны аэрации.

Солеперенос в гомогенной среде при наличии микронеоднородности рассматривается К. Коатсом, Л. Б. Дворкиным, А. А. Рошалем и др. и описывается уравнением [39]

$$n_e \frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial z} = \tilde{D} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{n_e \bar{\omega} v \partial^2 C}{\alpha \partial z \partial t} - \frac{n_e^2 (1 - \bar{\omega}) \bar{\omega} \partial^2 C}{\alpha \partial t^2}, \quad (162)$$

здесь $\bar{\omega}$ — относительный объем застойных зон в объеме пор; \tilde{D} — коэффициент микродисперсии, который имеет сложную зависимость от скорости фильтрации:

$$\tilde{D} = D_m + \delta_2 v + \delta^1 v^2; \quad \delta^1 = \bar{\omega}^2 / \alpha, \quad (163)$$

где δ_2 — структурный параметр микродисперсии.

Будем называть далее такую модель моделью микродисперсии. Для условий неполного насыщения А. А. Рошаль [30] рекомендует вместо активной пористости использовать объемную влажность породы θ , вместо скорости фильтрации — скорость изменения влажности или влагопереноса, а параметры θ и v находить из опыта. Основными расчетными параметрами в гомогенной среде являются n_e , \tilde{D} и $\bar{\omega}$; математическая модель этой среды трехпараметрическая.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ СОЛЕПЕРЕНОСА НА ВОДНОБАЛАНСОВЫХ УЧАСТКАХ

Исследования включали следующий комплекс работ: 1) натурное изучение на опытных участках процессов влаго- и солепереноса в породах зоны аэрации и грунтовых водах; 2) лабораторные работы по изучению процессов солепереноса в породах зоны аэрации; 3) режимные наблюдения за всасывающим давлением и влажностью пород зоны аэрации; 4) стационарные наблюдения за уровнем, минерализацией и химическим составом

вом грунтовых вод; 5) режимные гидрохимические наблюдения за сезонными изменениями характера засоления пород зоны аэрации и грунтовых вод.

Схема постановки экспериментов

Оборудование полевой опытной площадки. На Елизаветинском и Совруновском воднобалансовых участках было оборудовано по одной опытной площадке. Каждая состояла из котлована с оборудованием для гидрохимических исследований, шурфов для изучения фильтрационных свойств пород; куста гидрохимических скважин для режимных наблюдений за миграцией солей в породах зоны аэрации; из наблюдательных скважин за режимом грунтовых вод; из шурфов-шахт с оборудованием для наблюдения влагопереноса в зоне аэрации и скважин для проведения опытно-миграционных работ (рис. 59).

В котловане размером $3 \times 6 \times 2$ м выкапывались два целика пород диаметром 0,55 м, высотой 1,2 м. На них одевались металлические тонкостенные трубы диаметром 0,6 м. В стенках труб заранее прорезались отверстия для установки бактериальных фильтров и тензиометров и отверстия для отбора проб на водные вытяжки. Зазор между стенками целика и трубы заливался битумом с добавлением парафина. Один из целиков отрывался от днища котлована и устанавливался в металлический поддон, имеющий отвод для фильтрата [3]. В днище поддона засыпался гравий. На верхней поверхности целика устанавливалось кольцо диаметром 0,46 м с поплавковым устройством для поддержания постоянного уровня воды на поверхности целика (рис. 60, а). В стенках целика выбуривались отверстия, в которые устанавливались бактериальные керамические фильтры для отбора поровых растворов и тензиометры для измерения всасывающего давления, интервалы установки приборов 0,5 и 1,0 м от верхнего торца целиков (при установке фильтров и тензиометров необходимо следить, чтобы между стенкой отверстия и фильтра не было зазора, иначе следует проводить тампонаж зазора выбуренным грунтом). В опытах использова-

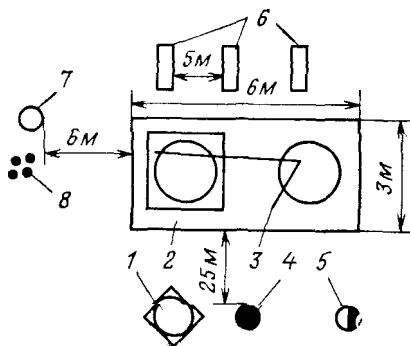


Рис. 59. Схема расположения выработок на опытной площадке

1 — шурф-шахта; 2 — котлован; 3 — целик; 4 — скважина для наблюдения за уровнем грунтовых вод; 5 — радиометрическая скважина; 6 — шурф для наливов; 7 — скважина для проведения опытно-миграционных работ; 8 — куст гидрохимических скважин

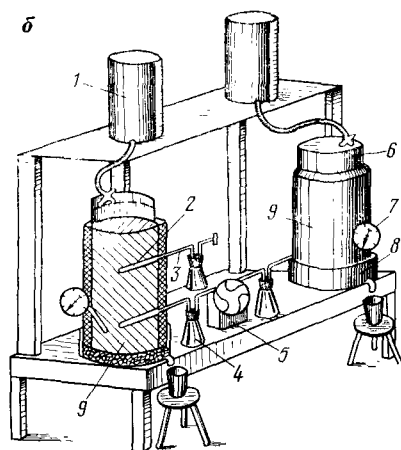


Рис. 60. Оборудование опытной установки в полевых (а) и лабораторных (б) условиях

1 — устройство для подачи воды; 2 — бактериологический фильтр; 3 — отвод от бактериологического фильтра; 4 — вакуумный сосуд; 5 — насос Комовского; 6 — кольцо; 7 — тензиометр; 8 — поддон; 9 — большой монолит в металлическом кожухе

лась вода из поверхностных водоемов (прудов), расположенных вблизи опытных площадок. Подача воды в кольца проводилась на Елизаветинском участке прибором Нестерова, на Совруновском — полуавтоматической станцией для опытных наливов в шурфы, разработанной в институте Севкавгипроводхоз. Пробы поровых растворов отбирались в вакуумный сосуд насосом Комовского.

Для изучения фильтрационных свойств пород зоны аэрации вблизи котлована проводилось по три налива в шурфы глубиной 0,2, 0,5, 0,7 и 1,3 м. Кроме того, в пределах опытных площадок бурились гидрохимические скважины с целью сезонного прослеживания динамики солей в породах зоны аэрации и грунтовых водах. За летний и осенний сезон 1980 г. было пробурено по две скважины, за зимний и весенний сезон 1981 г. — еще по две скважины. В пределах опытных площадок расположены скважины, в которых ведутся наблюдения в течение длительного времени за режимом подземных вод. На Елизаветинской опытной площадке были расположены шурфы-шахты глубиной более 10 м, оборудованные для наблюдения за режимом влагопереноса в зоне аэрации в естественных условиях. Аналогичные исследования за влагопереносом в условиях орошения были организованы на другом опытном участке — Зеленокумском, данные которого использовались в гидрогеохимическом прогнозе.

Оборудование лабораторной установки. Лабораторные исследования солепереноса проводились на больших монолитах для характеристики верхней части зоны аэрации (0—3 м) и на малых — для изучения зоны аэрации на всю ее мощность.

В котлованах рядом с целиками и в шурфах отбирались большие монолиты диаметром 0,35 м, высотой 0,5 м (было отобрано 8 монолитов). Они помещались в металлические обоймы, зазор между стенкой монолита и обоймой заливался битумом с парафином. Монолиты устанавливались в поддон с гравием и отводом для фильтрата. На расстоянии 0,15 и 0,35 м от верхнего торца монолита в отверстия диаметром 25 и 15 мм, выбуренные в теле монолита (бурение проводилось специальным буром), устанавливались бактериальные фильтры для отбора проб поровых растворов и тензиометры для замеров всасывающего давления. Стенки фильтров плотно прилегали к стенкам грунта. В верхнюю часть монолита вдавливалось кольцо диаметром 0,23 м для поддержания постоянного слоя воды в процессе опыта. Использовались питьевая вода и минерализованные растворы, подача которых осуществлялась по схеме прибора Нестерова. Для отбора проб поровых растворов применялся насос Комовского (см. рис. 60, б).

Малые монолиты отбирались из скважин, пробуренных на воднобалансовых участках, до уровня грунтовых вод. Отбор производился из каждого слоя в 3 м и каждой литологической разности пород. Размер монолитов: диаметр — 0,11 м, высота 0,2—0,3 м (на Елизаветинском участке отобрано 4 малых монолита, на Совруновском — 3). Монолиты помещались в металлические кожухи (тонкостенные трубы), зазор между трубой и стенкой заливался битумом с парафином. В верхнюю часть малых монолитов также вдавливались кольца, постоянный уровень воды в них поддерживался поступлением ее из колбы с притертыми пробками. Монолиты находились на поддоне с мелким гравием и отводами для сбора фильтрата. До начала опыта и после его окончания из исследуемой породы отбирались пробы на определение водно-физических и физико-механических свойств пород.

Схема проведения экспериментов

Цель экспериментальных исследований:

— изучение характера переноса слабосорбируемого иона Cl с фильтрационным потоком в процессах засоления и рассоления пород; определение гидрохимических (миграционных) параметров n_e , α , \tilde{D} , по иону Cl ; выявление зависимости коэффициентов α и \tilde{D} от скорости фильтрации v ;

— изучение особенностей переноса сорбируемых ионов SO_4 , Na с фильтрационным потоком в процессах засоления и рассо-

ления пород, определение параметров n_e , α , \tilde{D} и выявление зависимостей $\alpha=f(v)$ и $\tilde{D}=f(v)$;

— сопоставление особенностей протекания и параметров процессов рассоления и засоления в породах зоны аэрации при использовании различных математических моделей массопереноса.

Процесс рассоления пород зоны аэрации изучался путем налива в целики и монолиты, сложенные естественно засоленными породами или породами, насыщенными предварительно высокоминерализованными растворами солей, пресной воды (в лабораторных условиях) или слабоминерализованной (в полевых условиях) воды. Такой опыт позволяет рассчитать миграционные параметры при условии рассоления. Процесс засоления пород зоны аэрации изучался при наливе в целики и монолиты минерализованных растворов NH_4Cl и Na_2SO_4 , что позволило определить гидрохимические параметры с учетом процессов сорбции ионов SO_4 и Na , а также активную пористость по иону Cl (практически несорбируемому). Необходимость изучения различных процессов в экспериментальных условиях обусловила этапность полевых и лабораторных работ.

Ход проведения полевого эксперимента. Опыты в полевых условиях проводились на целиках в три этапа. I — налив в целики слабоминерализованных поверхностных вод (на Елизаветинском участке минерализация воды составляла 2,16 г/л, на Совруновском — выше 3,5 г/л); II — налив высокоминерализованных растворов Na_2SO_4 (22 г/л); III — налив слабоминерализованной воды (2,16—3,5 г/л).

Наличие I этапа обусловлено необходимостью выравнивания концентраций поровых растворов в теле целика и определением миграционных параметров по ионам Cl , SO_4 , Na в процессе рассоления. На II этапе в процессе налива высокоминерализованных растворов изучались особенности солепереноса в таких условиях, какие могут возникнуть при подъеме высокоминерализованных грунтовых вод под влиянием орошения. На этом этапе также определялись миграционные параметры по ионам Cl , SO_4 и Na в процессе засоления, сопровождающегося сорбцией ионов SO_4 и Na . На III этапе изучался процесс рассоления ранее засоленных пород зоны аэрации (промывки) с определением гидрохимических параметров по указанным ионам.

Ход проведения лабораторного эксперимента. Опыт включал четыре этапа: I — налив в монолиты раствора NH_4Cl минерализацией 3,5 г/л (растворы готовились путем растворения солей в пресной воде); II — налив пресной воды минерализацией 0,14—0,68 г/л; III — налив раствора Na_2SO_4 минерализацией 3,1 г/л (для трех опытов 1980 г. использовался раствор минерализацией 20—22 г/л); IV — налив пресной воды минерализацией 0,14—0,68 г/л.

Этап I необходим для определения гидрохимических параметров n_e , α , \bar{D} по практически несорбируемому иону Cl в процессе насыщения грунта минерализованными растворами. На II этапе определялись указанные параметры в процессе рассоления (промывки породы). На III и IV этапах изучались особенности миграции в породах зоны аэрации слабосорбируемых (при малых концентрациях в растворах) и сорбируемых (при больших) ионов SO_4 и Na. Это обусловлено тем, что ионы SO_4 и Na преобладают в ионном составе грунтовых вод и солей, присутствующих в породах зоны аэрации. На III этапе опыта определяются гидрохимические параметры по ионам SO_4 , Na в процессе насыщения грунта минерализованными растворами при засолении, на IV — в процессе промывки грунта при рассолении.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МИГРАЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ СОЛЕПЕРЕНОСА ПО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМ ДАННЫМ

Обработка экспериментальных данных проводилась в следующей последовательности: 1) по результатам многоэтапного опыта строились выходные кривые изменения концентрации ионов Cl, SO_4 , Na во времени; проводилась качественная оценка изучаемых процессов; 2) для каждого этапа опыта строились выходные кривые в координатах, удобных для диагностики и дальнейшей обработки данных по принятым моделям массопереноса; 3) проводились определения миграционных (гидрохимических) параметров по выбранным моделям массопереноса; 4) выявлялись зависимости параметров солепереноса от скорости фильтрации, сопоставлялись полученные значения параметров и оценивалась их достоверность.

Для определения параметров использовались аналитические, графоаналитические методы и интегральный (метод моментов).

Качественная оценка изученных процессов

Поведение различных ионов в процессе рассоления и засоления иллюстрируется рис. 61, где показаны экспериментальные типовые выходные кривые изменения во времени относительной концентрации $\bar{C} = (C - C_0) / (C^0 - C_0)$, где C — текущая концентрация, C_0 — начальная концентрация солей в породах, C^0 — концентрация солей в промывной воде. Как видно, рассоление породы по иону Cl происходит интенсивно конвективным путем. Конвективное засоление пород по иону SO_4 (при использовании раствора Na_2SO_4 минерализацией 3 г/л) замедлено по сравнению с засолением ионом Cl за счет влияния процесса сорбции на выравнивание его концентраций в проникаемых и слабопроницаемых зонах. Процесс рассоления по иону SO_4 сначала идет интенсивно (конвекция) за счет выноса солей из каналов,

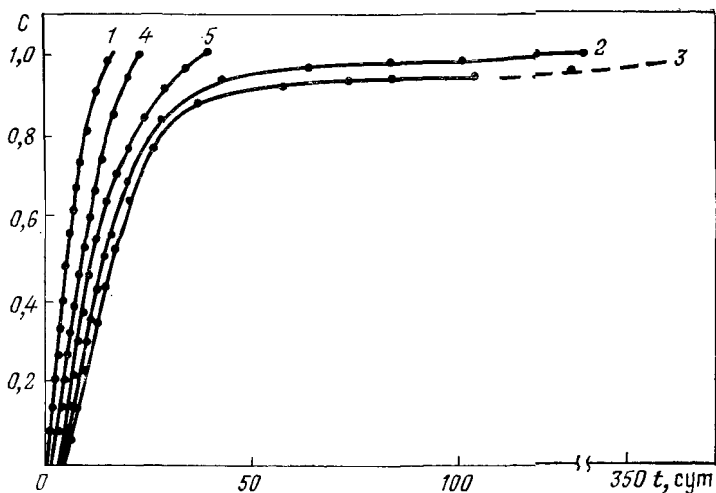


Рис. 61. Типовые выходные кривые $\bar{C}=f(t)$ по опыту на Елизаветинском участке

Кривые рассоления по ионам: 1 — Cl; 2 — SO_4 ; 3 — Na; засоления: 4 — SO_4 ; 5 — Na

затем замедляется диффузионным выносом солей из слабопроницаемых блоков. Иная картина отвечает иону Na: вначале наблюдается его конвективный перенос, сопровождающийся интенсивной сорбцией породой, затем (после 40 ч с начала опыта) процесс засоления и выравнивания концентрации замедляется вступлением иона Na в ионообменные реакции в почвенном поглощающем комплексе (ППК). Процесс рассоления идет более медленно и вначале происходит конвективный вынос ионов Na, сопровождающийся десорбцией иона, а затем начинается медленное его вытеснение из ППК и постепенное выравнивание концентрации в блоках и каналах.

Использование высокоминерализованного раствора Na_2SO_4 существенно замедляет развитие процессов засоления и рассоления по ионам SO_4 и Na, значительно уменьшается скорость фильтрации при рассолении. Это, по-видимому, связано с уменьшением водопроницаемости пород, ионы Ca и Mg в ППК замещаются ионами Na, что приводит к диспергации глинистых частиц, увеличению сольватных оболочек, разбуханию породы.

В процессе опыта необходимо добиваться выравнивания концентрации в блоках и каналах, что контролируется выравниванием концентраций на входе и выходе из испытуемого образца. Как показали исследования, выравнивание концентраций по иону Cl достигается при фильтрации через образец раствора в количестве, равном трем объемам его порового пространства. Для выполнения этого условия по ионам SO_4 и Na необходимо

пропустить через образец раствор в количестве, равном почти четырем объемам (минерализация раствора не должна при этом превышать 3 г/л). Временем выравнивания концентраций определяется продолжительность опыта.

Определение миграционных параметров по модели макродисперсии

Использовалось решение системы уравнений (161) при постоянстве концентрации на входе в испытуемый образец [41]

$$\bar{C} = G(\eta, \tau); \quad \bar{C}^* = 1 - G(\tau, \eta); \quad (164)$$

при

$$\bar{C} = (C - C_0)/(C^0 - C_0); \quad \bar{C}^* = (C^* - C_0)/(C^0 - C_0);$$

$$\tau = \alpha t / n_e; \quad n = \alpha z / v,$$

где η, τ — безразмерные переменные; $G(\eta, \tau)$ — табулированная функция.

Способ эталонных кривых. Строились эталонные кривые (рис. 62) в полулогарифмическом масштабе \bar{C} и $\lg \bar{k}$ (где $\bar{k} = vt / zn_e$ — безразмерный коэффициент действительной скорости фильтрации) для различных значений безразмерного расстояния η ($\eta = 0,1 \div 10$). Экспериментальные выходные кривые перестраивались в координатах \bar{C} и $\lg \bar{t}$. Здесь $\bar{t} = vt / z$ (рис. 63). При изменении скорости фильтрации в течение опыта вместо vt брался интегральный объем воды в метрах, вычисленный как $V = \int_0^t v dt$.

Эталонные и экспериментальные кривые совмещались с целью диагностики и оценки степени соответствия экспериментальных данных принятой модели массопереноса (конвек-

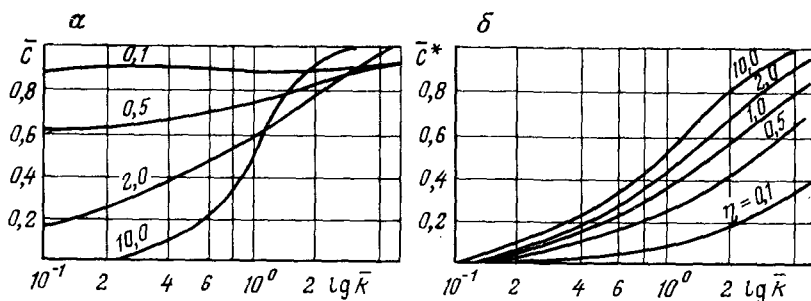


Рис. 62. Эталонные кривые модели макродисперсии изменения избыточной концентрации в каналах (а) и блоках (б)

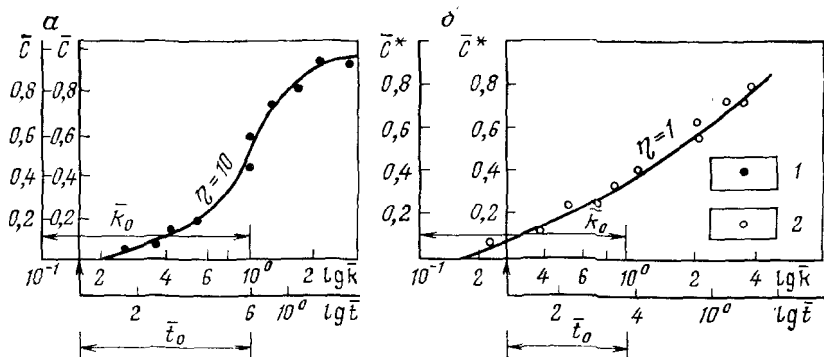


Рис. 63. Совмещенная эталонная кривая и экспериментальные точки для каналов при $\eta=10$ (а) и блоков при $\eta=1,0$ (б)

Эталонная кривая относительной избыточной концентрации; экспериментальные точки (Совруновский участок) для концентрации ионов в поровом растворе: 1 — Cl при рассолении; 2 — SO_4 при засолении

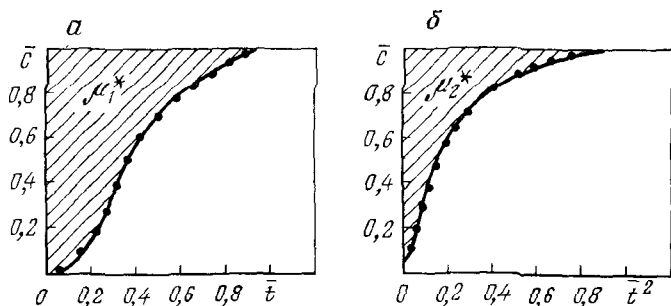


Рис. 64. Определение параметров миграции по Cl-иону методом моментов для процессов рассоления на Совруновском участке

а — $\mu_1^* = S_1 = 0,39$; б — $\mu_2^* = S_2 = 0,28$; $n_e = 0,20$; $\alpha = 0,43$ 1/сут

ция) по каналам или массообмена с блоками (см. рис. 63). По варианту наилучшего совпадения кривых находилась величина \bar{t}_0 , соответствующая некоторому заданному значению \bar{k}_0 (удобно брать $\bar{k}_0 = 1$), и величина переменной η , по этим значениям рассчитывались параметры

$$n_e = \bar{t}_0 / \bar{k}_0; \quad \alpha = \eta \eta / z. \quad (165)$$

Обработано 136 выходных кривых, результаты приведены в табл. 32.

Метод моментов. Использовалась методика А. А. Рошалья, строились две выходные кривые в координатах \bar{C} и \bar{t} , \bar{C} и \bar{t}^2

Миграционные параметры лёссовидных пород зоны аэрации Восточного Предкавказья (модель макродисперсии)

Изучаемый процесс	Ион	Диапазон изменения параметров		
		v , м/сут	n_e	α , 1/сут
Суглинки легкие (Елизаветинский участок)				
Метод эталонных кривых				
Засоление	Cl	0,60—0,80	0,18—0,40	1,2—3,0
	SO ₄	0,10—0,30	0,10—0,28	0,5—4,0
	Na	0,10—0,30	0,39—0,76	0,2—4,0
Рассоление	Cl	0,60—0,80	0,22—0,40	1,4—3,2
	SO ₄	0,05—0,12	0,19—0,26	0,12—2,0
	Na	0,05—0,12	0,12—0,34	0,3—0,57
Метод моментов				
Засоление	Cl	—	—	—
	SO ₄	0,10—0,30	0,24—0,27	0,4—0,8
	Na	0,10—0,30	0,22—0,46	0,9—1,5
Рассоление	Cl	0,60—0,80	0,28—0,42	1,6—3,1
	SO ₄	0,05—0,12	0,19—0,25	0,13—0,70
	Na	—	—	—
Суглинки средние (Совруновский участок)				
Метод эталонных кривых				
Засоление	Cl	0,15—0,3	0,16—0,32	1,5—4,0
	SO ₄	0,04—0,34	0,22—0,45	0,20—7,7
	Na	0,07—0,34	0,25—0,66	0,2—3,1
Рассоление	Cl	0,10—0,3	0,16—0,33	0,15—4,6
	SO ₄	0,03—0,15	0,21—0,44	0,09—0,56
	Na	0,03—0,15	0,22—0,44	0,03—0,9
Метод моментов				
Засоление	Cl	0,15—0,30	0,3—0,30	2,9—9,8
	SO ₄	0,04—0,34	0,17—0,47	0,27—11,0
	Na	0,07—0,34	0,49—0,50	0,47—1,7
Рассоление	Cl	0,10—0,3	0,20—0,35	0,53—3,2
	SO ₄	0,03—0,15	0,21—0,84	0,15—0,9
	Na	0,03—0,15	0,2—0,41	0,11—0,86

(рис. 64), определялись площади фигур и вычислялись следующие интегралы:

$$\mu_1 = \int_0^{\infty} (1 - \bar{C}) d\bar{t}; \quad \mu_2 = \int_0^{\infty} (1 - \bar{C}) d\bar{t}^2;$$

$$\mu_1^* = \int_0^{\infty} (1 - \bar{C}^*) d\bar{t}; \quad \mu_2^* = \int_0^{\infty} (1 - \bar{C}^*) d\bar{t}^2. \quad (166)$$

С учетом связей получаем

$$\begin{aligned}\mu_1 &= n_e; & \mu_1^* &= n_e (1 + v/\alpha z); \\ \mu_2 &= n_e^2 (1 + 2v/\alpha z); & \mu_2^* &= n_e^2 (1 + 4v/\alpha z + 2v/\alpha^2 z^2).\end{aligned}\quad (167)$$

По парам величин моментов μ_1 и μ_2 рассчитывались параметры солепереноса для каналов:

$$n_e^k = \mu_1; \quad \alpha_k = 2v\mu_2/z(\mu_2 - \mu_1^2),$$

а по паре величин моментов μ_1^* и μ_2^* — для блоков:

$$\begin{aligned}n_e &= \sqrt{2(\mu_1^*)^2 - \mu_2^*}; \\ \alpha &= v\sqrt{2(\mu_1^*)^2 - \mu_2^*}/z(\mu_1^* - \sqrt{2(\mu_1^*)^2 - \mu_2^*});\end{aligned}\quad (168)$$

Обработано 100 пар выходных кривых, результаты приведены в табл. 32.

Определение миграционных параметров по модели микродисперсии

Для ограниченной длины опытной колонки L и непрерывного запуска индикатора использовалось приближенное решение [30]:

$$\begin{aligned}\bar{C} &\approx 0,5 \operatorname{erfc}(\xi_3); \quad \text{при} \quad \xi_3 = -A_1 \ln[0,5(\bar{t}_1/\bar{\omega}n_e + 1)] - B_1; \\ \bar{t}_1 &= \bar{t} - (1 - \bar{\omega})n_e; \\ A_1 &\approx \sqrt{\bar{R}}; \\ B_1 &= 0,25\sqrt{\bar{R}}; \quad R = \bar{\omega}^2 L/\delta_2.\end{aligned}\quad (169)$$

Кривые зависимости констант A_1 и B_1 от безразмерного комплекса R путем расчета [30] показаны на рис. 65.

Строился график зависимости ξ_3 от $\lg t$ при $\xi_3 = \operatorname{arccerf}(1 - 2\bar{C})$, который при $\bar{\omega} = 0,5$ прямолинеен. Если $\bar{\omega} < 0,5$, то начальные и конечные точки графика отклоняются вправо, а при $\bar{\omega} > 0,5$ — влево. В этом случае параметры определялись методом последовательных приближений, для чего в каждой точке кривой вычислялись значения $\bar{t}_1 = (2\bar{\omega} - 1)n_e$ и она перестраивалась в координатах зависимости ξ_3 от $\lg(\bar{t} + \bar{t}_1)$ так, что при $\bar{\omega} < 0,5$ кривая смещалась влево от первоначального направления, а при $\bar{\omega} > 0,5$ — вправо. Получив спрямленные кривые (рис. 66), по тангенсу угла наклона прямых к оси $\lg(\bar{t} + \bar{t}_1)$ как соотношение катетов определялась константа

* В работе А. А. Рошала [30] в значении B_1 имеется опечатка.

Рис. 65. Кривые зависимости констант A_1 и B_1 от безразмерного комплекса R [30]

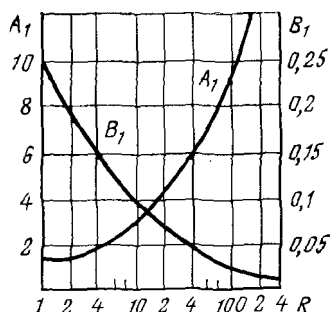
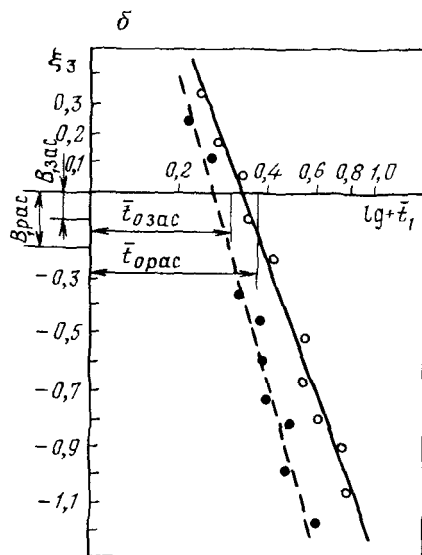
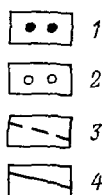
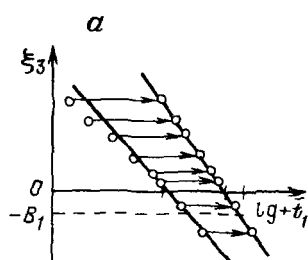


Рис. 66. Графоаналитический способ обработки опытных данных по методике А. А. Рошаля (а) и эксперимента (б), выполненного для иона Cl^-

Экспериментальные значения концентрации иона Cl^- : 1 — при засолении; 2 — при рассолении; спрямленные кривые по иону Cl^- : 3 — засоление; 4 — рассоление



$A_1 = 0,434 \lg \alpha$. В соответствии с величиной A_1 по графикам (см. рис. 65) или формулам (169) при $R > 25$ определялись величины R и B_1 . Затем на оси ординат ξ_3 графика $\xi_3 = f \lg(\bar{t} + \bar{t}_1)$ откладывался отрезок B_1 и проводилась прямая, параллельная оси $\lg(\bar{t} + \bar{t}_1)$, до точки пересечения с графиком (см. рис. 66). В точке пересечения определялась величина \bar{t}_0 . По значениям \bar{t}_0 , \bar{t}_1 и R рассчитывались три миграционных параметра n_e , $\bar{\omega}$, δ_2 по формулам

$$n_e = \bar{t}_0; \quad \bar{\omega} = (\bar{t}_0 + \bar{t}_1) / 2\bar{t}_0; \quad \delta_2 = \frac{(\bar{t}_0 + \bar{t}_1)^2 L}{4\bar{t}_0^2 R} \quad \text{или} \quad \tilde{D} \approx \delta_2 v \quad (170)$$

Этим способом обработано 140 выходных кривых, результаты обработки приведены в табл. 33.

Таблица 33

Миграционные параметры лёссовидных пород зоны аэрации Восточного Предкавказья (модель микродисперсии)

Исучаемый процесс	Ион	Диапазон изменения параметров			
		v , м/сут	n_e	δ_2 , м	$\bar{\omega}$
Суглинки легкие					
Е л и з а в е т и н с к и й у ч а с т о к					
Засоление	Cl	0,6—0,8	0,3—0,34	0,036—0,083	0,5
	SO ₄	0,1—0,3	0,31—1,05	0,01—0,125	0,5
	Na	0,1—0,3	0,51—1,6	0,01—0,125	0,5
Рассоление	Cl	0,6—0,8	0,26—0,55	0,02—0,063	0,5
	SO ₄	0,05—0,12	0,28—0,68	0,025—0,114	0,5
	Na	0,05—0,12	0,34—1,4	0,013—0,21	0,5
Суглинки средние					
С о в р у н о в с к и й у ч а с т о к					
Засоление	Cl	0,15—0,3	—	—	—
	SO ₄	0,04—0,34	0,28—1,3	0,014—0,125	0,5
	Na	0,07—0,34	0,48—1,6	0,02—0,125	0,5
Рассоление	Cl	0,1—0,3	0,34—0,54	0,017—0,083	0,5
	SO ₄	0,03—0,15	0,27—0,62	0,014—0,125	0,5
	Na	0,03—0,15	0,24—1,05	0,04—0,125	0,5

Результаты определения миграционных параметров

Прежде всего остановимся на некоторых методических аспектах обработки результатов. Опыт показал, что при определении обобщенных миграционных параметров не во всех случаях можно добиться хорошего совпадения экспериментальной кривой с эталонной. Последняя отвечает модели макродисперсии, в которой сам механизм массопереноса представлен схематично (каналы — блоки), а все физико-химические взаимодействия, в том числе сорбция, учтены только показателями n_e и α . При этом не принимаются во внимание характер и интенсивность развития этих взаимодействий во время опыта. Экспериментальными кривыми представлена вся сложность солепереноса. Степень влияния этих неучтенных взаимодействий отражается на величине отклонения экспериментальных кривых от эталонных (считая, что погрешности измерения практически не проявляются). В связи с этим обработку целесообразно проводить методом эталонных кривых и методом моментов, а полученные параметры усреднять. При этом достоверность значений расчетных показателей необходимо контролировать на непротиворечивость имеющейся гидрогеологической информации. В первую очередь устанавливается их соответствие с показателями физико-механическими, емкостными и фильтрационными

(полная пористость, полная, полевая и максимальная молекулярная влагоемкости, водоотдача и др.). Рассмотрим возможный аспект протекания неучтенных процессов и их влияние на полученные значения показателей. При этом, естественно, надо определить для образцов изучаемых пород (до и после опыта) их гранулометрический состав, оценить водно-физические свойства, засоленность, минеральный состав и т. п. В процессе опыта необходимо вести наблюдения за основными показателями гидрохимической обстановки (pH , Eh , T в $^{\circ}C$ и др.).

Обработка экспериментальных данных по модели микродисперсии показала, что графики зависимости ξ_3 от $\lg \bar{t}$, как правило, прямолинейны (см. рис. 66), т. е. лёссовидные суглинки зоны аэрации характеризуются величиной $\omega=0,5$, и сдвигать графики по оси $\lg \bar{t}$ не нужно.

При обработке экспериментальных данных также было установлено, что интенсивность конвективного переноса иона Cl максимальная (0,6—0,8 м/сут). Коэффициенты массообмена при больших значениях характеризуются меньшим диапазоном изменения по сравнению с ионами SO_4 и Na (см. табл. 32), а структурные параметры микродисперсии имеют минимальные значения. Это свидетельствует о быстром процессе переноса иона Cl на коротких расстояниях. Значения эффективной пористости в монолитах и целиках с крупными нарушениями (кратковинами до 3—5 см в диаметре и др.) возрастают для легких лёссовидных суглинков до 0,42 по модели макродисперсии и 0,55 — микродисперсии при полной пористости $\sim 0,55$, а для средних лёссовидных суглинков — до 0,35 по модели макродисперсии и до 0,54 по модели микродисперсии при полной пористости 0,45—0,50. В образцах менее нарушенных значения эффективной пористости значительно ниже (см. табл. 32, 33). Для ионов SO_4 и Na отличительной особенностью является замедленный процесс переноса со значительным диапазоном изменения коэффициентов массообмена и большими значениями структурного параметра микродисперсии, свидетельствующими о влиянии процессов физико-химического взаимодействия в системе порода — вода.

Если принять, что ион Cl практически не сорбируется и в обменных реакциях не участвует, то рассчитанная по нему эффективная пористость должна в первом приближении соответствовать среднему значению разности: $\theta_{п(об)} - \theta_r - \theta_m = \theta$, где влагоемкость пород: $\theta_{п(об)}$ — полная объемная, θ_r — максимальная гигроскопическая, θ_m — молекулярная. В такой интерпретации величина θ отвечает гравитационной водоотдаче μ , которая определялась опытными откачками Севкавгипроводхоза. Наблюдается достаточная сходимость этих значений для модели макродисперсии в легких лёссовидных суглинках $n_{eCl}=0,3$ при $\theta=0,27$, в средних — $n_{eCl}=0,23$ при $\theta=0,22$, а также для модели микродисперсии в легких суглинках $n_{eCl}=0,33$ при $\theta=0,27$

Параметры солепереноса лёссовидных пород зоны аэрации Восточного Предкавказья (гетерогенная фильтрационная среда)

Ион	Изучаемый процесс	Диапазон изменения скоростей фильтрации v , м/сут	Обобщенные параметры солепереноса		
			Эффективная пористость n_e	Уравнение регрессии	
				$\alpha=f(v)$	Интервал, м
Суглинки легкие (Елизаветинский участок)					
Cl	Засоление	0,03	0,30	$\alpha = 4,47 v^{0,69}$	0—3
SO ₄	Засоление	0,1—0,3	0,3	$\alpha = 16,3 v - 0,83$	0—3
SO ₄	Рассоление	0,03		$\alpha = 1,38 v^{0,53}$	0—3
SO ₄	Засоление	0,05—0,12	0,25	$\alpha = 14,6 v - 0,73$	0—15
SO ₄	Рассоление	0,03		$\alpha = 1,38 v^{0,57}$	0—15
Na	Засоление	0,1—0,3	0,52	$\alpha = 1,05 v + 0,55$	0—15
		0,03		$\alpha = 7,4 v^{1,47}$	0—15
Na	Рассоление	0,1—0,3	0,28	$\alpha = 4,0 v + 0,01$	0—15
		0,3		$\alpha = 20 v^{1,53}$	0—15

Ион	Изучаемый процесс	Диапазон изменения скоростей фильтрации v , м/сут	Обобщенные параметры солепереноса		
			Эффективная пористость n_e	Уравнение регрессии	
				$\alpha=f(v)$	Интервал, м

Суглинки средние (Совруновский участок)

Cl	Засоление-рассоление	0,03	0,23	$\alpha = 30,03 v^{1,83}$	
SO ₄	Засоление	0,04—0,34	0,30	$\alpha = 6,9 v + 0,32$	0—3
		0,03		$\alpha = 34,3 v - 1,98$	0—6
				$\alpha = 12,9 v^{1,93}$	0—3
				$\alpha = 363 v^{2,7}$	0—6
SO ₄	Рассоление	0,03—0,15	0,38	$\alpha = 11,2 v - 0,1$	0—3
		0,03		$\alpha = 11,01 v - 0,16$	0—6
				$\alpha = 26,4 v^{1,39}$	0—3
				$\alpha = 83 v^{1,78}$	0—6
Na	Засоление	0,07—0,34	0,46	$\alpha = 4,4 v - 0,27$	0—6
		0,03		$\alpha = 6,01 v^{1,37}$	0—6
Na	Рассоление	0,03—0,15	0,31	$\alpha = 3,0 v + 0,05$	0—3
		0,03		$\alpha = 3,0 v + 0,11$	0—6
				$\alpha = 2,54 v^{0,81}$	0—6

Т а б л и ц а 35

Параметры солепереноса лёссовидных пород зоны аэрации Восточного Предкавказья (гомогенная фильтрационная среда)

Ион	Изучаемый процесс	Диапазон изменения скоростей фильтрации v , м/сут	Обобщенные параметры солепереноса		
			Эффективная пористость n_e (средняя)	Объем ячеек в объеме пор $\bar{\omega}$	Уравнение регрессии $\tilde{D}=f(v)$
Суглинки легкие (Елизаветинский участок)					
Cl	Засоление Рассоление	0,6—0,8 0,03	0,33	0,5	$\tilde{D} = 0,0016 - 0,0342v$ $\tilde{D} = 0,035 v^{1,14}$
SO ₄	Засоление	0,1—0,3 0,03	0,50	0,5	$\tilde{D} = 0,156 v + 0,014$ $\tilde{D} = 0,377 v^{2,18}$
SO ₄	Рассоление	0,05—0,12 0,03	0,45	0,5	$\tilde{D} = 0,083 v + 0,0024$ $\tilde{D} = 0,155 v^{1,49}$
Na	Засоление	0,1—0,3 0,03	1,00	0,5	$\tilde{D} = 0,079 v + 0,0024$ $\tilde{D} = 0,467 v^{2,02}$
Na	Рассоление	0,05—0,12 0,03	0,45	0,5	$\tilde{D} = 0,009 v + 0,0034$ $\tilde{D} = 0,034 v^{0,85}$

Ион	Изучаемый процесс	Диапазон изменения скоростей фильтрации v , м/сут	Обобщенные параметры солепереноса		
			Эффективная пористость n_e (средняя)	Объем ячеек в объеме пор $\bar{\omega}$	Уравнение регрессии $\tilde{D}=f(v)$
Суглинки средние (Совруновский участок)					
Cl	Засоление Рассоление	0,15—0,3 0,09	0,25	0,5	$\tilde{D} = 0,074 v + 0,0076$ $\tilde{D} = 0,045 v^{1,08}$
SO ₄	Засоление	0,04—0,34 0,03	0,46	0,5	$\tilde{D} = 0,1 v + 0,0019$ $\tilde{D} = 0,23 v^{1,27}$
SO ₄	Рассоление	0,03—0,15 0,03	0,57	0,5	$\tilde{D} = 0,019 v + 0,0011$ $\tilde{D} = 0,036 v^{0,97}$
Na	Засоление	0,07—0,34 0,03	0,94	0,5	$\tilde{D} = 0,055 v + 0,0021$ $\tilde{D} = 0,073 v^{1,03}$
Na	Рассоление	0,03—0,15 0,03	0,53	0,5	$\tilde{D} = 0,032 v + 0,001$ $\tilde{D} = 0,044 v^{0,98}$

и в средних — $n_{\text{сCl}} = 0,25$ при $\theta = 0,22$. Эффективная пористость по ионам SO_4 и Na имеет большие значения, чем по иону Cl, что видно из табл. 36 и 37. Однако для процесса рассоления по ионам SO_4 и Na в легких суглинках (Елизаветинский участок) по модели макродисперсии получены меньшие значения эффективной пористости, чем иона Cl, а для средних суглинков (Совруновский участок) характерно незначительное возрастание эффективной пористости по иону Na. Это можно объяснить следующими причинами: 1) процесс рассоления сопровождается растворением солей, и поэтому вместо постепенного снижения концентрации происходит привнос ионов SO_4 за счет растворения солей, находящихся в твердой фазе, что и занижает значения эффективной пористости при десорбции; 2) в процессе рассоления по иону Na происходит медленное вытеснение его из почвенного поглощающего комплекса, что также замедляет процесс рассоления и сказывается на уменьшении эффективной пористости по иону Na.

С целью использования гидрохимических параметров на практике целесообразно получить зависимость их от величины, определяющей интенсивность переноса солей в породах зоны аэрации, т. е. от скорости фильтрации или величины расхода влаги в зоне аэрации. Для этого было выполнено 24 опыта при различных значениях скорости фильтрации v . Данные статистической обработки, проведенной по методу наименьших квадратов для линейной и нелинейной корреляции, показали, что в диапазоне изменения v от 0,03 до 0,8 м/сут существует линейная зависимость между скоростью фильтрации и коэффициентами массообмена и микродисперсии. При скоростях фильтрации $< 0,03$ м/сут линейная связь между $\alpha = f(v)$ и $\tilde{D} = f(v)$ нарушается и переходит в степенную. Результаты статистической обработки этих зависимостей приведены в табл. 34 и 35, использовались они при гидрогеохимических прогнозах.

ПРОГНОЗ ИЗМЕНЕНИЯ КАЧЕСТВА ПОДЗЕМНЫХ ВОД ПОД ВЛИЯНИЕМ ОРОШЕНИЯ

Прогноз изменения режима грунтовых вод и изменения их качества в зоне мелиоративного освоения направлен: 1) на оценку интенсивности подъема уровня грунтовых вод и определения времени подъема их до критической глубины и глубины стабилизации под влиянием орошения; 2) на выяснение интенсивности рассоления пород зоны аэрации на первых стадиях орошения; 3) на изменение качества грунтовых вод и определение степени увеличения их минерализации за счет привноса солей из пород зоны аэрации; 4) на оценку возможности и интенсивности вторичного засоления пород зоны аэрации при достижении грунтовыми водами критической глубины и глубины стабилизации; 5) на рассмотрение грунтовых вод как источника вторичного засоления пород.

Для решения поставленных задач использованы аналитические методы расчета. Прогноз носит предварительный характер и выполняется при следующих допущениях: 1) исследование процессов солепереноса в натуральных и лабораторных условиях проведено только на двух опытных типовых участках и не в полной мере характеризует всю территорию БСК-4; 2) влаго- и солеперенос рассматривается как одномерный по вертикальной составляющей и выполняется как точечный для площадки в 1 м^2 на опытном участке; 3) при расчетах начальные, граничные условия и параметры массопереноса усредняются; 4) принимаются условия длительного орошения, прогноз считается долгосрочным, и внутригодовые изменения не рассматриваются.

Схематизация гидрогеохимических условий применительно к решению прогнозных задач

Для решения прогнозных гидрогеохимических задач выполняется геофильтрационная и гидрогеохимическая схематизация. При этом геофильтрационная рассматривается как база для проведения гидрогеохимической и обе представляют собой второй этап схематизации природных условий исследуемого объекта, выполненной ранее применительно к схеме опробования разреза с целью определения миграционных параметров. Одной из главных задач второго этапа является обоснование и доказательство сохранения или изменения в прогнозной модели объекта всех тех главных гидродинамических и гидрохимических факторов, которые определили условия солепереноса в лабораторных и опытных работах. Заметим, что эта задача является важнейшей специфической особенностью гидрогеохимической схематизации. Действительно, учесть в модели все физико-химические процессы и их параметры невозможно, поэтому выбирают главные механизмы массопереноса и пользуются обобщенными показателями этого переноса. При таком подходе весьма остро ставится вопрос о необходимости доказательства сохранения в прогнозный период всей той гидрогеохимической обстановки, которая существовала в процессе изучения миграционных параметров на принятых моделях массопереноса при проведении лабораторных и опытных работ. Подчеркнем, что здесь имеется в виду не столько соблюдение принятых граничных и начальных условий, сколько тождественность всей гидрогеохимической обстановки в целом, определяющей течение физико-химических процессов, например, температурных, микробиологических условий, окислительно-восстановительной обстановки и т. п. Эти показатели в математические модели непосредственно не входят. Однако эти условия обязательно должны изучаться, а тождественность их для лабораторных и прогнозных натуральных условий обосновываться. В таком понимании их можно назвать схематизационными гидрогеохимическими ограничениями и включать как обязательный эле-

Начальные данные для прогноза солепереноса

Зона	Интервал глубин, м	Средние значения параметров среды					Значения параметров солепереноса				
		$\gamma_{\text{ск}}, \text{ т/м}^3$	$C_{\text{ток}}, \text{ г/л}$	$C_{\text{max}}, \text{ г/л}$	$\theta_{\text{об}}$	$W, \text{ м/сут}$	Модель макродисперсии		Модель микродисперсии		n_e
							$\alpha, \text{ сут}^{-1}$	n_e	Гетерогенная схема $\tilde{D}, \text{ м}^2/\text{сут}$	Диффузионная схема $D, \text{ мм}^2/\text{сут}$	
Елизаветинский участок											
Аэрации	0—3	1,4	Cl = 0,47 SO ₄ = 0,68 Na = 0,97	0,89 2,42 1,74	0,26	↑ 0,00016	$\alpha_{\text{Cl}} = 1,07 \cdot 10^{-2}$ $\alpha_{\text{SO}_4} = 1,23 \cdot 10^{-2}$ $\alpha_{\text{Na}} = 1,95 \cdot 10^{-5}$	$n_e = 0,26$	$\tilde{D}_{\text{Cl}} = 1,14 \cdot 10^{-6}$ $\tilde{D}_{\text{SO}_4} = 2,0 \cdot 10^{-9}$ $\tilde{D}_{\text{Na}_3} = 1,0 \cdot 10^{-8}$	$D_{\text{MCl}} = 1,6 \cdot 10^{-3}$ $D_{\text{MSO}_4} = 2,4 \cdot 10^{-3}$	$n_e = 0,26$
						↓ 0,0015	$\alpha_{\text{Cl}} = 5,81 \cdot 10^{-2}$ $\alpha_{\text{SO}_4} = 4,11 \cdot 10^{-2}$ $\alpha_{\text{Na}_3} = 5,25 \cdot 10^{-4}$ $\alpha_{\text{Na}_p} = 9,6 \cdot 10^{-4}$	$n_{e\text{Cl}} = 0,26$ $n_{e\text{SO}_4^4} = 0,20$ $n_{e\text{SO}_4^3} = 0,30$ $n_{e\text{Na}_3} = 0,41$ $n_{e\text{Na}_p} = 0,25$	$\tilde{D}_{\text{Cl}} = 2,1 \cdot 10^{-5}$ $\tilde{D}_{\text{SO}_4^3} = 2,6 \cdot 10^{-7}$ $\tilde{D}_{\text{SO}_4^4} = 9,6 \cdot 10^{-6}$ $\tilde{D}_{\text{Na}_3} = 9,3 \cdot 10^{-7}$ $\tilde{D}_{\text{Na}_p} = 1,35 \cdot 10^{-4}$	$D_{\text{MNa}_3} = 2,4 \cdot 10^{-3}$ $D_{\text{MNa}_p} = 3,4 \cdot 10^{-3}$	$n_{e\text{Cl}} = 0,33$ $n_{e\text{SO}_4^4} = 0,35$ $n_{e\text{SO}_4^3} = 0,39$ $n_{e\text{Na}_3} = 0,69$ $n_{e\text{Na}_p} = 0,36$
	3—6	1,4	Cl = 0,42 SO ₄ = 3,05 Na = 1,87	1,65 20,87 4,58	0,27	↑ 0,00049	$\alpha_{\text{Cl}} = 2,33 \cdot 10^{-2}$		$\tilde{D}_{\text{Cl}} = 5,9 \cdot 10^{-6}$		
	6—9		Cl = 0,51 SO ₄ = 6,30 Na = 3,90	1,77 9,33 5,18	0,28	↓ 0,00049	$\alpha_{\text{SO}_4} = 2,25 \cdot 10^{-2}$ $\alpha_{\text{Na}_3} = 10,06 \cdot 10^{-5}$	$n_{e\text{Cl}} = 0,26$ $n_{e\text{SO}_4^3} = 0,30$	$\tilde{D}_{\text{SO}_4^3} = 2,3 \cdot 10^{-8}$ $\tilde{D}_{\text{SO}_4^4} = 1,81 \cdot 10^{-6}$	$D_{\text{MCl}} = 1,6 \cdot 10^{-3}$	$n_{e\text{Cl}} = 0,33$ $n_{e\text{SO}_4^3} = 0,66$
						↓ 0,00049	$\alpha_{\text{Na}_p} = 17,4 \cdot 10^{-5}$	$n_{e\text{SO}_4^4} = 0,22$ $n_{e\text{Na}_3} = 0,63$	$\tilde{D}_{\text{Na}_3} = 9,62 \cdot 10^{-8}$ $\tilde{D}_{\text{Na}_p} = 5,2 \cdot 10^{-5}$	$D_{\text{MSO}_4} = 2,4 \cdot 10^{-3}$ $D_{\text{MNa}_3} = 2,4 \cdot 10^{-3}$	$n_{e\text{SO}_4^4} = 0,51$ $n_{e\text{Na}_3} = 1,34$
12—15			Cl = 1,30 SO ₄ = 3,36 Na = 2,79	1,80 1,58 4,20	0,31	↓ 0,00044	$\alpha_{\text{Cl}} = 2,05 \cdot 10^{-2}$ $\alpha_{\text{SO}_4} = 1,68 \cdot 10^{-2}$ $\alpha_{\text{Na}_3} = 8,58 \cdot 10^{-5}$ $\alpha_{\text{Na}_p} = 14,6 \cdot 10^{-5}$	$n_{e\text{Na}_p} = 0,31$	$\tilde{D}_{\text{Cl}} = 5,2 \cdot 10^{-6}$ $\tilde{D}_{\text{SO}_4^3} = 1,8 \cdot 10^{-8}$ $\tilde{D}_{\text{SO}_4^4} = 1,54 \cdot 10^{-6}$ $\tilde{D}_{\text{Na}_3} = 7,75 \cdot 10^{-8}$ $\tilde{D}_{\text{Na}_p} = 4,73 \cdot 10^{-5}$	$D_{\text{MNa}_p} = 3,4 \cdot 10^{-3}$	$n_{e\text{Na}_p} = 0,54$

Зона	Интервал глубин, м	Средние значения параметров среды					Значения параметров солепереноса				
		$\gamma_{СК}$, т/м ³	$C_{ТОК}$, г/л	C_{max} , г/л	$\theta_{об}$	W , м/сут	Модель макроди- сперсии		Модель микродисперсии		n_e
							α , сут ⁻¹	n_e	Гетерогенная схема \tilde{D} , м ² /сут	Диффузионная схема D , мм ² /сут	
Грунтовых вод	15	Cl = 0,531	SO ₄ = 1,82	Na=0,94	Поливная вода Cl = 0,06		SO ₄ = 0,13	Na = 0,13			
		Совруновский участок									
			Cl = 4,57	5,77		0,00016 ↑	$\alpha_{Cl} = 3,39 \cdot 10^{-6}$ $\alpha_{SO_3^4} = 6,04 \cdot 10^{-7}$ $\alpha_{Na_3} = 2,14 \cdot 10^{-3}$	$n_{Cl} = 0,26$	$\tilde{D}_{Cl} = 3,58 \cdot 10^{-6}$ $\tilde{D}_{SO_3^4} = 3,45 \cdot 10^{-6}$ $\tilde{D}_{Na_3} = 8,98 \cdot 10^{-6}$	$D_{M_{Cl}} = 7,6 \cdot 10^{-3}$	$n_e = 0,26$
Аэрации	0—3	1,5	SO ₄ = 7,50	27,92	0,26	0,0015 ↓	$\alpha_{Cl} = 2,03 \cdot 10^{-4}$ $\alpha_{SO_3^4} = 4,53 \cdot 10^{-5}$ $\alpha_{SO_p^4} = 3,08 \cdot 10^{-3}$ $\alpha_{Na} = 1,29 \cdot 10^{-2}$	$n_{eCl} = 0,23$ $n_{eSO_3^4} = 0,30$ $n_{eSO_p^4} = 0,32$ $n_{eNa_3} = 0,40$ $n_{eNa_p} = 0,26$	$\tilde{D}_{Cl} = 4,0 \cdot 10^{-5}$ $\tilde{D}_{SO_3^4} = 5,9 \cdot 10^{-5}$ $\tilde{D}_{SO_p^4} = 6,55 \cdot 10^{-5}$ $\tilde{D}_{Na_3} = 7,45 \cdot 10^{-5}$ $\tilde{D}_{Na_p} = 7,48 \cdot 10^{-5}$	$D_{M_{SO_3^4}} = 1,9 \cdot 10^{-3}$ $D_{M_{SO_p^4}} = 1,1 \cdot 10^{-3}$	$n_{eCl} = 0,25$ $n_{eSO_3^4} = 0,43$ $n_{eSO_p^4} = 0,45$ $n_{eNa_3} = 0,89$ $n_{eNa_p} = 0,56$
			Na = 3,53	7,57							
	3—7	1,6	Cl = 3,84	4,86	0,27	0,00049 ↓	$\alpha_{Cl} = 2,63 \cdot 10^{-5}$ $\alpha_{SO_3^4} = 5,25 \cdot 10^{-6}$ $\alpha_{SO_p^4} = 6,63 \cdot 10^{-4}$ $\alpha_{Na_3} = 1,75 \cdot 10^{-4}$ $\alpha_{Na_p} = 5,31 \cdot 10^{-3}$	$n_{eCl} = 0,27$ $n_{eSO_3^4} = 0,30$ $n_{eSO_p^4} = 0,44$ $n_{eNa_3} = 0,51$ $n_{eNa_p} = 0,36$	$\tilde{D}_{Cl} = 1,12 \cdot 10^{-5}$ $\tilde{D}_{SO_3^4} = 1,44 \cdot 10^{-5}$ $\tilde{D}_{SO_p^4} = 2,22 \cdot 10^{-5}$ $\tilde{D}_{Na_3} = 2,84 \cdot 10^{-5}$ $\tilde{D}_{Na_p} = 2,53 \cdot 10^{-5}$	$D_{M_{Na_3}} = 2,1 \cdot 10^{-3}$ $D_{M_{Na_p}} = 0,95 \cdot 10^{-3}$	$n_{eCl} = 0,25$ $n_{eSO_3^4} = 0,55$ $n_{eSO_p^4} = 0,70$ $n_{eNa_3} = 1,00$ $n_{eNa_p} = 0,70$
				SO ₄ = 18,94			30,21				
Грунтовых вод	7		Cl = 3,40		Поливная вода Cl = 0,03; SO ₄ = 0,04; Na = 0,002						
			SO ₄ = 2,88								
			Na = 2,22								

Примечание. ↓ — нисходящий поток влаги; ↑ — восходящий поток влаги; р — процесс рассоления пород; з — процесс засоления пород; $C_{ТОК}$ — концентрация токсичных ионов в вегетационный период; C_{max} — максимальная концентрация ионов.

мент в гидрогеохимическую схематизацию. Основные показатели гидрогеохимической обстановки (рН, Еh, Т в °С и др.) следует включать как необходимый элемент в математическое описание принятой модели массопереноса. На эти важные моменты, определяющие достоверность миграционных исследований, обращается внимание в главах 4 и 5 настоящей книги.

Геофилтрационная схематизация. Опорная расчетная точка выбрана в месте расположения опытного котлована и гидрохимической скважины. Для простоты расчетов ей придаются геометрические размеры: площадь поперечного сечения—1 м², высота отвечает начальной глубине до уровня грунтовых вод h_n . Геофилтрационное строение расчетной призмы определяется особенностями в ней влагопереноса в условиях орошения. По этим особенностям были выделены три зоны [22]: первая, 0—5 м—активного водообмена, где имеют место как нисходящие, так и восходящие потоки влаги; вторая, 5—9 м—постоянного водообмена, характеризующаяся нисходящими потоками влаги; третья, более 9 м—постепенного увеличения влагосодержания, включающая область капиллярного влагонасыщения. Согласно данным А. М. Лаврентьева [22], для лёссовидных суглинков в интервале глубин 0—3 м нисходящий поток влаги имеет единичный расход 0,0015 м/сут, расход восходящего потока влаги равен 0,00016 м/сут; в интервале глубин 3—12 м он составляет 0,00049 м/сут, а глубже 12 м уменьшается до 0,00044 м/сут. Этот поток влаги переносит соли и взаимодействует с породами зоны аэрации и грунтовыми водами. Его интенсивность определяет исходные значения скорости движения w (влагоперенос), сведения о которой приведены в табл. 36.

За нижнюю границу при прогнозных расчетах взят уровень грунтовых вод, где принято условно, что подземный приток равен подземному оттоку. При глубине залегания грунтовых вод <3 м имеет место нисходящий поток влаги и, следовательно, инфильтрационное питание; при глубине >3 м происходит испарение с их поверхности. Верхней границей является поверхность земли, через которую поступающие на нее поливные воды и атмосферные осадки попадают в зону аэрации.

Гидрогеохимическая схематизация. Цель подобной схематизации заключается в: 1) выявлении главных физико-химических процессов и механизмов солепереноса, протекающих в системе порода—вода в условиях орошения; 2) установлении основных исходных параметров солепереноса; 3) рассмотрении среды как прогнозного объекта, в котором происходит перенос солей и определение для него исходных водно-физических характеристик; 4) определении начальных и граничных условий.

При постановке лабораторных и полевых опытов были созданы, по возможности, те условия, которые могут быть характерны для гидрогеохимических процессов при орошении: использовалась вода поверхностных водотоков, принимался значительный диапазон минерализаций и химического состава рас-

творов при моделировании засоления и рассоления пород зоны аэрации, ряд опытов был длительным и т. п. Учитывая все это, а также предварительное назначение прогноза, можно считать, что изученные в опытах процессы будут наблюдаться и при прогнозе.

На исследуемых участках солеперенос может быть удовлетворительно описан математическими моделями макро- и микродисперсии для расчетных схем молекулярно-конвективного переноса в гомогенной и гетерогенной средах. В них все физико-химические процессы, сопровождающие солеперенос, обобщаются показателем эффективной пористости (определялся как среднеарифметическая величина из экспериментальных значений отдельно для ионов Cl , SO_4 , Na в процессах засоления и рассоления), коэффициентом массообмена и коэффициентом микродисперсии, зависящими от скорости фильтрации (см. табл. 34, 35, 36). Кроме этих схем, в качестве промежуточной рассмотрена диффузионная, для которой значения коэффициента молекулярной диффузии получены при обработке экспериментов по модели микродисперсии ($\bar{D} = D_m + \delta_2 v$ или $\bar{D} = 0,0016 - 0,0342 v$, где $D_m = 0,0016$ м/сут) и приведены в табл. 35 и 36.

Такая схема учитывает в процессе длительного орошения кольматацию порового пространства, значительное снижение скоростей инфильтрации (менее 0,01 м/сут) и возрастание влияния молекулярной диффузии на солеперенос в породах зоны аэрации.

Геологическая среда неоднородна (гетерогенна) и характеризуется изменяющимся с глубиной режимом влажности и степенью засоления пород зоны аэрации. Воспользуемся ступенчатой аппроксимацией и выделим расчетные слои в вертикальном разрезе принятой призмы. По характеру эпюры засоления зона 0—6 м совпадает с гидроморфной зоной. По данным водно-физических исследований выделяются две подзоны: 0—3 и 3—6 м. В первой наблюдаются значительные изменения водно-физических, фильтрационных свойств, засоления, гранулометрического состава (см. рис. 58). Глубине 3 м соответствует критическая глубина залегания грунтовых вод, с которой начинается их активное испарение. В зоне 3—6 м происходит увеличение степени засоления пород зоны аэрации, к ней приурочен первый максимум их засоления. Зона мощностью 6—9 м и более характеризуется постоянным влагообменом и слабым изменением свойств пород зоны аэрации. Причем с глубины более 12 м наблюдается уменьшение степени засоления пород зоны аэрации (см. рис. 58). Такое изменение свойств пород позволяет представить разрез в виде расчетных слоев (ступеней), мощность каждого кратна 3 м (на Елизаветинском участке выделено 5 слоев при глубине залегания грунтовых вод 15 м, Совруновском — 2, второй имеет мощность 4 м, так как глубина залегания грунтовых вод 7 м и выделять слой мощностью 1 м не имело смысла).

Таблица 37

Результаты предварительного гидрогеохимического прогноза изменения солевого режима легких лёссовидных суглинков и минерализации грунтовых вод Елизаветинского участка (модель макродисперсии)

Зона	Слой, м	Начальное засоление, г/л		Стадия орошения, концентрация С, г/л									
		C _{ток} , г/л	C _{max} , г/л	I		II		III		IV		V	
				ток	max	ток	max	ток	max	ток	max	ток	max
Аэрация	0—3 (V)	Cl = 0,47 SO ₄ = 0,68 Na = 0,97	0,89 2,42 1,74	0,06 0,13 0,19	0,06 0,13 0,24	0,06 0,13 0,13	0,06 0,13 0,15	0,06 0,13 0,13	0,06 0,13 0,15	0,06 0,13 0,13	0,06 0,13 0,13	0,26 1,91 0,85	0,27 4,15 1,54
	3—6 (IV)	Cl = 0,42 SO ₄ = 3,05 Na = 1,87	1,65 20,87 4,58	0,43 0,85 1,54	0,98 2,73 3,56	0,34 0,39 1,12	0,62 1,07 2,48	0,23 0,23 0,81	0,4 0,47 1,74	0,25 (0,22) 1,89 (0,13) 0,97 (0,62)	0,27 (0,38) 4,15 (0,13) 1,81 (1,29)	0,06 (0,22) 0,13 (0,13) 0,27 (0,62)	0,17 (0,38) 2,14 (0,13) 0,97 (1,29)
	6—9 (III)	Cl = 0,61 SO ₄ = 6,3 Na = 3,59	1,77 9,33 5,18	0,47 3,09 2,78	1,61 9,6 4,3	0,43 1,83 2,03	1,42 5,7 3,26	0,50 (0,41) 3,62 (0,14) 1,69 (1,58)	1,06 (0,41) 7,96 (0,81) 4,18 (2,59)	0,25 (0,49) 1,89 (0,21) 0,97 (1,6)	0,27 (1,02) 4,15 (0,95) 1,81 (3,73)	0,46 (0,49) 3,13 (0,21) 1,61 (1,66)	0,48 (1,02) 4,38 (0,95) 2,09 (3,73)
	9—12 (II)	Cl = 1,73 SO ₄ = 7,09 Na = 4,9	1,96 9,71 5,37	1,25 6,36 3,91	1,75 11,41 4,73	0,77 (1,19) 5,24 (1,92) 2,20 (3,19)	1,99 (0,74) 10,39 (5,89) 4,18 (4,06)	0,5 (1,16) 3,62 (1,92) 1,69 (2,91)	1,06 (1,91) 7,96 (5,98) 4,18 (4,13)	0,67 (1,12) 4,4 (1,95) 2,26 (2,57)	0,69 (1,09) 4,53 (2,0) 2,36 (2,48)	0,46 (1,12) 3,13 (1,95) 1,61 (2,57)	0,48 (1,09) 4,38 (2,0) 2,09 (2,48)
	12—15 (I)	Cl = 1,3 SO ₄ = 3,36 Na = 2,79	1,80 1,58 4,2	0,83 (1,23) 4,32 (3,97) 2,09 (2,98)	2,97 (1,89) 9,53 (6,94) 4,18 (4,18)	0,77 (0,84) 5,24 (3,49) 2,2 (2,75)	1,99 (0,98) 10,39 (6,99) 4,18 (4,18)	0,78 (1,06) 5,23 (4,7) 2,37 (2,69)	0,99 (1,97) 10,32 (7,06) 4,18 (4,18)	0,67 (1,05) 4,4 (4,72) 2,26 (2,74)	0,69 (1,04) 4,53 (4,4) 2,36 (2,62)	0,46 (1,05) 3,13 (4,72) 1,61 (2,74)	0,69 (1,04) 4,53 (4,4) 2,36 (2,62)
Грунтовые воды	15	Cl = 0,53 SO ₄ = 1,82 Na = 0,94		0,83 4,32 2,09	2,37 2,53 4,18	— — —	— — —	— — —	— — —	— — —	— — —	— — —	— — —

Примечание. 1. В скобках приведен полный состав остаточных солей в воде насыщенных пород. 2. В табл. 37, 38, 39, 40 жирной линией дана граница раздела зоны аэрации и грунтовых вод.

В табл. 37, 38, 39, 40 жирной линией дана граница раздела зоны аэрации и грунтовых вод.

В пределах каждого слоя определяются средние значения параметров среды: объемная масса скелета грунта (по данным лабораторных опытов); средние значения содержания токсичных ионов в породах зоны аэрации и средние максимальные их значения, переведенные в граммы на литр (необходимость этого будет рассмотрена ниже) и полученные по данным полевых и лабораторных исследований; средние значения объемной влажности пород и расходов влаги в зоне аэрации (скорость инфильтрации), полученные на орошаемом Зеленокумском участке по результатам исследований МГРИ. Все эти сведения приведены в табл. 36.

Влажность в зоне аэрации меньше полной, поэтому необходимо учитывать это при определении эффективной пористости. Поскольку ее значения в условиях эксперимента определялись при полном насыщении, можно использовать их при расчетах изменения гидрохимических условий в зоне полного насыщения. Для определения эффективной пористости n_e^* в зоне неполного насыщения при нисходящем потоке влаги используем формулы $n_e^* = \theta_{об} + n_{сорб}$, где $\theta_{об}$ — объемная влажность пород зоны аэрации; $n_{сорб} = n_e - n$; n_e — эффективная пористость, установленная по экспериментальным данным для этих пород. В качестве активной пористости (n) используем эффективную, определенную

по иону Cl . В зоне аэрации, где преобладает восходящий поток влаги, вместо n_e возьмем значения $\theta_{об}$, как это рекомендует А. А. Рошаль [30].

Поскольку процесс подъема уровня грунтовых вод до критического при их значительной начальной глубине залегания достаточно длительный, для удобства прогнозных расчетов выделим условные стадии орошения. Продолжительность каждой стадии определяется временем подъема уровня грунтовых вод на 3 м, т. е. временем заполнения выделенного расчетного слоя.

Начальные условия определяются исходными значениями среднего засоления в расчетном слое пород, средним начальным химическим составом и минерализацией грунтовых и поливных вод. Причем конечные расчетные значения концентрации предыдущего временного интервала (стадии орошения) будут начальными концентрациями следующей стадии орошения в последующем расчетном слое. Граничные условия определяются значениями расхода влаги на поверхности земли и кровли каждого нижележащего слоя. Числовые значения краевых условий приведены в табл. 36.

Методика гидрогеохимического прогноза

В качестве исходных использовались уравнения (164) и (169), по которым вычислялись прогнозные значения концентраций при принятых средних исходных параметрах солепереноса, полученных экспериментальным путем (см. табл. 36). Результаты предварительного гидрогеохимического прогноза изменения солевого состава пород зоны аэрации и изменения качества подземных вод под влиянием орошения приведены в табл. 37.

Прогноз по каждой модели проводился по двум вариантам. В первом, как это рекомендуют почвоведы, расчет велся по токсичным ионам Cl , SO_4 , Na , так как присутствие или отсутствие этих ионов в составе солей определяет условия развития сельскохозяйственных культур и пригодность земель для сельскохозяйственного освоения. Наблюдения за динамикой солей в породах зоны аэрации на воднобалансовых участках показали наличие повышенных концентраций ионов SO_4 и Na в породах этой зоны в осенний период по сравнению с летним. Это подтверждает возможность накопления повышенного содержания гипса, которое может привести к ухудшению режима влажности почв. Следовательно, необходимо рассчитать максимальное количество токсичных солей. По второму варианту определялись максимальные значения засоления пород зоны аэрации.

Гидрогеохимический прогноз включал три этапа: I — прогноз изменения уровня грунтовых вод под влиянием орошения; II — прогноз изменения гидрохимических условий в зоне аэрации под влиянием орошения; III — прогноз изменения минерализации грунтовых вод.

Прогноз подъема уровня грунтовых вод. Определяются число и длительность каждой условной стадии орошения, под которой понимается время подъема уровня грунтовых вод от исходного до заданного положения, т. е. на мощность расчетного слоя $h=3$ м. Это время определяется по уравнению

$$t = h\mu/\Delta W. \quad (171)$$

Здесь $\Delta W = W_{\text{ор}} - W_e$, где W_e — величина питания грунтовых вод в естественных условиях; $W_{\text{ор}}$ — орошаемых.

Глубина стабилизации $h_{\text{ст}}$ уровня грунтовых вод, на которой испарение с их поверхности компенсируется притоком влаги с оросительными водами, определяется по зависимости из работы [1]

$$h_{\text{ст}} = \left[1 - (u/u_0)^{\frac{1}{n'}} \right] h_k, \quad (172)$$

где u_0 — испаряемость; u — испарение, отвечающее глубине $h_{\text{ст}}$; h_k — критическая глубина залегания грунтовых вод, обычно она равна 3 м; n' — эмпирический показатель степени, $1 < n' < 2$.

Целесообразно время, скорость подъема уровня грунтовых вод и значения $h_{\text{ст}}$, h_k принимать по данным наблюдений за режимом грунтовых вод на орошаемых территориях.

Для принятого числа расчетных слоев и данных табл. 37 для Елизаветинского участка получено 5 стадий орошения длительностью: I—5,2 года, II, III и IV—по 4,2 года, V—1,0 год; для Совруновского: I—6 лет, II—1 год.

Прогноз изменения гидрохимических условий в зоне аэрации включал расчет изменения концентрации солей в поровых растворах пород зоны аэрации по уравнению (164) и (169) последовательно для каждой из установленных условных стадий орошения от поверхности земли до соответствующего положения уровня грунтовых вод. Начинается расчет для I стадии с первого от поверхности слоя 0—3 м, где верхним граничным условием является минерализация оросительной воды, а средняя скорость инфильтрации влаги зависит от величины водоподачи на орошение (в данном случае водоподача равна $W = W_{\text{п}} + O$, где $W_{\text{п}}$ — поливная норма, O — осадки). По разности между начальной и полученной концентрацией каждого иона определяется изменение минерализации поливных вод, пришедших на поверхность второго слоя 3—6 м, которая и принимается во втором слое за граничное условие для расчета изменения засоления пород. Так последовательно определяется изменение степени засоления пород зоны аэрации под влиянием поливных вод, инфильтрующихся через все вышележащие слои в зоне неполного насыщения за первый этап орошения, и одновременно выявляется метаморфизация поливных вод как результат их взаимодействия с породами зоны аэрации. В табл. 37—40 показаны последовательный подъем уровня грунтовых

Результаты предварительного прогноза солевого режима легких лёссовидных суглинков Елизаветинского участка по модели микродисперсии

Зона	Слой, м	Начальное засоление, г/л		Стадии орошения, концентрация С, г/л									
		C _{ток}	C _{тах}	I		II		III		IV		V	
				ток	тах	ток	тах	ток	тах	ток	тах	ток	тах
Азати	0—3 (V)	Cl = 0,47	0,89	0,47	0,89	0,47	0,89	0,47	0,89	0,47	0,86	0,12	0,28
		SO ₄ = 0,68	2,42	0,68	2,42	0,68	2,42	0,68	2,42	0,68	2,42	0,15	0,15
		Na = 0,97	1,74	0,97	1,74	0,96	1,72	0,95	1,7	0,95	1,7	0,16	0,32
	3—6 (IV)	Cl = 0,42	1,65	0,42	1,65	0,14	0,43	0,06	0,07	0,11 (0,06)	0,27 (0,07)	0,47 (0,06)	0,86 (0,07)
		SO ₄ = 3,05	20,87	0,133	0,133	0,133	0,133	0,133	0,13	0,13 (0,13)	0,13 (0,13)	0,68 (0,13)	2,42 (0,13)
		Na = 1,87	4,58	0,25	0,44	0,14	0,16	0,14	0,15	0,14 (0,14)	0,3 (0,15)	0,95 (0,14)	1,70 (0,15)
	6—9 (III)	Cl = 0,61	1,77	0,53	1,53	0,36	1,31	0,37 (0,15)	1,38 (0,47)	0,11 (0,37)	0,27 (1,38)	0,87 (0,11)	1,77 (0,27)
		SO ₄ = 6,3	9,33	6,3	9,33	0,81	9,33	3,57 (0,13)	4,73 (0,13)	0,13 (3,57)	0,13 (4,73)	3,72 (0,13)	10,01 (0,13)
		Na = 3,59	6,18	1,88	4,33	0,27	0,48	1,07 (0,14)	2,39 (0,44)	0,14 (1,07)	0,3 (2,39)	3,11 (0,14)	3,82 (0,3)
	9—12 (II)	Cl = 1,73	1,96	1,03	1,23	1,36 (0,49)	1,15 (1,5)	0,37 (1,36)	1,38 (1,15)	1,36 (0,37)	1,15 (1,38)	0,87 (0,37)	1,77 (1,38)
		SO ₄ = 7,09	9,71	7,09	9,71	6,37 (6,3)	15,29 (0,13)	3,57 (6,37)	4,73 (15,29)	3,87 (3,57)	15,29 (4,73)	3,72 (3,57)	10,01 (4,73)
		Na = 4,9	5,37	3,52	5,13	5,12 (1,86)	5,24 (4,29)	1,07 (5,18)	2,39 (5,24)	5,15 (1,07)	5,24 (2,39)	3,11 (1,07)	3,82 (2,39)
	12—15 (I)	Cl = 1,3	1,80	0,9 (0,86)	1,15 (1,07)	1,36 (0,9)	1,15 (1,07)	0,9 (1,36)	1,5 (1,15)	1,36 (0,9)	1,15 (1,5)	1,36 (0,9)	1,15 (1,5)
		SO ₄ = 3,36	1,58	2,59 (3,05)	4,15 (20,87)	6,37 (2,59)	15,29 (4,15)	2,59 (1,37)	0,13 (15,29)	3,87 (2,59)	15,29 (0,13)	3,87 (2,59)	15,29 (0,13)
		Na = 2,79	4,2	1,87 (4,84)	2,57 (5,36)	5,12 (1,87)	5,24 (2,57)	1,86 (5,12)	4,29 (5,24)	5,15 (1,86)	5,24 (4,29)	5,15 (1,86)	5,24 (4,29)
Грунтовые воды	15	Cl = 0,53		0,9	1,15	—	—	—	—	—	—	—	—
		SO ₄ = 1,82		2,59	4,15	—	—	—	—	—	—	—	—
		Na = 0,94		1,87	2,57	—	—	—	—	—	—	—	—

Результаты предварительного прогноза солевого режима легких лёссовидных суглинков Елизаветинского участка по диффузионной схеме

Зона	Слой, м	Начальное засоление, г/л		Стадии орошения, концентрация C , г/л									
		$C_{\text{ток}}$	C_{max}	I		II		III		IV		V	
				ток	max	ток	max	ток	max	ток	max	ток	max
Лэрэции	0—3 (V)	Cl = 0,47	0,89	0,46	0,85	0,44	0,81	0,42	0,77	0,33	0,6	0,34	0,63
		SO ₄ = 0,68	2,42	0,65	2,28	0,6	2,09	0,56	1,91	0,44	1,42	0,63	1,87
		Na = 0,97	1,74	0,95	1,64	0,84	1,49	0,77	1,35	0,76	1,34	0,83	1,39
	3—6 (IV)	Cl = 0,42	1,65	0,35	1,34	0,29	1,04	0,24	0,81	0,31 (0,21)	0,75 (0,46)	0,31 (0,21)	0,73 (0,46)
		SO ₄ = 3,05	20,87	2,41	16,34	1,79	11,92	1,34	8,71	1,52 (1,01)	4,12 (6,28)	1,43 (1,01)	3,69 (6,28)
		Na = 1,81	4,58	1,48	3,57	1,21	2,87	0,99	2,31	1,08 (0,84)	1,53 (1,79)	1,06 (0,84)	1,5 (1,79)
	6—9 (III)	Cl = 0,61	1,77	0,51	1,48	0,41	1,2	0,5 (0,31)	0,92 (0,89)	0,31 (0,38)	0,75 (0,9)	0,55 (0,38)	0,85 (0,90)
		SO ₄ = 6,3	9,33	4,98	8,24	3,83	7,27	2,31 (2,72)	4,63 (5,97)	1,52 (2,58)	4,12 (5,51)	2,08 (2,58)	4,44 (5,51)
		Na = 3,59	5,18	3,02	4,43	2,47	3,68	1,54 (1,99)	2,2 (3,0)	1,08 (1,88)	1,53 (2,81)	1,51 (1,88)	2,1 (2,81)
	9—12 (II)	Cl = 1,73	1,96	1,39	1,67	0,68 (1,06)	1,11 (1,39)	0,5 (0,95)	0,92 (1,31)	0,79 (0,82)	1,15 (1,2)	0,55 (0,82)	0,85 (1,2)
		SO ₄ = 7,09	9,71	5,83	8,74	2,04 (4,49)	5,14 (7,69)	2,31 (3,64)	4,63 (6,81)	2,63 (3,18)	4,76 (6,05)	2,08 (3,18)	4,44 (6,05)
		Na = 4,3	5,37	4,15	4,7	1,78 (3,4)	2,44 (3,99)	1,54 (3,01)	2,2 (3,67)	1,94 (2,66)	2,67 (3,32)	1,94 (2,66)	2,1 (3,32)
	12—15 (I)	Cl = 1,3	1,80	0,64 (1,12)	1,12 (1,6)	0,68 (0,98)	1,11 (1,46)	0,86 (1,16)	1,22 (1,35)	0,79 (1,07)	1,15 (1,31)	0,79 (1,07)	1,15 (1,31)
		SO ₄ = 3,36	1,58	2,6 (3,37)	3,66 (2,94)	2,04 (3,14)	5,14 (2,8)	2,37 (2,81)	4,44 (3,5)	2,63 (2,68)	4,76 (3,78)	2,63 (2,68)	4,76 (3,78)
		Na = 2,79	4,2	1,52 (2,6)	1,97 (3,88)	1,78 (2,34)	2,44 (3,41)	1,92 (2,2)	2,68 (3,17)	1,94 (2,13)	2,67 (3,05)	1,94 (2,13)	2,67 (3,05)
Грунтовые воды	15	Cl = 0,53		0,64	1,12	—	—	—	—	—	—	—	—
		SO ₄ = 1,82		2,6	3,66	—	—	—	—	—	—	—	—
		Na = 0,94		1,52	1,97	—	—	—	—	—	—	—	—

Т а б л и ц а 40

Результаты предварительного прогноза солевого режима средних лёссовидных суглинков Совруиовского участка

Зона	Слой, м	Начальное засоление, г/л		Стадии орошения, концентрация С, г/л			
		С _{ток}	С _{max}	I		II	
				ток	max	ток	max

<i>Модель макродисперсии</i>							
Аэрации	0-3 (II)	Cl=4,57	5,77	0,45	0,56	3,07	3,51
		SO ₄ =7,5	27,97	0,26	0,85	8,79	13,57
		Na=3,53	7,57	0,22	0,48	2,19	3,03
Аэрации	3-7 (I)	Cl=3,84	4,83	3,69 (4,01)	4,21 (50,5)	2,38 (4,01)	1,73 (4,01)
		SO ₄ =18,93	30,21	10,8 (7,4)	16,57 (27,2)	6,53 (7,4)	10,21 (7,4)
		Na=4,93	5,50	3,03 (4,41)	4,12 (6,58)	2,05 (4,41)	2,85 (4,41)
Грунтовые воды	7	Cl=3,40		3,69	4,21	3,69	4,21
		SO ₄ =2,88		10,8	16,57	10,8	16,57
		Na=2,22		3,03	4,12	3,03	4,12

<i>Модель микродисперсии</i>							
Аэрации	0-3 (II)	Cl=4,57	5,77	4,57	5,77	3,61	4,86
		SO ₄ =7,5	27,97	7,5	27,97	10,98	30,21
		Na=3,53	7,57	3,03	6,5	3,6	5,5
Аэрации	3-7 (I)	Cl=3,84	4,83	3,6 (0,3)	4,86 (0,03)	4,08 (0,03)	5,31 (0,03)
		SO ₄ =18,94	30,21	10,96 (0,01)	30,21 (0,04)	9,23 (0,04)	29,09 (0,04)
		Na=4,93	5,50	3,58 (0,5)	5,5 (1,07)	3,39 (0,5)	6,0 (0,5)
Грунтовые воды	7	Cl=3,40		3,6	4,86	3,6	4,86
		SO ₄ =2,88		10,96	30,21	10,96	30,21
		Na=2,22		3,58	5,5	3,58	5,5

<i>Диффузионная схема</i>							
Аэрации	0-3 (II)	Cl=4,57	5,77	4,37	5,54	4,39	5,54
		SO ₄ =7,5	27,97	7,05	26,29	5,75	19,87
		Na=3,53	7,53	3,25	6,96	2,79	5,71
Аэрации	3-7 (I)	Cl=3,84	4,86	1,87 (3,48)	2,05 (4,4)	1,87 (3,48)	2,05 (4,4)
		SO ₄ =18,94	30,21	2,43 (17,46)	3,44 (27,93)	3,73 (17,46)	9,88 (27,93)
		Na=4,93	5,50	1,72 (4,09)	2,81 (2,7)	2,18 (4,09)	4,06 (2,7)
Грунтовые воды	7	Cl=3,40		1,87	2,05	1,87	2,05
		SO ₄ =2,88		2,43	3,44	2,43	3,44
		Na=2,22		1,72	2,81	1,72	2,81

вод от одной стадии орошения к другой и изменение величины минерализации поровых и поливных вод.

Прогноз изменения минерализации грунтовых вод. Профильтровавшись через зону аэрации, поливные воды заполняют слой пород в 3 м, залегающий непосредственно над грунтовыми водами, изменив в нем степень засоления пород и приобретая при этом другую минерализацию. Поливные воды, смешиваясь с грунтовыми, изменяют и их минерализацию. Оценка этих процессов составляет цель III, заключительного этапа прогноза. Перед расчетом смешения целесообразно в первом приближении оценить возможную мощность переходной зоны, т. е. глубину проникновения Δl минерализованных вод, по механизму конвективно-дисперсионного переноса за время t данной стадии орошения

$$\Delta l = \gamma_0 \sqrt{\tilde{D}t/n_e}, \quad (173)$$

где γ_0 — эмпирический коэффициент, равный соответственно 6, 4, при заданной погрешности 1,5 % в определении нулевой концентрации. Приняв соответственно: $\gamma_0 = 6,4$, $\tilde{D}_{Cl} = 1,6 \cdot 10^{-3} \text{ м}^2/\text{сут}$, $n_{e_{Cl}} = 0,3$; $\tilde{D}_{Na} = 2,4 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{сут}$, $n_{e_{Na}} = 0,63$; получим $\Delta l_1 = 2,3$ м и $\Delta l_2 = 3,2$ м.

Следовательно, можно считать, что поливные воды, заключенные в слое 3 м, будут смешиваться в равных объемах с грунтовыми водами и при расчете будет вычисляться среднее значение минерализации для слоя мощностью 6 м. В такой последовательности расчет изменения засоления пород зоны аэрации и изменения минерализации грунтовых вод повторяется для каждой стадии орошения, вплоть до достижения грунтовыми водами критической глубины залегания 3 м. На этом процесс смешения не завершается, происходит дальнейшее взаимодействие породы с водой, направленное на выравнивание концентраций в водонасыщенных породах, сохранивших остаточное засоление от предыдущих расчетных стадий. Стадийное изменение минерализации грунтовых вод и остаточного засоления водонасыщенных пород можно также увидеть в табл. 37—40.

Прогноз изменения гидрохимической обстановки на последней стадии орошения (после достижения грунтовыми водами h_k и затем $h_{ст}$) отличается от предыдущих, при которых в зоне аэрации существовал промывной режим, связанный с преобладающим нисходящим потоком влаги. При достижении грунтовыми водами глубины 3 м и начинает сказываться испарение с их поверхности, иногда возникает восходящий поток влаги, режим влажности переходит в периодически выпотной или периодически промывной. При стабилизации водного режима (при глубине стабилизации $h_{ст}$) испарение с поверхности грунтовых вод в летний период преобладает над нисходящим потоком влаги и режим влажности становится выпотным. В связи

с этим при подъеме уровня от h_k до $h_{ст}$ в условиях периодически промывного режима влажности, когда испарение (восходящий поток) компенсируется нисходящим потоком (оросительные воды), значительных изменений в солевом составе пород зоны аэрации и грунтовых водах не произойдет. Следовательно, прогноз изменения солевого режима в интервале этих глубин можно опустить. После стабилизации водного режима при глубине залегания грунтовых вод, равной глубине стабилизации, будут наблюдаться лишь сезонные колебания уровня. Грунтовые воды с повышенной минерализацией в летний период станут источником вторичного засоления пород зоны аэрации.

Рассмотрим прогноз вторичного засоления и изменения минерализации грунтовых вод. Примем интенсивность восходящего потока влаги по данным наблюдений на Зеленокумском оросительном участке [22] равной 0,0009 м/сут, а его длительность — двум летним месяцам. Тогда среднесуточная годовая интенсивность восходящего расхода влаги составит 0,00016 м/сут. Зная среднее засоление пород в слое ($O-h_{ст}$), сформировавшееся к началу последней стадии орошения, минерализацию грунтовых вод, которая в расчетном уравнении является граничным условием, определим прогнозную концентрацию порового раствора пород зоны аэрации от привноса солей из грунтовых вод. Затем установим прогнозную концентрацию этого раствора от привноса солей с оросительными водами. При поливной норме (по данным Севкавказпроводхоза) 3500 м³/год на 1 га на площадь в 1 м² придется 0,35 м³/год. Принимая длительность орошения равной 6 мес, легко рассчитать объем поливных вод, которые, испаряясь, будут оставлять соли в породах зоны аэрации в количестве $0,35 \times 180/365 = 0,17$ м³/год ≈ 170 л/год. Зная минерализацию и химический состав поливных вод (см. табл. 37—40), можно рассчитать количество P ионов солей, поступающих в поровый раствор пород зоны аэрации за год: $P_{Cl} = 170 \text{ л} \cdot 0,06 \text{ г/л} = 10,26 \text{ г}$; $P_{SO_4} = 170 \text{ л} \cdot 0,13 \text{ г/л} = 22,2 \text{ г}$; то же для $P_{Na} = 22,2 \text{ г}$. Это количество солей содержится в объеме, равном $V = 1 \cdot h_{ст} \cdot n_e = 1 \cdot 1,8 \cdot 0,26 = 0,468 \text{ м}^3$. Тогда прирост солей в поровом растворе в породах зоны аэрации за счет оросительных вод составит

$$C_{n_{Cl}} = \frac{10,26}{468} = 0,021 \text{ г/л}; \quad C_{n_{SO_4}} = 0,048 \text{ г/л}; \quad C_{n_{Na}} = 0,048 \text{ г/л}.$$

Прогнозная величина вторичного засоления определяется суммированием прогнозных концентраций от привноса солей из грунтовых и оросительных вод. По разности между начальным засолением пород (к началу последней стадии орошения) и прогнозным его значением, сформированным только путем привноса солей из грунтовых вод, определяется степень изменения минерализации грунтовых вод, а затем их прогнозный ионный состав. Результаты предварительного прогноза приведены в табл. 37—40.

ОЦЕНКА РЕЗУЛЬТАТОВ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОГО ПРОГНОЗА ИЗМЕНЕНИЯ ГИДРОГЕОХИМИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ

Итоги гидрогеохимического прогноза рассмотрим в соответствии с использованными моделями массопереноса. На модели макродисперсии при гетерогенно-блоковом строении среды можно наблюдать, что в начале орошения в верхнем слое зоны аэрации (0—3 м) при значительном нисходящем потоке влаги происходит рассоление пород зоны аэрации по ионам Cl и SO_4 , по иону Na процесс не завершается (Елизаветинский участок). В нижележащих слоях идет менее интенсивное рассоление пород с нисходящим вымыванием солей. На последующих этапах орошения наблюдается дальнейшее рассоление пород зоны аэрации и некоторое опреснение верхнего слоя грунтовых вод за счет смешения с менее минерализованными поливными водами. На последней стадии орошения уже в первый год после стабилизации водного режима начинается вторичное засоление пород зоны аэрации, которое в последующие годы будет увеличиваться при поступлении солей из грунтовых вод (из нижележащих слоев), а также при поступлении в грунтовые воды остаточных солей из водонасыщенных пород и, кроме того, с привносом солей в зону аэрации из поливных вод. Если не учитывать смешение грунтовых вод с поливными, то процесс вторичного засоления будет более интенсивным. В работах С. Ф. Аверьянова, В. А. Ковды этот процесс смешения не рассматривался. На наш взгляд, его следует учитывать в прогнозных расчетах, а предложенная выше методика составления прогноза раскрывает механизм этого учета.

Изменения гидрохимической обстановки по модели микродисперсии с учетом микронеоднородности аналогичны описаным, кроме изменений в верхнем слое 0—3 м. Здесь почти за весь рассматриваемый срок орошения (с I по IV стадию) существенных количественных изменений в ионном составе солей не происходит. На последней стадии орошения сначала наблюдается уменьшение засоления, связанное с подтягиванием в этот слой опресненных грунтовых вод, а затем начинается вторичное засоление пород под влиянием в значительной степени поступления солей из грунтовых вод. Прогноз по диффузионной схеме показал медленное рассоление пород зоны аэрации в процессе орошения и подъема уровня грунтовых вод. Однако на последнем этапе при подъеме уровня до $h_{\text{ст}}$ также начинается вторичное засоление пород зоны аэрации при значительных концентрациях солей в грунтовых водах, идет вовлечение в солеобмен нижележащих слоев грунтовых вод, имеющих более высокую минерализацию и значительное остаточное засоление водонасыщенных пород.

Рассмотрим мелиоративный эффект прогнозных расчетов по различным моделям массопереноса: грунтовые воды являются источником вторичного засоления пород зоны аэрации до тех

пор, пока привнос солей из грунтовых вод в зону аэрации не уравнивается с привносом солей из поливных вод. Стабилизация гидрохимического режима наступает позднее, чем стабилизация водного режима. Процесс вымывания из пород зоны аэрации таких токсичных ионов, как Cl и SO_4 , более интенсивен, чем процесс вымывания иона Na . Это свидетельствует об угрозе возникновения содового засоления пород зоны аэрации на фоне практически незасоленных пород этой зоны.

Сравнение результатов предварительного прогноза солевого режима по трем моделям позволяет считать менее реальны результаты модели микродисперсии, согласно которым в процессе всего периода орошения в верхней части зоны аэрации не происходит изменения степени засоления пород указанной зоны. Более реальны, очевидно, результаты модели макродисперсии и диффузионной схемы (в модели микродисперсии). В процессе орошения наблюдается уменьшение скоростей инфильтрации за счет кольматажа и изменение структуры порового пространства, существуют значительные градиенты концентраций солей в промывных, грунтовых водах и породах зоны аэрации. Эти условия способствуют увеличению роли процессов молекулярной диффузии. Реальные изменения значений солевого режима, по-видимому, находятся между результатами этих двух моделей. Полученный прогноз подтверждает опыт орошения в Восточном Предкавказье. Данные Севкавказпроводхоза показывают, что в первые годы орошения в верхней части зоны аэрации значительных изменений в составе солей не происходит, а наблюдается лишь их перераспределение и только в дальнейшем появляются значительные изменения в солевом режиме пород данной зоны и минерализации грунтовых вод.

Выполненный расчет прогноза подтверждает активную роль грунтовых вод (при достижении ими критической глубины залегания) в формировании вторичного засоления пород зоны аэрации. Не менее важна в этот период и роль поливных вод, которые могут способствовать увеличению интенсивности вторичного засоления. Увеличение количества натрия и магния в почвах приводят к увеличению подвижности почвенных коллоидов, что делает почвы бесструктурными и вязкими во влажном состоянии, увеличивает их плотность, цементацию. Все это оказывает пагубное влияние на корневую систему растений. Накопление гипса в почвенных горизонтах ухудшает процесс проникновения влаги в почву и породы.

Прогнозные значения минерализации грунтовых вод определялись по трем расчетным ионам — Cl , SO_4 и Na . Минерализация верхнего слоя грунтовых вод, рассчитанная по максимальным концентрациям солей в легких суглинках Елизаветинского участка, меньше минерализации исходных грунтовых вод. Однако грунтовые воды нижезалегающих слоев имеют повышенную минерализацию, превышающую исходную по ионам SO_4 и Na , а водовмещающие породы характеризуются достаточно

большим остаточным засолением, увеличивающимся сверху вниз, которое по мере опреснения грунтовых вод в процессе испарения будет являться источником солей, поступающих в грунтовые воды при выравнивании концентраций в системе порода — вода. Расчетные значения минерализации верхнего слоя грунтовых вод по модели микродисперсии превышают исходные ее значения, а водоносные породы имеют остаточное засоление, в 3—5 раз превышающее исходную минерализацию вод. Аналогичная картина получена при расчетах по диффузионной схеме. Грунтовые воды, заключенные в средних лёссовидных суглинках Совруновского участка, характеризуются увеличенными значениями минерализации в верхней части водоносного горизонта по сравнению с исходными значениями и остаточным засолением водовмещающих пород, что отмечается во всех вариантах. При этом концентрация иона SO_4 возрастает в 3 раза по модели макродисперсии и диффузионной схеме и в 10 раз — по модели микродисперсии. Это говорит о том, что при небольших глубинах залегания грунтовых вод процесс вторичного засоления пород протекает более интенсивно. В данной главе приведен пример прогноза солевого режима аналитическим методом. Для большей точности прогнозных значений расчеты следует проводить на каждый год орошения в пределах выбранных расчетных слоев.

Прогнозные приближенные значения степени засоления пород зоны аэрации и минерализации грунтовых вод могут быть использованы при планировании видов и объемов гидрогеологических исследований на детальных стадиях изысканий для водоснабжения и орошения территории.

1. Гидрогеохимические прогнозы на орошаемых территориях должны использоваться для решения трех проблем: мелиоративной, охранной и экологической. С этой целью они, как и весь гидрогеологический прогноз, заранее планируются в программе изысканий, а методика их проведения, исходная информация, необходимая для их составления и принятые модели изучаемого процесса уточняются от стадии к стадии на основе использования разведочного (имитационного) моделирования. Гидрогеохимические прогнозы должны быть непрерывными, целостными, хорошо адаптироваться, иметь обратную связь, быть оптимальными.

2. Опыт составления для территории Восточного Предкавказья предварительных гидрогеохимических прогнозов подтверждает целесообразность использования разведочного моделирования для оценки возникающих тенденций в изменении гидрогеолого-мелиоративной обстановки и качества грунтовых вод под влиянием орошения. Это важно знать при перспективном планировании рационального использования водных и земельных ресурсов изучаемого региона и проведении изысканий. При гидрогеологическом прогнозировании схематизация природных условий должна включать литолого-структурные (геофильтра-

ционные) и гидрогеохимические особенности обстановки, в которой протекают физико-химические процессы, а также характер влагообмена в зоне аэрации.

3. Для территории Восточного Предкавказья, сложенной лёссовыми породами, разработана методика схематизации для гидрохимического прогнозирования и выявлены основные математические модели солепереноса, учитывающие макро- и микронеоднородность лёссовидных пород. Это модели макро- и микродисперсии. Для каждой модели по результатам полевых и лабораторных исследований, проведенных на специально оборудованных площадках в Восточном Предкавказье, определены параметры солепереноса (эффективная пористость, коэффициенты массообмена и микродисперсии). Статистически установлена их зависимость от скорости фильтрации. Эти параметры использованы с целью прогноза изменения гидрогеохимической обстановки в зоне аэрации и грунтовых водах под влиянием орошения.

4. Прогноз показал, что при подъеме уровня грунтовых вод с глубин 10 м и более формируется толща остаточного засоления в водонасыщенных породах, которые вместе с заключенными в них минерализованными водами активно участвуют во вторичном засолении пород зоны аэрации и не менее активно влияют на изменение качества грунтовых вод орошаемой территории, что важно при планировании охранных мероприятий.

Часть II. РАЦИОНАЛЬНОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОДЗЕМНЫХ ВОД КАК МЕТОД ОХРАНЫ ИХ ОТ ИСТОЩЕНИЯ

Глава 7

ВОСПОЛНЕНИЕ ЗАПАСОВ ПОДЗЕМНЫХ ВОД С УЧЕТОМ ПОСТЕПЕННОГО ЗАИЛЕНИЯ ИНФИЛЬТРАЦИОННЫХ СООРУЖЕНИЙ

Искусственное восполнение запасов подземных вод как метод борьбы с истощением водоносных горизонтов применяется давно в гидрогеологической и водохозяйственной практике. Ему посвящено большое число теоретических и натурных исследований; опубликованы многочисленные научные работы монографического характера [19, 29 и 37 и др.] и тематических сборников [12 и др.]. На основании проведенных исследований сделаем следующие выводы.

1. Одной из основных специфических проблем искусственного восполнения запасов является постепенное заиливание инфильтрационных сооружений (бассейнов, каналов, поглощающих колодцев и др.). Оно вызывает уменьшение отдачи сооружений и приводит к необходимости периодической их остановки (выключения) с целью очистки.

2. Инфильтрационные бассейны и каналы эксплуатируются преимущественно в условиях «отрыва уровней», т. е. в условиях свободной инфильтрации обычно при неполном насыщении грунта под дном сооружения. Такой режим наиболее рационален с точки зрения качества поступающей в водоносный горизонт воды.

3. В большинстве существующих книг рассматриваются особенности режима работы самих сооружений — длительность отдельных этапов фильтроцикла, изменение отдачи бассейнов и уровня в них и т. д. Гораздо меньшее число исследований посвящено изменению уровней подземных вод под действием инфильтрационных сооружений, особенно в условиях переменной отдачи, вызванной постепенным заиливанием дна сооружений.

Ниже даются результаты анализа теоретических и натурных исследований, опубликованных в книгах, а также делается попытка обобщить полученные данные об изменении отдачи инфильтрационных сооружений под влиянием заиливания. Приводятся новые решения, описывающие изменение уровня подземных вод в условиях постепенного уменьшения дебита инфильтрационных сооружений, и выявляется возможность их применения для прогнозирования процесса искусственного восполнения запасов подземных вод в более сложных условиях.

ИЗМЕНЕНИЕ ОТДАЧИ ИНФИЛЬТРАЦИОННЫХ СООРУЖЕНИЙ ПРИ ИХ ЭКСПЛУАТАЦИИ

Многочисленные исследования показывают, что в пределах одного фильтроцикла можно выделить несколько этапов работы инфильтрационного сооружения (рис. 67, а). Первый и обычно самый короткий этап отвечает затоплению дна бассейна тонким слоем воды. Второй охватывает время заполнения бассейна до проектной глубины и характеризуется постепенным увеличением слоя воды H . При этом расход сооружения остается более или менее постоянным: $Q_0 = \text{const}$. Третий является основным этапом фильтроцикла, отвечает эксплуатации сооружения при постоянном уровне воды в нем ($H_0 = \text{const}$) и характеризуется непрерывным уменьшением отдачи из-за постепенного заиливания дна. Четвертый этап соответствует опорожнению бассейна (сработке уровня в нем), а пятый — очистке дна сооружения и подготовке к следующему циклу.

Поскольку первый и четвертый этапы обычно значительно короче, чем второй и третий, то иногда работа инфильтрационных сооружений рассматривается по упрощенной схеме (рис. 67, б). Во всех случаях самым длинным и главным этапом фильтроцикла является этап постепенного уменьшения расхода при постоянном уровне воды в бассейне.

Анализ теоретических формул, а также и данных натурных наблюдений на действующих инфильтрационных сооружениях позволяет предложить следующую простую зависимость уменьшения отдачи сооружения при постоянном в нем уровне:

$$Q = Q_0 / \sqrt{1 + \varphi t}, \quad (174)$$

где Q_0 — постоянный расход сооружения в период накопления t_0 ; t — время от начала периода уменьшения дебита t_y (см. рис. 67, б); φ — комплексный параметр, характеризующий интенсивность постепенного заиливания дна, имеющий размерность $[t^{-1}]$.

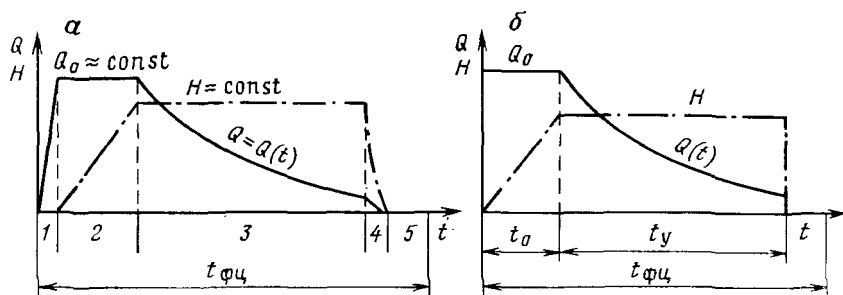


Рис. 67. Режим работы инфильтрационных сооружений в течение фильтроцикла

Схемы: а — полная; б — упрощенная

Поскольку рабочая площадь сооружения F постоянна, то зависимостью (174) можно выразить не только суммарный дебит Q , но также и удельный дебит q ($q=Q/l$; l — длина сооружения) и скорость инфильтрации v ($v=Q/F=q/b$; b — ширина сооружения). Соответственно будем иметь

$$q = q_0 / \sqrt{1 + \varphi t}; \quad v = v_0 / \sqrt{1 + \varphi t}, \quad (175)$$

где q_0 и v_0 — начальные удельные дебит и скорость инфильтрации (постоянная во время наполнения). Все наиболее широко используемые в настоящее время при расчете инфильтрационных установок формулы сводятся к зависимости (174) следующими подстановками (при условии, что $v_0 = k_0 \cdot H_0 / m_0$):

в формулу Т. В. Руденко из работы 1966 г

$$\varphi = 2Mk_0H_0/\gamma m_0^2; \quad (176)$$

в формулу В. С. Усенко, А. Х. Альтшуля, М. О. Чабана из работы 1976 г.

$$\varphi = 2Mk_0H_0(1 + \epsilon_0 - a_0H_0)/\gamma m_0^2; \quad (177)$$

в формулу Д. Тошева из работы 1980 г.

$$\varphi = 2Mk_0(H_0 + h_v)/\gamma m_0^2. \quad (178)$$

В формулах (176—178) M — мутность подаваемой в бассейн воды; H_0 — постоянная высота слоя воды в бассейне; h_v — высота вакуума под дном бассейна; γ , m_0 , k_0 , ϵ_0 , a_0 — соответственно плотность, мощность, коэффициент фильтрации, коэффициенты пористости и сжатия илистой пленки, сформировавшейся на дне бассейна.

Соответствие формулы (174) натурным условиям можно проиллюстрировать приводимыми в литературе [19, 12 и др.] данными об изменении отдачи действующими инфильтрационными сооружениями. Отметим, что формулой (174) выражается линейная зависимость между величиной $(Q_0/Q)^2$ и временем t . На рис. 68 приведен график уменьшения расхода различных инфильтрационных бассейнов и каналов в системе координат $(Q_0/Q)^2$ от t . Видна хорошая сходимость результатов натурных наблюдений с теоретической зависимостью, представленной обобщенной формулой (174). Наклон полученной прямой отвечает коэффициенту заиливания φ . Как видно из рис. 68, значения этого параметра изменяются в довольно широких пределах, но обычно $\varphi < 1$ 1/сут⁻¹. Самые низкие значения $\varphi = 0,008$ 1/сут (см. рис. 68,5) и $\varphi = 0,041$ 1/сут (см. рис. 68,4) получены для инфильтрационных сооружений, подпитываемых относительно чистыми водами. В первом случае из водохранилища, во втором — из озера со средней мутностью воды 2,5 мг/л [19].

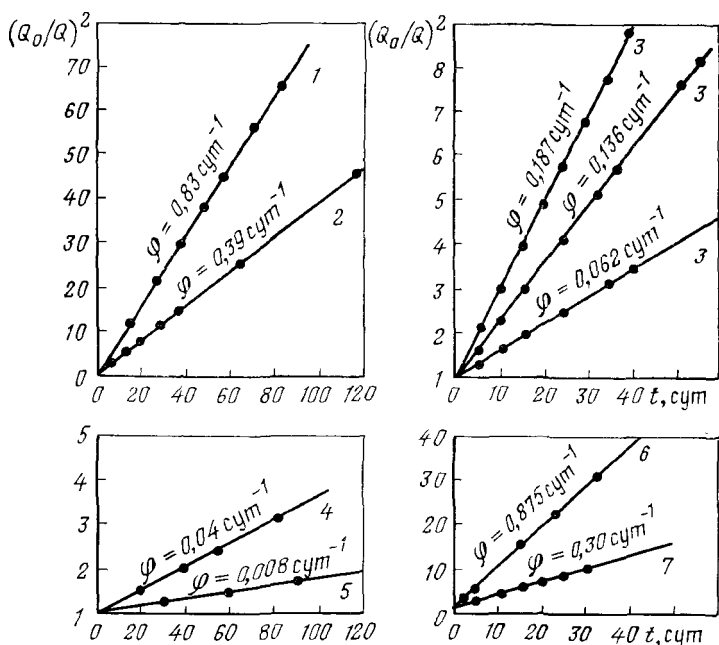


Рис. 68. Определение параметра заиления:

1 — Эссен (ФРГ); 2 — Стенной Зай (СССР); 3 — Мендота (для трех различных участков) (США); 4 — Рига (СССР); 5 — Плевен (НРБ); 6 — Магала (СССР); 7 — Туансе (СССР)

Следует подчеркнуть, что введение комплексного параметра φ , характеризующего интенсивность постепенного заиления инфильтрационных сооружений, приносит практическую пользу. Он определяется довольно просто на основе наблюдений об изменении отдачи путем обработки данных в системе координат $(Q_0/Q)^2 \div t$ или $(v_0/v) \div t$. Отметим также, что некоторые показатели, входящие в формулы при определении φ , и особенно параметры илстой пленки (k_0 , m_0 , φ , ϵ_0 , a) устанавливаются на практике весьма трудно и их прямое участие в расчетных формулах вызывает определенные сложности.

Анализ опытных данных, приводимых в некоторых работах, позволяет утверждать, что зависимостью типа (174) описывается также уменьшение дебита поглощающих колодцев. Однако значения параметра заиления более высокие (часто $\varphi > 1, 1/\text{сут}$), поскольку кольматаж поглощающих скважин происходит довольно быстро.

Значения параметра заиления, полученные опытным путем, могут быть использованы для: прогнозирования работы инфильтрационного сооружения на следующих фильтроциклах; проектирования других инфильтрационных сооружений, работающих в подобных эксплуатационных условиях.

При проектировании новых инфильтрационных бассейнов и каналов, приуроченных к другим источникам питания и с иным эксплуатационным напором, можно пользоваться также значениями параметра φ , полученными на действующих сооружениях, откорректировав их (в первом приближении) относительно мутности воды и действующего напора,

$$\varphi_H \approx \varphi_D M_H \cdot H_{0H} / M_D H_{0D}, \quad (179)$$

где φ_D — значение по данным действующего сооружения; H_{0D} и H_{0H} — напоры в действующем и новом бассейнах; M_D и M_H — мутность подаваемой воды соответственно на действующем и новом инфильтрационном сооружении.

Длительность периода уменьшения отдачи t_y (см. рис. 67, б) можно рассчитать по формуле

$$t_y = \frac{1}{\varphi} (v_0^2 / v_{\min}^2 - 1), \quad (180)$$

где v_{\min} — минимальная допустимая скорость инфильтрации; v_0 — скорость инфильтрации в период наполнения.

Для инфильтрационных бассейнов и каналов, работающих в песчаных пластах с коэффициентом фильтрации $10 \div 80$ м/сут, максимальную скорость инфильтрации v_0 рекомендуется [19] принимать равной $5 \div 6$ м/сут. В мелкозернистых песках, супесях и лёссовидных породах v_0 можно принимать равной $1 \div 3$ м/сут. Конкретные значения v_0 могут быть уточнены по данным эксплуатации. Скорость инфильтрации v_{\min} следует задавать в зависимости от требуемого среднего расхода инфильтрационного сооружения. Отметим, что существуют также рекомендации, в соответствии с которыми следует принимать $v_0 \approx 0,3 \div 0,5$ м/сут [19], а $v_{\min} \approx 0,2 \div 0,3$ м/сут [13]. Однако в ряде случаев такая скорость инфильтрации оказывается недостаточной и не может удовлетворить требуемого питания водозаборных сооружений.

Средний расход инфильтрационного бассейна в период уменьшения отдачи $H = \text{const}$ в соответствии с формулой (174) определяется по формулам

$$Q_y = \frac{V_y}{t_y}; \quad V_y = \int_0^{t_y} Q(t) dt = 2Q_0 [\sqrt{1 + \varphi t_y} - 1] / \varphi, \quad (181)$$

где V_y — объем воды, поступившей в пласт за период уменьшения отдачи.

Средний расход сооружения для всего фильтроцикла $t_{\text{фц}}$ можно установить по уравнению

$$Q_{\text{ср}} = V_{\text{фц}} / t_{\text{фц}}, \quad (182)$$

где $V_{\text{фц}}$ — общий объем воды, отданной инфильтрационным сооружением в течение всего фильтроцикла, причем $V_{\text{фц}} \approx V_0 + V_y + V_6$.

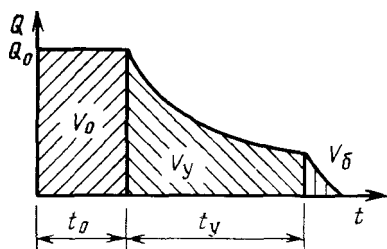


Рис. 69. Схема объемов воды, отданных в период наполнения V_0 , уменьшения расхода V_y (при $H_0 = \text{const}$) и опорожнения $V_б$ бассейна

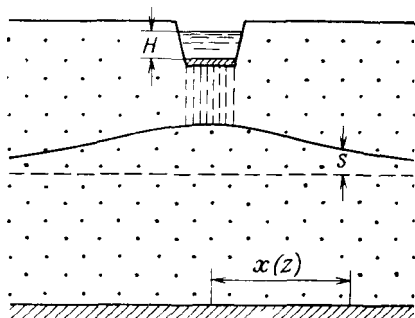


Рис. 70. Схема действия инфильтрационного канала (бассейна)

Здесь V_0 и $V_б$ — объем воды, поступившей в пласт соответственно в периоды наполнения и опорожнения бассейна (рис. 69). Следовательно, для $V_{\text{фц}}$ можно записать

$$V_{\text{фц}} \approx Q_0 t_0 + 2Q_0 [\sqrt{1 + \varphi t_y} - 1] / \varphi + H_0 F_б, \quad (183)$$

где $F_б$ — средняя площадь инфильтрационного сооружения.

Изменяя значения минимальной скорости инфильтрации v_{min} и длительности основного периода фильтроцикла t_y , применяя формулы (175) и (183), можно подобрать такую расчетную длительность фильтроцикла $t_{\text{фц}}$, при которой средний расход инфильтрационного сооружения $Q_{\text{ср}}$ соответствовал проектным требованиям.

ПОВЫШЕНИЕ УРОВНЯ ПОДЗЕМНЫХ ВОД ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИНФИЛТРАЦИОННЫХ СООРУЖЕНИЙ В УСЛОВИЯХ ПОСТЕПЕННОГО ЗАИЛЕНИЯ

Инфильтрационный канал большой длины

На схеме (рис. 70) показан неограниченный водоносный горизонт, где, начиная с момента $t=0$, действует длинный инфильтрационный канал, дебит которого изменяется по зависимости (174) или (175). Изменение уровня подземных вод $S(x, t)$ под влиянием инфильтрации воды из канала можно определить интегрированием

$$\partial S / \partial t = a \partial^2 S / \partial x^2 \quad (184)$$

при начальном условии $S(x, 0) = 0$ и граничных условиях $S(\infty, t) = 0$

$$\partial S(0, t) / \partial x = -q / 2T = -q_0 / (2T \sqrt{1 + \varphi t}). \quad (185)$$

Здесь T , a — водопроводимость и коэффициент уводнепроводности пласта; q — удельный дебит канала (на единицу длины).

Решение этой задачи получено автором [12] при помощи

интегрального преобразования Лапласа и выражается в следующем виде:

$$S = q_0 x P(u, \bar{\varphi}) / T, \quad (186)$$

где S — повышение уровня в точке на расстоянии x от оси канала в момент времени t ; q_0 — постоянный расход канала в период наполнения. Здесь

$$P(u, \bar{\varphi}) = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int_u^{\infty} (e^{-y} \times \\ \times dy) / \sqrt{1 + \bar{\varphi} \left(1 - \frac{u}{y}\right) \cdot y \sqrt{g}}, \quad (187)$$

$$u = x^2 / 4at; \quad \bar{\varphi} = \varphi t. \quad (188)$$

Безразмерная функция $P(u, \bar{\varphi})$ табулирована нами и представлена в виде графика (рис. 71). Отметим, что решение (186) справедливо при $x \gg 2b$, т. е. на некотором удалении от линии канала. При выводе формулы (186) предполагалось, что инфильтрационный канал является линейным источником и что его ширина мала по сравнению с размерами пласта.

Уравнение (186) и график (см. рис. 71) позволяют прогнозировать изменение уровня подземных вод с учетом уменьшения отдачи канала в результате постепенного заиливания. Следует сказать, что при отсутствии такого заиливания $\varphi = 0$, т. е. при $q = q_0 = \text{const}$, из уравнения (186) вытекает известное решение

$$S = q_0 \sqrt{at} / T \cdot \text{ierfc}(x/2\sqrt{at}). \quad (189)$$

Это легко доказывается, если отметить, что

$$P(u, 0) = 1/(4\sqrt{\pi}) \int_u^{\infty} e^{-y} y^{-\frac{3}{2}} dy = 1/(4\sqrt{\pi}) \cdot \Gamma(-1/2, u). \quad (190)$$

Здесь $\Gamma(-1/2, u)$ — неполная Γ -функция от $-1/2$ и u . Если принять во внимание следующие рекуррентные соотношения:

$$\Gamma(1/2, u) = -0,5\Gamma(-1/2, u) + (1/\sqrt{u})e^{-u}; \\ \Gamma(1/2, u) = \sqrt{\pi} \text{erfc}(\sqrt{u}). \quad (191)$$

Тогда из (190) и (191) непосредственно получается:

$$P(u, 0) = 1/(2\sqrt{u}) \cdot e^{-u} / \sqrt{\pi} - \sqrt{u} \text{erfc}(\sqrt{u}) = \\ = 1/(2\sqrt{u}) \text{ierfc}(\sqrt{u}). \quad (192)$$

Отсюда, с учетом (186), следует (189). Символами erfc и ierfc

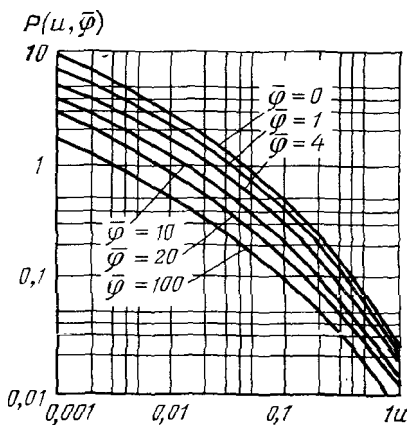


Рис. 71. График функции $P(u, \bar{\varphi})$

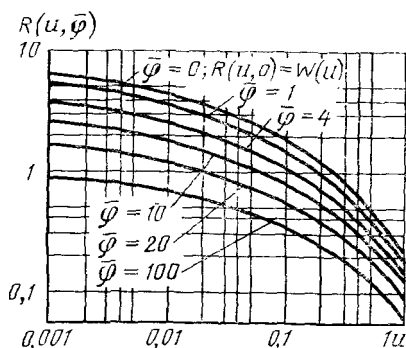


Рис. 72. График функции $R(u, \bar{\varphi})$

исследованиями показано, что бассейн прямоугольной формы приводится к эквивалентному кругу радиусом $r_0 = (l+b)/\pi$, l и b — длина и ширина бассейна. Эта замена дает достаточно точные результаты при расчетах уровней с $r > 1,5r_0$ или $r > l$ от центра бассейна, где фильтрационный поток плоскорадиальный.

Следовательно, в условиях постепенного заиления дна бассейна решение задачи сводится к интегрированию

$$\partial^2 S / \partial r^2 + 1/r \cdot \partial S / \partial r = 1/a \cdot \partial S / \partial t, \quad (193)$$

при начальном условии $S(r, 0) = 0$ и граничных условиях $S(\infty, t) = 0$

$$\partial S(r_0, t) / \partial r = -Q / (2\pi r_0 T) = -Q_0 / (2\pi r_0 T \sqrt{1 + \bar{\varphi}t}), \quad (194)$$

где Q_0 — постоянный расход бассейна во время его наполнения.

Решение этой задачи получено [12] также операционным методом на основе интегрального преобразования Лапласа и записывается в виде

$$S = Q_0 R(u, \bar{\varphi}) / 4\pi T; \quad (195)$$

при

$$R(u, \bar{\varphi}) = \int_u^\infty e^{-y} \cdot dy \sqrt{1 + \bar{\varphi}(1 - u/y) \cdot y};$$

$$u = r^2 / 4at; \quad \bar{\varphi} = \varphi t.$$

Функция $R(u, \bar{\varphi})$ табулирована автором и представлена на графике (рис. 72).

При отсутствии постепенного заиления $\varphi = 0$, т. е. при $Q = Q_0 = \text{const}$, уравнение (195) можно привести к формуле Тейса для колодца с постоянным дебитом; тогда

$$R(u, 0) = \int_u^\infty e^{-y} / y dy = -Ei(-u) = W(u).$$

обозначены, как обычно, дополнительная функция ошибок и ее первый интеграл. Таблицы для них можно найти во многих книгах.

Инфильтрационный бассейн ограниченных размеров — поглощающий колодец или шурф

Повышение уровня подземных вод под действием инфильтрационного бассейна с постоянным расходом исследовано детально [4, 29, 39]. Этими

Решение сложных комбинированных задач

Приведенные основные уравнения (186) и (195) с помощью метода суперпозиции могут быть использованы в процессе решения более сложных задач, в том числе: 1) учета периода наполнения инфильтрационных сооружений; 2) учета периодического выключения инфильтрационных сооружений для очистки; 3) расчета взаимодействующих инфильтрационных сооружений; 4) учета влияния границ водоносного горизонта; 5) расчета взаимодействия инфильтрационных сооружений с водозаборными сооружениями.

Рассмотрим уменьшение отдачи бассейна, *учитывая период его наполнения* $Q_0 = \text{const}$. Решение будет иметь вид

$$S = (Q_0/4\pi T) \cdot [W(u) - W_1(u_0) + R(u_0, \bar{\varphi}_0)], \quad (196)$$

при

$$u = r^2/4at; \quad u_0 = r^2/4a(t - t_0); \quad \bar{\varphi}_0 = \varphi(t - t_0).$$

Здесь t_0 — продолжительность периода наполнения (см. рис. 67); t — время от начала фильтроцикла при $t > t_0$.

Соответственно для длинного инфильтрационного канала будем иметь

$$S = \frac{q_0}{T} [V\bar{a}t \operatorname{ierfc}(\sqrt{V\bar{u}}) - \sqrt{a(t - t_0)} \operatorname{ierfc}(\sqrt{V\bar{u}_0}) + xP(u, \bar{\varphi}_0)]. \quad (197)$$

При $t < t_0$ — период постоянной отдачи, последние два члена в уравнениях (196) и (197) пропадают.

Изменение уровня подземных вод в *нерабочий период* — при $t > t_0 + t_y$ (если пренебречь фазой опорожнения) — определяется добавлением в формулы (196) и (197) нового члена, отражающего действие фиктивного инфильтрационного сооружения с дебитом

$$\tilde{Q} = -Q_{\min}/\sqrt{1 + \varphi t'} = Q_0/\sqrt{(1 + \varphi t_y)(1 + \varphi t')}, \quad (198)$$

где $t' = t - (t_0 + t_y)$ — время после выключения инфильтрационного сооружения.

Например, для инфильтрационного бассейна, работающего, как при решении (196), с нерабочим циклом с момента t' по (198), можно написать

$$S = (Q_0/4\pi T) [W(u) - W(u_0) + R(u_0, \bar{\varphi}_0) - R(u', \bar{\varphi}')/\sqrt{(1 + \varphi t_y)(1 + \varphi t')}] \quad (199)$$

при

$$u' = r^2/4at'; \quad \bar{\varphi}' = \varphi t',$$

где S — остаточное повышение уровня в точке на удалении r от центра бассейна в момент t от начала фильтроцикла $t > t_0 + t_y$, т. е. в момент t' от начала восстановления уровней.

Влияние прямолинейных границ водоносного горизонта учитывается методом отображений. В частности, повышение уровня, вызванное инфильтрационным бассейном, работающим вблизи реки при изменении расхода бассейна по формуле (174), будет равно

$$S = (Q_0/4\pi T)[R(u, \bar{\varphi}) - R(u', \bar{\varphi})], \quad (200)$$

при

$$u' = r'^2/4at; \quad \bar{\varphi} = \varphi t. \quad (201)$$

Здесь r и r' — расстояния от расчетной точки соответственно до центра бассейна и центра его зеркального отображения относительно границы. Функцию $R(u, \varphi)$ определяем из рис. 72.

Для инфильтрационного канала, расположенного параллельно реке, будем иметь

$$S = \frac{q_0}{T} [xP(u, \bar{\varphi}) - (2L \mp x)P(u', \bar{\varphi})], \quad (202)$$

где расстояние: L — от канала до уреза реки, x — от канала до расчетной точки (знак минус — если точка находится между каналом и рекой, плюс — если с другой стороны канала). В случае гидродинамического несовершенства вреза и заиленности русла реки вместо L следует брать расчетное расстояние $L + \Delta L$, здесь ΔL — коэффициент сопротивления русла. Функцию $P(u, \bar{\varphi})$ снимаем с графика (см. рис. 71), причем $u' = (2L \mp x)^2/4at$.

Взаимодействия инфильтрационных сооружений рассчитываются сложением повышений уровня подземных вод, вызванных действием каждого из бассейнов (каналов), т. е. $S = \sum_{i=1}^n S_i$.

Причем S_i определяется в соответствии с режимом работы сооружения, в том числе временем его пуска, длиной отдельных этапов его работы — t_0 , t_y , $t_{\text{фц}}$, а также его расходом и т. д.

РАСЧЕТ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИНФИЛЬТРАЦИОННЫХ СООРУЖЕНИЙ С ВОДОЗАБОРАМИ

Исходя из принципа суперпозиции, взаимодействие инфильтрационных сооружений с водозаборами можно выразить алгебраической суммой понижения $S_{\text{в}}$, вызванного водозаборами, и повышения уровня $S_{\text{и}}$, связанного с инфильтрационными сооружениями: $S = S_{\text{в}} - S_{\text{и}}$.

Приращение дебита водозабора в результате искусственного восполнения определяется по формуле

$$\Delta Q_{\text{в}} = Q'_{\text{в}} - Q_{\text{в}} = Q_{\text{в}} S_{\text{и}} / S_{\text{в}}, \quad (203)$$

где $Q_{\text{в}}$ и $S_{\text{в}}$ — дебит водозабора и эксплуатационное понижение в нем без искусственного питания; $Q'_{\text{в}}$ — дебит водозабора с искусственным питанием; $S_{\text{и}}$ — повышение уровня, вызванное

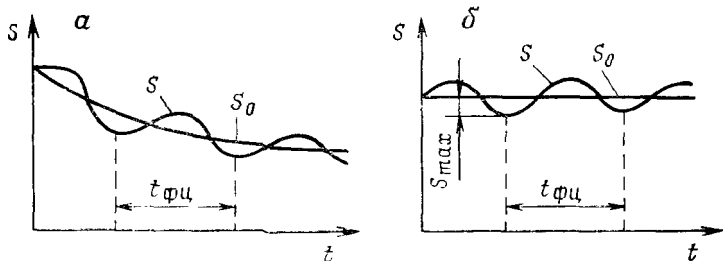


Рис. 73. Режим изменения уровня воды в водозаборе
Пласт: а — неограниченный; б — с границами постоянного напора

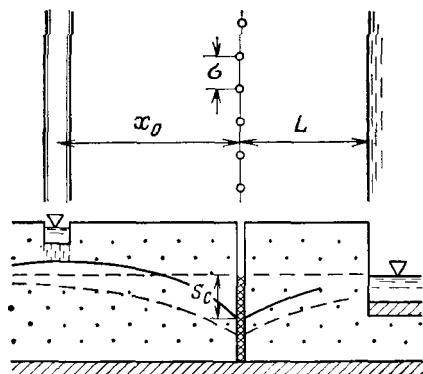


Рис. 74. Схема взаимодействия между водозаборным и инфильтрационным сооружениями

влиянием инфильтрационного сооружения в водозаборе. При расчетах возникает большое число вариантов, связанных с типом водозаборных и инфильтрационных сооружений, типом граничных условий водоносных пластов и др.

При расчете эксплуатационных понижений и дебитов водозаборов в условиях искусственного восполнения следует выделить два случая.

Первый отвечает условиям, когда расчет водозабора выполняется в пределах одного фильтроцикла, т. е. прослеживается изменение эксплуатационного понижения (или дебита) водозабора на разных этапах работы инфильтрационного сооружения. В этом случае задача решается суперпозицией и расчетная формула получается сложением соответствующих формул, с помощью которых определяется действие водозабора и инфильтрационного бассейна (канала). Такой расчет сложен, и его надо выполнять в основном с целью оценки дебита при эксплуатационных уровнях водозабора в характерные моменты времени — прежде всего в самые неблагоприятные периоды (например во время очистки бассейнов).

Второй характеризует условия, когда расчет выполняется на длительный (многолетний) срок. При этом можно оперировать уже со средним расходом и объемом воды инфильтрационных сооружений $Q_{ср}$, $V_{ср}$, устанавливаемыми по формулам (182)

и (183). Принимая, что инфильтрационные сооружения работают с постоянным (средним) расходом, мы полагаем, что при эксплуатации водозабора с постоянным дебитом $Q'_в = \text{const}$ уровень воды в нем будет колебаться около среднего (расчетного) эксплуатационного понижения S_0 с периодичностью $t_{\text{фц}}$ (рис. 73). Изменение S_0 определяется условиями на границах пласта. Например, при неограниченном в плане пласте S_0 растет (рис. 73, а), в пластах с границами постоянного напора (реки, озера и др.) S_0 становится постоянным (см. рис. 73, б) и т. д.

В качестве примера рассмотрим весьма часто встречающийся случай (рис. 74) — линейный ряд скважин параллельно реке (каждая скважина дебитом Q_c и радиусом r_c расположена на расстоянии σ друг от друга). На расстоянии x_0 от водозабора работает длинный инфильтрационный канал со средним единичным расходом $q_{\text{ср}} = Q_{\text{ср}}/l$ (l — длина канала). Река гидродинамически несовершенна ($\Delta L \neq 0$).

Среднее фактическое понижение в скважинах S_0 в соответствии с методами эквивалентных фильтрационных сопротивлений, отображений и суперпозиции будет равно

$$S_0 = (Q_c/T)[(L + \Delta L)/\sigma + 1/2\pi \ln(\sigma/2\pi r_c)] - (q_{\text{ср}}/T)(L + \Delta L). \quad (204)$$

Первое слагаемое выражает понижение, при котором могли работать скважины без искусственного питания пласта, а второе — повышение уровня под действием длительной работы канала с постоянным единичным расходом $q_{\text{ср}}$.

Предположим, если без искусственного восполнения скважины дать дебит Q_c при понижении в них S_c , то каким будет их новый дебит Q'_c при этом же самом уровне в условиях восполнения? Очевидно, Q'_c в данном случае можно определить следующим образом:

$$Q'_c = \frac{TS_c + q_{\text{ср}}(L + \Delta L)}{(L + \Delta L)/\sigma + 1/2\pi \ln(\sigma/2\pi r_c)}. \quad (205)$$

Если требуется определить максимально возможное понижение в скважинах (например к концу нерабочего периода, т. е. в момент $t = t_{\text{фц}}$ после пуска инфильтрационного канала в работу), то следует обратиться к приведенным выше формулам и применить еще раз метод суперпозиции.

Допустим, что линейный ряд скважин работает при дебите каждой скважины Q_c и среднее понижение в ней S_0 . В момент $t = 0$ включается инфильтрационный канал, режим работы которого идет по упрощенной схеме (см. рис. 67, б). В момент

$t = t_{\text{фц}}$ понижение в скважинах S_{max} выразится уравнением

$$\begin{aligned} S_{\text{max}} = & (Q_c/T) [(L + \Delta L)/\sigma + 1/2\pi \cdot \ln(\sigma/2\pi r_c)] - \\ & - (q_0/T) \{ \sqrt{at_{\text{фц}}} (\text{ierfc } \sqrt{u} - \text{ierfc } \sqrt{u^*}) - \\ & - \sqrt{a(t_{\text{фц}} - t_0)} (\text{ierfc } \sqrt{u_0} - \text{ierfc } \sqrt{u_0^*}) + \\ & + x_0 [P(u_0, \bar{\varphi}_0) - 1/\beta] P(u', \bar{\varphi}') - \\ & - (2L + 2\Delta L + x_0) [P(u_0^*, \bar{\varphi}_0) - 1/\beta] P(u'^*, \bar{\varphi}') \}, \end{aligned} \quad (206)$$

где

$$\begin{aligned} u &= \frac{x_0^2}{4at_{\text{фц}}}; & u^* &= \frac{(2L + 2\Delta L + x_0)^2}{4at_{\text{фц}}}; \\ u_0 &= \frac{x_0^2}{4a(t_{\text{фц}} - t_0)}; & u_0^* &= \frac{(2L + 2\Delta L + x_0)^2}{4a(t_{\text{фц}} - t_0)}; \\ u' &= \frac{x_0^2}{4at'}; & u'^* &= \frac{(2L + 2\Delta L + x_0)^2}{4at'}; \\ t' &= t_{\text{фц}} - (t_0 + t_y); & \bar{\varphi}_0 &= \varphi(t_{\text{фц}} - t_0); \\ \bar{\varphi}' &= \varphi t'; & \beta &= \sqrt{(1 + \varphi t_y)(1 + \varphi t')}; \end{aligned}$$

q_0 — постоянный единичный расход канала в период его наполнения.

Видно, что такой расчет (206) более трудоемок по сравнению с расчетом среднего эксплуатационного понижения в водозаборе по формуле (204). Однако необходимо его выполнить с целью проверки максимального понижения в водозаборных сооружениях.

Напомним, что приведенные формулы справедливы для водоносных пластов с постоянной водопроницаемостью T . В безнапорных пластах это условие соблюдается практически для небольших изменений уровней и, в частности, при $S_0 \leq (0,15 - 0,2)h_e$. Здесь h_e — начальная (естественная) мощность водоносного пласта. В противном случае следует преобразовать расчетные формулы, пользуясь соотношением

$$T = k(h_e - S_0/2). \quad (207)$$

Например, формула (204) запишется в виде

$$S_0 = h_e - \sqrt{h_e^2 - (2Q_c/k)[(L + \Delta L)/\sigma + 1/2\pi \ln(\sigma/2\pi r_c)] + (2q_{\text{cp}}/k)(L + \Delta L)}. \quad (208)$$

Подобным образом преобразуется и формула (206).

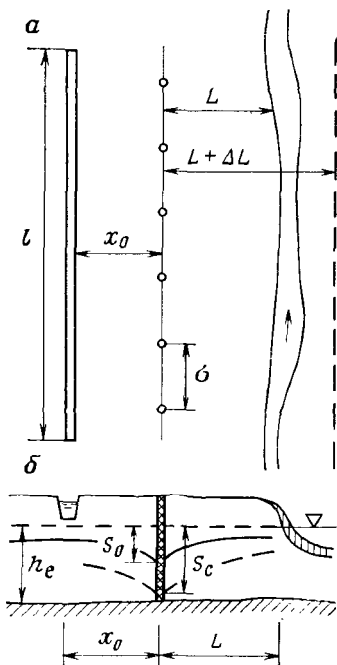


Рис. 75. Схемы к примеру расчета проектируемого линейного водозабора: в плане (а) и разрезе (б)

Рассмотрим пример расчета проектируемого линейного водозабора из 6 скважин с общим дебитом 60 л/с и 10 л/с для каждой скважины ($Q_c = 864 \text{ м}^3/\text{сут}$). Аллювиальный водоносный горизонт сложен крупнозернистыми гравелистыми песками; мощность его h_e в среднем 10 м. Гидрогеологические параметры: $k=60 \text{ м/сут}$; $T=600 \text{ м}^2/\text{сут}$; $a=6000 \text{ м}^2/\text{сут}$; $\Delta L=80 \text{ м}$. Водозабор располагается параллельно реке на расстоянии $L=120 \text{ м}$ от ее уреза (рис. 75). Расстояние между скважинами $\sigma=75 \text{ м}$; радиус скважин $r_c=0,15 \text{ м}$. Требуется проверить возможность получения искового дебита 60 л/с при данном расположении скважин без искусственного восполнения и оценить условия работы инфильтрационного канала. Эксплуатационное понижение S_c в скважинах определится по формуле (208) при $q_{cp}=0$, т. е.

$$S_c = 10 - \sqrt{100 - 2 \cdot 864 / 60 [(120 + + 80) / 75 + 0,366 \ln 75 / 6,28 \cdot 0,15]} = 8,27 \text{ м.}$$

Полученное понижение очень велико и свидетельствует о невозможности получения такого дебита. В связи с этим проектируется инфильтрационный канал, параллельный водозабору (см. рис. 75), на расстоянии $x_0=100 \text{ м}$. Длина канала $l=450 \text{ м}$; ширина $b=3 \text{ м}$; глубина слоя воды в нем $H_0=2 \text{ м}$. Коэффициент постеленного заиления $\varphi=0,1 \text{ сут}^{-1}$. Максимальная и минимальная скорости инфильтрации приняты равными $v_{\max}=1 \text{ м/сут}$, $v_0=5 \text{ м/сут}$. Время наполнения канала $t_0=3 \text{ мес}=90 \text{ сут}$.

Определим длительность фильтроцикла $t_{\text{фц}}$. Длительность периода работы канала при постоянном уровне в нем рассчитаем по формуле (180):

$$t_{\text{фц}} = (1/0,1) (5^2/1^2 - 1) = 240 \text{ сут} \approx 8 \text{ мес.}$$

Длительность периода очистки канала принимаем $t'=35 \text{ сут} \approx 1 \text{ мес}$. Общая длительность фильтроцикла получается $t_{\text{фц}} = t_0 + t_y + t' = 12 \text{ мес} = 1 \text{ год}$.

Далее установим средний расход канала (Q_{cp} , q_{cp}), для чего определим постоянный единичный расход в период наполнения $q_0 = v_0 b = 15 \text{ м}^3/\text{сут}$. Общий расход $Q_0 = q_0 l = 6750 \text{ м}^3/\text{сут}$.

Объем воды, инфилирующей за время фильтроцикла, рассчитаем по формуле (183):

$$\begin{aligned} V_{\text{фц}} &= 6750 \cdot 90 + 2 \cdot 6750 / 0,1 [\sqrt{1 + 0,1 \cdot 240} - 1] + 2 \cdot 3 \cdot 450 = \\ &= 607\,500 + 540\,000 + 2700 = 1,15 \cdot 10^6 \text{ м}^3. \end{aligned}$$

Объем воды в канале V_6 , как видно, незначителен по сравнению с объемами V_0 и V_y для основных периодов работы канала.

Средний расход канала будет равен

$$Q_{\text{ср}} = V_{\text{фц}}/t_{\text{фц}} = 1,15 \cdot 10^6 / 365 = 3150 \text{ м}^3/\text{сут},$$

а средний единичный его расход $q_{\text{ср}} = Q_{\text{ср}}/l = 3150/450 = 7 \text{ м}^2/\text{сут}$. Затем надо определять среднее эксплуатационное понижение S_0 в условиях восполнения запасов по формуле (208)

$$S_0 = 10 - \sqrt{100 - 97 + 2 \cdot 7/60 (120 + 80)} = 2,95 \text{ м}.$$

Эффект искусственного восполнения очевиден. Эксплуатационное понижение уменьшается с 8,27 до 2,95 м. Следовательно, требуемый дебит водозабора 60 л/с обеспечивается.

Теперь подсчитаем максимальное понижение S_{max} в конце нерабочего периода канала по формуле (205) с учетом (206), т. е. при $T \approx 60(10 - 3/2) = 510 \text{ м}^2/\text{сут}$.

При расчете использованы таблицы функции ierfc и графики функции $P(u, \varphi)$ (см. рис. 72). Исходными значениями для расчета, за исключением уже отмеченных, являются $u = 0,00114$; $u^* = 0,0286$; $u_0 = 0,0015$; $u_0^* = 0,038$; $u' = 0,0119$; $u'^* = 0,298$; $\varphi_0' = 27,5$; $\varphi' = 3,50$; $\beta = 10,6$.

При этом S_{max} получается

$$S_{\text{max}} = 864 \cdot 3,37/510 - 15 \cdot 56/510 = 4,06 \text{ м}.$$

Расчет показывает, что в условиях искусственного восполнения среднее эксплуатационное понижение в скважинах будет около 3 м, а максимальное (в периоды чистки канала) — около 4 м. Эти расчеты вполне удовлетворительны. Они обеспечивают необходимую водопропускную способность рабочей части скважин и позволяют при необходимости несколько увеличить дебит водозабора.

Глава 8

ОПТИМИЗАЦИЯ ЭКСПЛУАТАЦИИ МЕСТОРОЖДЕНИЯ ПОДЗЕМНЫХ ВОД НА ОСНОВЕ АСУ-ВОДОЗАБОР В СЛОЖНЫХ ГИДРОГЕОЛОГИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ

ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ И УПРАВЛЕНИЯ ПРИ РАЗРАБОТКЕ МЕСТОРОЖДЕНИЙ ПОДЗЕМНЫХ ВОД

Одна из крупных научных проблем — оптимальное распределение и использование водных ресурсов. Это сложная по содержанию, трудная для теоретического решения и вместе с тем очень важная по практическому значению проблема. Ее составляющей является рациональное использование существующих запасов подземных вод. Здесь связываются воедино экономика, геология, гидрогеология, субъективные оценки природной обстановки, использование сравнительно-геологических методов при проведении гидрогеологического анализа, современных средств проведения изысканий и обработки исходных данных, применение математических методов при выполнении расчетов, по ре-

зультатам которых принимаются оптимальные решения и инженерные рекомендации.

Наиболее актуальными являются вопросы рационального использования подземных вод в регионах с ограниченными запасами. Это особенно относится к аридным районам, где пресные подземные воды практически отсутствуют, а в хозяйственно-бытовом водоснабжении используются слабоминерализованные подземные воды.

Под оптимизацией эксплуатации месторождений подземных вод понимаем выбор на основе некоторых критериев (в том числе и экономических) таких оптимальных вариантов размещения и режима работы водозабора (ОРВ) (водозаборов), при которых достигается поставленная цель рационального водоотбора и устанавливается заданная гидрогеологическая и экологическая обстановка. В этом случае постановка общей задачи включает две самостоятельные, но взаимосвязанные задачи: 1) нахождение рациональных условий работы эксплуатационных скважин (рис. 76, I, Ia, Ib), определение схем размещения наблюдательных точек и ведения наблюдений (см. рис. 76, A). Так решается проблема рационального использования подземных вод. Задачи рациональной эксплуатации месторождения подземных вод ставятся в той последовательности, которая дана на рис. 76. Задачи для стадий детальной (Б) и эксплуатационной (II) разведок решаются несколько различно в силу того, что для первой обычно местоположение водозаборных скважин не фиксировано (проектируемые), для второй — фиксировано (действующие).

Для нефиксированных водозаборов задача выбора рациональной схемы эксплуатации месторождения подземных вод (МПВ) сводится к следующему (см. рис. 76, I): 1) задан проектный расход воды $Q_{пр}$, необходимо найти такую схему разработки месторождения (схему размещения и режим работы водозаборов), чтобы приведенные народнохозяйственные затраты ПЗ были минимальными; 2) задан предельный уровень капитальных и эксплуатационных затрат, требуется найти такую схему разработки месторождения подземных вод, которая дает максимальную величину суммарного водоотбора.

В качестве основных критериев оптимальности берутся технико-экономические показатели, когда решается задача на стадии проектирования водозаборов. На стадии детальной разведки гидрогеологи пока еще слабо используют экономические критерии (даже в укрупненных показателях). Многофакторность условий водоотбора требует всестороннего учета и оценки отбора воды, что невыполнимо без применения оптимизационных методов. Более того, в общем случае задача выбора оптимального варианта эксплуатации МПВ в настоящее время должна включать критерии, учитывающие биологические качества подземной воды и оценивающие возможные пределы изменения ее санитарно-гигиенических свойств, а также изменение эколо-

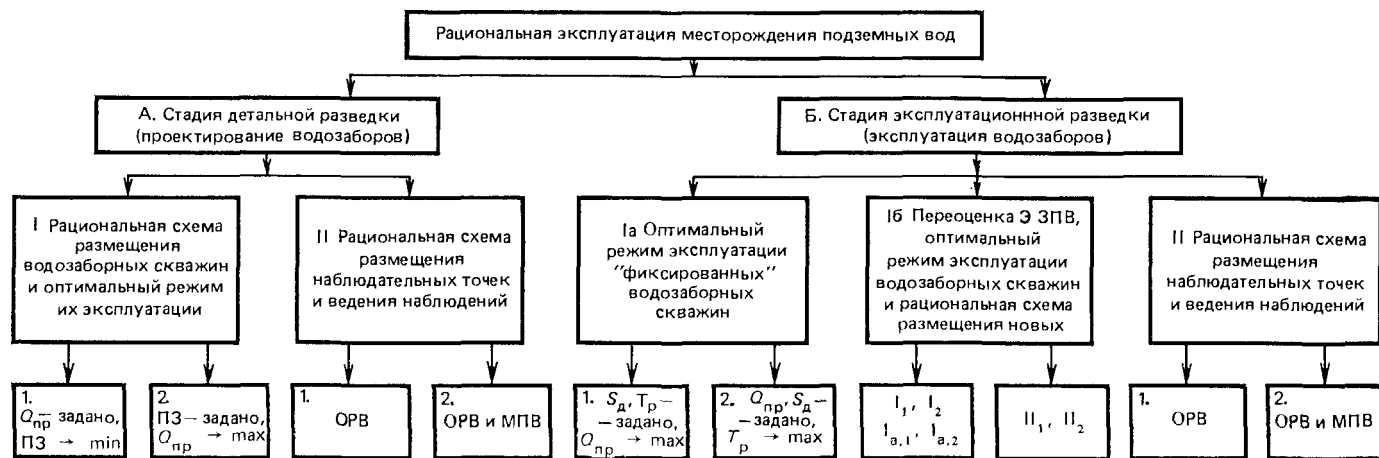


Рис. 76. Схема постановок задач рациональной эксплуатации месторождения подземных вод с АСУ-Водозабор. По И. К. Гавиц

гической обстановки, создающейся в зоне влияния проектируемого или действующего водозабора в процессе эксплуатации. Виды и характер этих критериев практически еще изучены слабо, поэтому в дальнейшем они не рассматриваются.

Для фиксированных водозаборов, когда схема размещения водозаборного сооружения уже выбрана и осуществлена, задача оптимизации может быть сведена к следующему (см. рис. 76, 1а): 1) заданы предельные понижения уровней воды в водозаборных скважинах и расчетный срок их эксплуатации. Необходимо найти такое распределение дебитов между скважинами, которое в течение всего срока эксплуатации дало бы максимальную величину суммарного водоотбора; 2) заданы предельные понижения уровней в водозаборных скважинах и планируемый суммарный водоотбор из них. Требуется найти такое распределение дебитов между скважинами, которое обеспечило бы максимальное продление срока эксплуатации всего месторождения подземных вод.

Здесь в качестве основных оптимальных критериев берутся гидрогеологические показатели, экономические (эксплуатационные затраты на добычу воды) принимаются во внимание только при выборе рационального насосного оборудования с целью поддержания оптимального режима эксплуатации водозабора. Все это позволяет дать общие рекомендации по среднегодовому оптимальному режиму работы водозабора. Однако текущие технические условия насосной эксплуатации (ремонт скважин, выход из строя насосного оборудования, колебания суммарного водоотбора по сезонам года и т. п.) нарушают рациональные рекомендации. Возникает необходимость на стадии эксплуатационной разведки оперативно регулировать водоотбор из скважин на основе планирования квартальных, полугодовых водоотборов и данных наблюдений за нарушенным режимом подземных вод.

Такое регулирование в оптимальной постановке называем оперативным управлением.

Здесь следует заметить, что предлагаемое понятие оперативного регулирования отличается от близкого по названию, но иного по содержанию оперативного регулирования работой водозаборных скважин, используемого в области водоснабжения [29]. Там такое регулирование предполагает дистанционное управление работой насосов в соответствии обычно с суточным изменением водоотбора. При этом нельзя одновременно поставить задачу сохранения оптимальных условий изменения режима подземных вод в водозаборных скважинах и на месторождении в целом, а также задачу максимального продления срока эксплуатации такого месторождения. Предлагаемая постановка задачи управления рациональным режимом эксплуатации водозабора и месторождения включает два этапа: 1) на основе долгосрочного прогнозирования выбираются оптимальные среднегодовые дебиты водозаборных скважин при задан-

ном суммарном водоотборе и соответствующих ограничениях, определяющих сохранение заданной общей обстановки, обеспечивающей максимальный срок эксплуатации месторождения; 2) оперативным регулированием, т. е. вводом резервных и выводом из эксплуатации некоторых водозаборных скважин, а также назначением выбранного по специальному алгоритму рационального насосного оборудования для всех, и в том числе для указанных скважин, удерживается их среднегодовой дебит в пределах найденной ранее оптимальной величины. Опыт технической эксплуатации насосного оборудования показал, что замена его производится не реже одного раза в квартал, что и возможно принять за период оперативного регулирования. При этом на втором этапе каждый раз проверяется ранее найденный оптимальный вариант эксплуатации водозабора, обеспечивающий максимальный срок существования месторождения при запланированном суммарном водоотборе.

На стадии эксплуатационной разведки одной из важных задач является переоценка эксплуатационных запасов подземных вод на основе данных работы и расширения водоотбора (см. рис. 76, IIб), что достигается бурением новых скважин на месте старых и увеличением их производительности или введением дополнительных скважин либо новых участков водоотбора. Новые условия водоотбора, совместное использование других водоносных горизонтов, изменение граничных условий в процессе расширения депрессионной воронки и некоторые другие факторы приводят к изменению выработанного долгосрочного оптимального варианта эксплуатации месторождения. Возникает необходимость регулировать долговременную работу месторождения, рационально использовать его подземные воды. Можно оперативное и общее управления объединить. Оно может осуществляться путем создания автоматизированной системы управления водозабором (АСУ-Водозабор). При этом ставится цель сохранения оптимального режима эксплуатации месторождения и водозаборов при заданном суммарном водоотборе или получения максимального объема воды в течение расчетного периода работы этих водозаборов. Принципиальная схема АСУ-Водозабор представлена на рис. 77. Блок прогнозов позволяет постоянно рассматривать задачу общего управления рациональным использованием подземных вод месторождения, а также решать задачи оптимального размещения наблюдательной сети. Следовательно, постановка рассматриваемой задачи оптимального регулирования режима эксплуатации месторождения и водозабора в методологическом отношении определяет комплексное ее решение, при котором оперативное управление осуществляется так, чтобы на каждый расчетный момент времени выполнялись заданные рациональные условия эксплуатации месторождения в целом. Эти условия либо предварительно определяются при решении самостоятельной оптимизационной задачи, либо задаются в соответствии с перспективами разви-

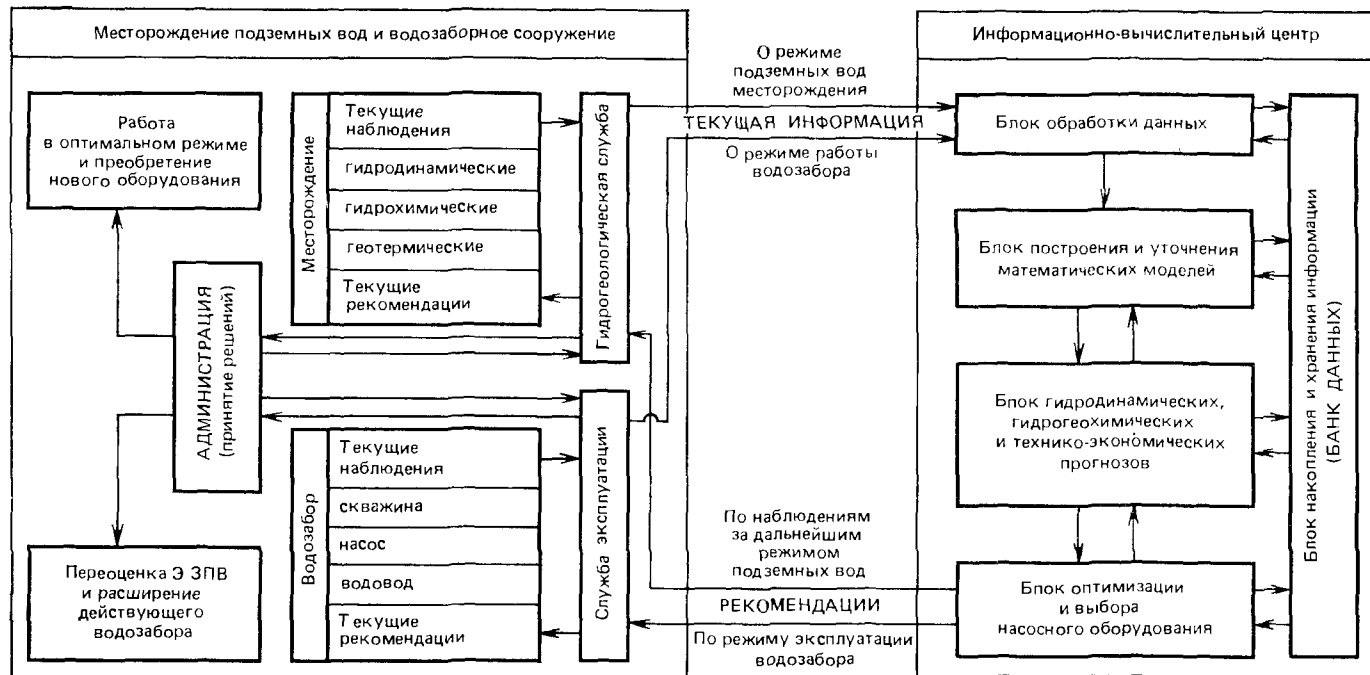


Рис. 77. Принципиальная схема АСУ-Водозабор. По И. К. Гавич, В. И. Угорцу

тия района исследований. Как необходимый в настоящее время элемент включаются экологические требования, которые по возможности могут видоизменяться в процессе решения задачи управления.

Рассмотрим задачу управления при условии сохранения оптимального режима эксплуатации действующего водозабора. Параметрами управления в данном случае являются дебиты водозаборных скважин, которые можно регулировать таким образом, чтобы достичь определенной цели управления. Основными способами управления режимом работы всего водозабора являются: 1) регулирование водоотбора при помощи задвижек; 2) регулирование водоотбора путем рационального выбора нового насосного оборудования при выходе из строя старого; 3) регулирование путем создания сети резервных скважин.

Первый способ целесообразно применять для водозаборов, эксплуатирующихся самонизливом. Существенно уменьшать дебит скважины, эксплуатирующейся электронасосом, с помощью задвижки неразумно в связи с возможным снижением КПД насоса и быстрым выходом его из строя. В этом случае регулирование можно осуществлять выбором нового насоса при выходе из строя старого (второй способ). Здесь необходимо контролировать КПД насоса. При снижении КПД ниже критического (обычно 30—40 %) насос рекомендуется отключать и выбирать лучшую марку нового. Это позволяет эксплуатировать электронасосы в оптимальном режиме, экономить эксплуатационные затраты на электроэнергию и повторно использовать электродвигатели извлеченного из скважин насосного оборудования.

Третий способ представляет собой частный случай первого и второго (в скважине полностью перекрыта задвижка или не подключен электронасос). Резервная скважина может быть в любой момент введена в эксплуатацию, а какая-то другая — выключена и переведена в разряд резервных. Такое регулирование возможно при достаточном числе эксплуатационных скважин, когда возможный суммарный водоотбор из них превышает требуемый.

Если в задачу управления этапом входит переоценка эксплуатационных запасов подземных вод с расширением водозабора, то в понятие резервные скважины могут быть введены бурящиеся новые эксплуатационные скважины. Классификация водозаборных скважин по условиям насосной эксплуатации, где выделены основные параметры управления, приведена на рис. 78. Из рис. 78 видно, что управлять режимом насосной эксплуатации можно за счет создания сети резервных скважин.

Задача оптимального управления работой водозабора заключается в выработке рекомендаций по текущему режиму эксплуатации скважин. Такое управление осуществляется в течение всего периода эксплуатации месторождения подземных вод. С этой целью на базе информационно-вычислительного

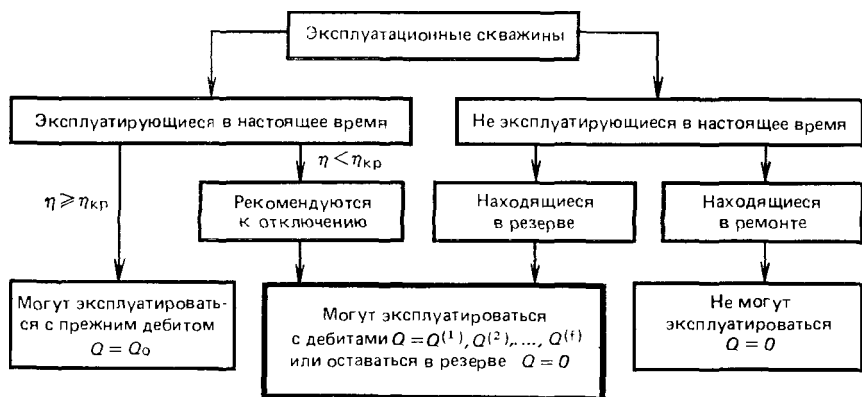


Рис. 78. Классификация водозаборных скважин по условиям насосной эксплуатации. По В. И. Угорцу

центра (ИВЦ) создается автоматизированная система управления водозабором (АСУ-Водозабор), регулирующая режим работы водозабора в течение всего срока его эксплуатации, постоянно определяя оптимальные величины дебитов для каждой водозаборной скважины и выбирая рациональное насосное оборудование для их реализации. На основе АСУ-Водозабор производится, если это необходимо, переоценка эксплуатационных запасов подземных вод, уточняются гидродинамические, гидрогеохимические и другие прогнозы. Все это повышает эффективность работы водозабора и позволяет вести эксплуатацию насосным оборудованием в режиме максимальных значений его КПД. При этом производится обработка всех данных наблюдений за режимом подземных вод и условиями технической эксплуатации водозабора вычислительными машинами. Разработанная АСУ-Водозабор базируется на использовании многолетних наблюдений за режимом подземных вод и включает пять алгоритмизированных и реализованных на ЭВМ блоков (см. рис. 77): 1) обработки данных; 2) накопления и хранения информации; 3) построения и уточнения математических моделей; 4) прогнозов; 5) оптимизации и выбора насосного оборудования. Общий алгоритм решения задачи оптимального управления режимом работы водозабора включает семь этапов.

1. С водозабора и всего месторождения в целом на ИВЦ периодически (например раз в квартал) поступает следующая информация о работе каждой водозаборной (и наблюдательной) скважины: дата замера, дебит, понижение уровня, минерализация и химический состав воды, температура, марка насоса, сила электрического тока на насосе. При проведении режимных наблюдений два раза в месяц по каждому перечисленному выше показателю точек наблюдений будет шесть.

Кроме того, поступают данные о работе всего водозабора в целом: число и номера скважин, находящихся в ремонте, резерве, марки имеющегося в наличии запасного насосного оборудования и др.

2. Результаты режимных наблюдений поступают в блок обработки исходных данных, где производятся операции: а) рассчитываются средние значения дебитов за период (квартал), понижения уровней воды, ее минерализация и температуры по каждой водозаборной скважине, которые затем направляются в блок накопления и хранения информации, представляющий собой некоторый банк данных; б) определяются расчетные значения КПД насосов действующих в настоящий момент скважин. При величине КПД ниже критической такую скважину рекомендуется отключать и переводить в состав резервных.

3. По мере накопления в банке данных новой информации о режимных наблюдениях в блоке построения и уточнения математических моделей происходит проверка и корректировка используемых гидродинамических, гидрогеохимических, технических и других моделей. Построение их осуществляется на основе новых данных и всего предшествующего опыта эксплуатации водозабора, отвечающего тем условиям, для которых предполагается делать прогноз.

4. В блоке прогнозов на основе построенных моделей производится долгосрочное и краткосрочное прогнозирование. Наиболее рационально их комплексное использование. На основе долгосрочного прогноза уточняются максимальный срок и условия эксплуатации месторождения, осуществляется оптимальное распределение дебитов между скважинами водозабора, вырабатываются рекомендации по дальнейшим режимным наблюдениям в пределах всего месторождения, выбираются марки и планируется необходимое число насосного оборудования (пока отсутствующего) с целью повышения эффективности реализации оптимального варианта эксплуатации водозабора в будущем. На основе краткосрочного прогноза выбирают рациональное новое насосное оборудование при выходе из строя старого.

5. В блоке оптимизации на основе выполненных долгосрочного и краткосрочного прогнозов определяются оптимальные дебиты резервных скважин и рациональное насосное оборудование для реализации таких дебитов. Для скважин, продолжающих эксплуатироваться, насосное оборудование и дебиты остаются неизменными, а для скважин, находящихся в ремонте, дебиты принимаются равными нулю. Оптимальным для резервных скважин считается такой режим эксплуатации, при котором будет обеспечиваться максимальное продление периода работы водозабора с заданным суммарным водоотбором. После того как для всех резервных скважин выбрано насосное оборудование, уточняются дебиты всех эксплуатировавшихся ранее

скважин. Это связано с тем, что в единой гидравлической системе пласт — скважины — насосы — водоводы дебиты могут несколько изменяться.

6. Рекомендации, разработанные АСУ-Водозабор по текущему режиму эксплуатации и дальнейшим режимным наблюдениям, поступают обратно на водозабор (гидрогеологическая служба и служба эксплуатации), предварительно запоминаясь в блоке накопления и хранения информации. При поступлении данных новых режимных наблюдений в блоке обработки исходных данных производится проверка на практике реализации рекомендаций, выданных ИВЦ.

7. Рекомендации, накопленные в гидрогеологической службе и службе эксплуатации водозабора, анализируются и обобщаются. Затем принимается решение о целесообразности дальнейшей эксплуатации водозабора и месторождения в целом по используемому оптимальному варианту или показывается необходимость переоценки запасов подземных вод, расширения водоотбора или принятия, с учетом других (внешних) причин, иной схемы разработки месторождения подземных вод (см. рис. 77).

Приведенный алгоритм предполагает, что сбор исходных данных режимных наблюдений производится человеком, выработка управляющих решений — выбор оптимального режима текущей эксплуатации водозабора и месторождения — осуществляется ЭВМ, передача и осуществление этих решений на водозаборе — вновь человеком. При полной телемеханизации режимных наблюдений, проводимых на водозаборе, можно создать автоматическую систему управления (АВСУ), где человек будет контролировать работу водозабора.

ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ

В настоящее время подобные задачи достаточно широко решаются в нефтяной гидродинамике, связанной с разработкой и эксплуатацией нефтяных и газовых месторождений. Изучением этих вопросов занимались А. П. Крылов, Г. Н. Осипов, Ф. А. Требин, Н. Б. Умрихин и др. В гидрогеологии решение задач выбора рациональных схем водозаборов, эксплуатирующих в основном промышленные и в меньшей степени питьевые воды, осуществляли С. С. Бондаренко, Н. Н. Веригин, И. С. Глазунов, В. М. Кононов, М. П. Полканов, Г. И. Потапов, М. В. Сыроватко, С. В. Темко, Г. Ц. Тумаркин и др.

Систематическое исследование вопросов выбора рациональных схем разработки месторождений подземных хозяйственно-питьевых вод в сложных гидрогеологических условиях проводится в Московском геологоразведочном институте (МГРИ) с середины 60-х годов по настоящее время. В работах И. К. Гавич, Н. Н. Ленченко, А. В. Михайловой, Г. Ц. Тумаркина,

В. И. Угорца [10, 36 и др.] разработаны: 1) математическая постановка и алгоритм приближенного решения задачи выбора и гидрогеологического обоснования оптимальных условий эксплуатации действующих водозаборов; 2) методика составления и использования в задачах оптимизации эквивалентных аналитических схем, интегрально аппроксимирующих главные особенности гидрогеологических условий рассматриваемого месторождения подземных вод; 3) отдельные аспекты технико-экономического обоснования и определения экономической эффективности от внедрения оптимального варианта эксплуатации действующего водозабора; 4) методика комплексного использования задач оптимизации аналоговой и вычислительной техники; 5) основы АСУ действующими водозаборами с целью максимального продления срока эксплуатации месторождения подземных вод имеющимся в наличии насосным оборудованием при заданной величине суммарного водоотбора. Исследованию последней задачи и посвящена настоящая глава.

В. С. Зильберг, М. С. Красс, Е. В. Гусева, В. А. Злотник рассматривают оценки региональных ресурсов подземных вод как задачу оптимизации водоснабжения, формулируя ее следующим образом: необходимо получить максимально возможное количество воды в данной области региона при заданных ограничениях на снижение уровня подземных вод при фиксированном и нефиксированном размещении водозаборов. Исходная информация формируется в виде матричной эволюционной модели геофильтрации, а решение — как третья краевая задача для двумерного в плане потока. Оптимальное распределение дебитов между водозаборами осуществляется с использованием модифицированного симплекс-метода с двусторонними ограничениями на искомые величины. Б. М. Зильберштейн и Л. В. Петрусевич при нахождении понижений в скважинах водозаборов комплексно применяют аналоговое моделирование и методы линейного программирования.

Положения задачи оптимизации

Эффективность работы водозабора подземных вод определяется большим числом различных геолого-гидрогеологических, санитарно-биологических, экологических и технико-экономических факторов. Совместный учет их действия с позиций оптимизации требует построения комплекса геолого-математических (гидродинамических, гидрогеохимических, биологических и др.) и эколого-технико-экономических моделей, реализация которых возможна при использовании современной цифровой вычислительной техники.

Решение задачи оптимизации основано на следующих положениях.

1. Находится наиболее рациональный вариант работы водозабора. Отсюда следует, что решение в гидрогеологическом

отношении должно достаточно полно учитывать все природные условия, в том числе биолого-экологические, а построенная геолого-математическая модель объекта должна быть достаточно надежной по результатам выдаваемых прогнозов. Этого можно достичь выявлением главных физико-географических, экологических и геолого-гидрогеологических особенностей объекта и последовательной схематизацией этих условий с оценкой достоверности ее выполнения факторно-диапазонным анализом и решением комплекса обратных задач на ЭВМ [7]. Однако в отличие от моделей гидрогеологического прогноза такая модель не должна быть слишком сложной и не должна содержать большое число переменных. Это может привести к тому, что будет очень сложно найти соответствующие математические методы решения задачи оптимизации. При этом структура модели должна отвечать точности исходной информации.

2. Для нахождения оптимального решения обычно требуется перебрать большое число вариантов и, следовательно, необходимы современные ЭВМ. Многие методы численной реализации математических моделей, наиболее полно отражающих природные условия объекта, оказываются малоэффективными при решении оптимизационных задач, так как требуют значительных затрат машинного времени. В связи с этим необходимо разрабатывать специальные математические методы вычисления обобщенных гидродинамических характеристик водозаборов, которые могут эффективно использоваться в задачах оптимизации. Примером может служить разработанный в МГРИ метод эквивалентных схем [7], позволяющий заменить сложные гидрогеологические условия упрощенной фильтрационной схемой с обобщенными гидродинамическими параметрами, интегрально учитывающими неоднородность пласта, наличие перетекания из других водоносных горизонтов, влияние сложных по конфигурации внешних границ, и использованный в задаче оптимизации [10].

3. При наличии многолетних режимных наблюдений задача оптимизации решается с использованием математических моделей не прямой аналогии. При этом объект рассматривается как «черный ящик», и его математическое описание строят, исходя из фактических данных наблюдений и результатов измерения параметров объекта. Для построения таких моделей представляют интерес индуктивные методы самоорганизации моделей на ЭВМ, разработанные в Институте кибернетики АН УССР [17, 18]. Во всех случаях достоверность моделей (полной, эквивалентной схемы или не прямой аналогии) и их идентификации объекту подтверждается на всех стадиях решения задачи оптимизации данными наблюдений за режимом подземных вод, которые играют ведущую роль в разработанной методике и являются эталоном при сопоставлении с результатами моделирования.

Этапы задачи оптимизации

В структурной схеме общего алгоритма решения задачи выбора оптимальных условий работы водозаборов подземных вод выделяются три основных этапа, характерных для любой оптимизационной задачи в гидрогеологии: гидрогеологическое, технико-экономическое и математическое обоснования. Необходимо выделять четыре этапа и как важнейший самостоятельный биолого-экономический. Однако, учитывая, что решение этих задач пока еще находится в стадии разработки, в излагаемой постановке эти вопросы не рассматриваются. Предполагается, что биолого-экономическая и санитарно-гигиеническая обстановка на МПВ заданы и соблюдаются. Задача оптимизации в основном отвечает подходам, изложенным в этапе гидрогеологического обоснования с учетом социально-экономических оценок.

Гидрогеологическое обоснование

На этом этапе производится оценка качества и количества исходной информации, гидрогеологическое районирование, выбор режимобразующих факторов и оценка балансовых составляющих подземных вод, схематизация гидрогеологических условий с применением факторно-диапазонного анализа и решения обратных задач, установление главных факторов, определяющих условия формирования прогноза.

При решении задачи оптимизации на стадии эксплуатационной разведки месторождения подземных вод с использованием наблюдений за их нарушенным режимом гидрогеологическое обоснование разделяется на несколько подэтапов и подробно рассматривается в работах [7, 10]. В настоящей книге мы кратко коснемся смысла такого разделения.

На первом подэтапе строятся и гидродинамически оцениваются исходные модели пласта по условиям проведения длительных групповых откачек на стадии разведки и опыта работы водозабора в первые годы его эксплуатации. Далее уточняются коллекторские свойства пласта и расчетные параметры по результатам моделирования и дополнительного опробования действующих водозаборных скважин на стадии эксплуатационной разведки; дается оценка гидродинамической роли внутренних и внешних границ месторождения подземных вод, характера и интенсивности перетекания при эксплуатации его водозаборами; анализируются гидродинамические условия работы водозаборов в первые годы их эксплуатации и оценивается их воздействие на окружающую среду; уточняется оценка восполнения запасов подземных вод и определяются их генетические составляющие и возможное истощение ресурсов и запасов подземных вод; строится и обосновывается достоверность эквивалентных расчетных схем, позволяющих заменить сложную

фильтрационную схему более простой, содержащей обобщенный элемент, интегрально учитывающий действие факторов, которые не могут быть заданы непосредственно.

На втором подэтапе проводится гидрогеохимический, гидрогеотермический и санитарно-биологический анализ, включающий: 1) уточнение гидрогеохимических, гидрогеобиологических и геотермических характеристик подземных вод, эксплуатируемых водозаборами, а также общей гидрогеохимической, гидрогеобиологической, геотермической и санитарно-гигиенической обстановок на участке действующего водозабора и МПВ в целом; 2) уточнение роли и степени влияния отдельных факторов в формировании состава, температуры и других показателей подземных вод как сложной гидрогеологической системы и определение тенденций их изменения в процессе эксплуатации водозабора; 3) установление связи между изменениями гидродинамической, гидрогеохимической, гидрогеотермической, гидрогеобиологической, экологической обстановок в зоне влияния водозаборов и месторождения в целом.

На третьем подэтапе строятся геолого-математические модели объекта, исходные для дальнейших прогнозов. Может быть несколько модификаций моделей. На этом подэтапе формируется система дифференциальных уравнений с начальными и граничными условиями, которая с совокупности с аналитическими и численными ее решениями, вероятностно-стохастическими моделями и учетом сформулированных основных ограничений определяет для данного объекта рациональные гидрогеологические, санитарно-гигиенические и экологические условия эксплуатации водозаборов и месторождения в целом.

Построенная геолого-математическая модель (одна или несколько) должна быть проверена на достоверность. Поэтому в данный подэтап включаются: 1) выполнение на построенной модели ретроспективных решений эпигноза и оценки ее достоверности и точности по данным имеющегося опыта эксплуатации водозабора; 2) составление гидрогеологических прогнозов, анализ их результатов и установление целесообразности принятых ограничений и режима эксплуатации; 3) сопоставление результатов гидродинамических и других прогнозов, полученных на полных моделях и на эквивалентных или упрощенных моделях-схемах, выбор и оценка точности «работы» последних для решения задачи оптимизации с применением ЭВМ.

Таким образом, на этапе гидрогеологического обоснования устанавливается степень тождественности построенной модели и натурального объекта в пределах точности исходной информации, производится выбор и обоснование гидрогеологических и других критериев и ограничений, обеспечивающих получение допустимых вариантов решений эксплуатации МПВ. Заметим, что, выделяя как исследуемый объект конкретное месторождение подземных вод, мы нарушаем многочисленные его связи с более крупными гидрогеологическими системами, в которые

он входит как подсистема. Кроме того, данный объект имеет связи с другими системами и подсистемами: атмосферой, биосферой и наземной гидросферой (физико-географические условия как среда функционирования объекта и существования человека), техногенной (другие инженерные объекты, воздействующие на изучаемый водоносный горизонт или комплекс, инженерный объект, на окружающую его обстановку) и др. Учет этих связей и возможного их изменения в процессе решения задачи обязателен, так как они не только влияют на постановку задачи, ее критерии, ограничения и т. п., но и изменяют эти внешние (по отношению к изучаемой) системы и подсистемы. Это особенно важно с позиций охраны природной среды и социологических аспектов.

Технико-экономическое обоснование

К числу важнейших принципов технико-экономического обоснования задач оптимизации следует отнести:

- требование народнохозяйственного подхода при оценке эффективности различных возможных решений. Это значит, что необходимо учитывать не только непосредственные затраты и получаемые результаты в пределах рассматриваемой системы, но и всю совокупность эффектов и потерь в других частях народного хозяйства, которые возникают там вследствие принимаемого решения;

- учет ограниченности в каждый момент времени всех видов ресурсов, в связи с чем и возникает проблема наиболее эффективного их использования;

- возможность и целесообразность поиска наивыгоднейшего решения с помощью экономической модели;

- наличие четко сформулированной экономической цели задачи оптимизации и выбор критерия оптимальности;

- необходимость анализа процессов в динамике, т. е. учета последствий фактора времени.

При рассмотрении задач оптимизации неизбежно приходится соответствующий объект выделять из общей схемы народного хозяйства, нарушая при этом множество прямых и обратных связей с другими подразделениями. Между тем учет этих связей обязателен, так как в зависимости от принимаемого решения могут существенно изменяться технико-экономические, санитарно-гигиенические, экологические характеристики и условия функционирования ряда смежных объектов.

Таким образом, правильная оценка различных решений должна основываться на комплексном сопоставлении всех связанных с ними затрат и результатов. Осуществление того или иного мероприятия может быть оправдано лишь в том случае, если это выгодно с точки зрения народного хозяйства и не нарушает заданной экологической обстановки. При народнохозяйственном подходе, когда принимаются оптимальные решения,

первостепенное значение имеют правильное построение системы цен, корректность составления экономико-математической, экологической моделей, учет фактора времени и др.

Оптимальные решения при постановке технико-экономических задач должны отбираться не путем интуитивных представлений, а на основе строгого расчета. С этой целью исходную технико-экономическую задачу необходимо формализовать, т. е. описать с помощью математических выражений характерные для нее связи. Совокупность этих математических выражений вместе с экономической и экологической характеристиками входящих в них величин и составляет экономическую модель задачи.

Таким образом, на этом этапе изучается экономическая и экологическая целесообразность внедрения того или иного варианта, определяется зависимость между искомыми параметрами и технико-экономическими факторами, конкретизируются экономические и экологические цели. Обоснование экономической модели делится на два подэтапа. На первом анализируются технико-экономические, а также санитарно-гигиенические факторы работы водозабора и месторождения подземных вод.

При этом должны быть определены все эти факторы, влияющие на работу объекта в целом, установлены главные из них, определены содержание и стоимостные представления выявленных факторов, построена структурная схема стоимостных показателей, характеризующих работу водозаборных скважин и всех других элементов, связанных с эксплуатацией водозабора. На стадии проектирования водозаборов существенную роль играют экономические (стоимостные) факторы, на стадии эксплуатации (в принудительном режиме) — технические. К последним могут быть отнесены: характеристика применяемого на водозаборе насосного оборудования; периодичность выхода его из строя и факторы, определяющие продолжительность безаварийной эксплуатации; эффективность использования насосного оборудования и эксплуатационные затраты на электро-энергию; параметры магистрального и сборных водоводов и возникающие в них гидравлические потери напора воды и т. д. Санитарно-гигиенические и экологические факторы важны для обеих стадий, на первой они играют профилактическую, ограждающую роль, на второй — контролирующую строгий учет и выполнение охранных требований, сформулированных и принятых на стадии проектирования.

Второй подэтап содержит технико-экономическое обоснование задачи оптимизации и включает выявление степени влияния на экономику водозабора в целом различных технических, санитарно-гигиенических и экологических показателей в зависимости от конструкций скважин, их числа и размещения, условий их работы и взаимодействия с другими объектами, схем размещения и типов трубопроводов и др. На этом этапе обосновываются упрощения для представления стоимостных пока-

зателей в модели, формулируются технико-экономические, санитарно-гигиенические, экологические ограничения, определяются экономические критерии задачи оптимизации. Все эти данные являются основой для построения экономических моделей и зависимостей, которыми и завершается технико-экономическое обоснование задачи оптимизации.

Математическое обоснование

Основными элементами математического обоснования задачи оптимизации являются следующие: 1) окончательная модификация геолого-математической и экономико-математической модели с позиций оптимизации; 2) выбор целевой (критеральной) функции; 3) формулировка и обоснование ограничений на параметры оптимизации; 4) выбор методов решения задачи.

При математическом обосновании следует иметь в виду, что после проведения оценки влияния различных гидродинамических, технико-экономических и других факторов на оптимальное решение задачи часто можно упростить ранее построенные (геолого-математическую и экономико-математическую) модели и сократить число параметров. Ограничение числа учитываемых параметров — важное свойство модели, облегчающее ее исследование. Модель с большим числом параметров приводит к оптимизации функции столь большого числа переменных, что найти численное решение такой задачи с точностью, согласованной с точностью входной информации, оказывается практически невозможным. Поэтому оценка степени влияния различных переменных на оптимальный процесс и вопросы, связанные с возможностью упрощения построенных геолого-математической и экономико-математической моделей, имеют очень большое значение. Упрощая структуру модели, с помощью введения обобщенных параметров можно ряд переменных перевести в ограничения.

Суть проблемы оптимизации — выбор целевой функции и нахождение ее максимального или минимального значения. Целевая функция является математическим выражением результата всей задачи. Ее также называют критерием оптимизации, или показателем качества.

В большинстве случаев выбор оптимального варианта эксплуатации водозаборов и месторождения подземных вод связан с многими критериями. Однако оптимальный режим работы объекта вовсе не означает, что функционирование всех его элементов должно быть оптимальным, т. е. нередко для получения оптимального решения всей задачи бывает необходимо допускать частичное ухудшение одного или даже нескольких отдельных критериев качества. Один из критериев, который наиболее важен для рассматриваемой задачи, принимают за целевую функцию и делают попытку выбора наилучшего

варианта, в то время как для остальных критериев вводят различные ограничения.

Независимо от принятого критерия общая математическая постановка задачи выбора оптимального варианта может быть сформулирована следующим образом.

Предположим, что проектируемая система зависит от N изменяемых параметров x_1, x_2, \dots, x_N . Рассматривается функция F , зависящая от этих параметров: $F = f(x_1, x_2, \dots, x_N)$, характеризующая качество предлагаемого варианта (критериальная функция). Параметры x_i — искомые характеристики. Ими могут быть общее число скважин, расход скважин на каждом рассматриваемом интервале времени, конструкции скважин, параметры и геометрия сети трубопроводов, а также ряд других характеристик водозаборного сооружения и месторождения подземных вод. На параметры x_i накладываются ограничения вида

$$\alpha_i \leq x_i \leq \beta_i;$$

$$\psi_k(x_1, x_2, \dots, x_{m_k}) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, p; \quad m_k \leq N. \quad (209)$$

$$\Phi_j^* \leq \Phi_j(x_1, \dots, x_{m_j}) \leq \Phi_j^{**}; \quad (210)$$

$$j = 1, 2, \dots, h; \quad m_j \leq N,$$

где α_i, β_i — границы допустимых изменений параметра x_i ; ψ_k — некоторая функция, зависящая от параметров x_i , причем возможно только от некоторых. Эта зависимость определяется уравнением вида (210); p — число таких условий; m_k — число параметров, которыми определяется функция ψ_k ; Φ_j — некоторая функция, также зависящая от всех или от некоторых параметров x_i ; Φ_j^*, Φ_j^{**} — границы возможного изменения значения функции Φ_j ; h — число таких условий вида (210); m — число параметров, которыми определяется функция Φ_j .

Могут также рассматриваться еще более общие случаи, когда сами параметры x_i и функционалы F, ψ, Φ зависят от интегральных кривых дифференциальных уравнений, описывающих действия системы, или представляются стохастическими, вероятностными зависимостями.

Ограничения (209) — (210) определяются геолого-гидрогеологическими, физико-географическими, экологическими, санитарно-гигиеническими и техническими условиями конкретной территории, для которой решается задача, и устанавливаются они на основании материалов гидрогеологических изысканий и исследований, технико-экономического анализа условий работы, технических характеристик используемого водозабора и т. д. Ограничения выражают различные связи и требования на введенные параметры и вытекают из существа конкретной задачи. Например, обычно вводятся ограничения на величину уровня воды в скважинах, суммарный водоотбор, определяемый потребностями водопотребления, качество воды и др.

Ограничения вида (209) выделяют в N -мерном пространстве параллелепипед объемом $V = \prod_{i=1}^N (\beta_i - \alpha_i)$. Ограничения вида (209)—(210) выделяют в этом параллелепипеде некоторое множество объемом V_D , которое называется областью допустимых значений. Предполагается, что V_D/V не слишком мало. Тогда общая оптимизационная задача может быть сформулирована следующим образом: требуется найти такую точку $x^0 = \{x_1^0, \dots, x_N^0\}$ в N -мерном пространстве, принадлежащую области V_D , в которой значение критерия оптимальности минимально (максимально):

$$F = F(x_1^0, \dots, x_N^0) = \min; \\ \{x_1^0, \dots, x_N^0\} \in V_D. \quad (211)$$

Задача выбора оптимального варианта состоит в определении таких параметров водозаборных сооружений (число скважин, их расположение, режим эксплуатации, различные гидродинамические характеристики и т. д.), которые обеспечивают наиболее рациональный вариант эксплуатации водозабора или месторождения в целом. В гидрогеологии существуют различные стадии обоснования водохозяйственного комплекса. Для каждой из них может быть рассмотрена своя задача оптимизации, отличающаяся и поставленными целями, и параметрами, которые должны быть определены в результате ее решения. Соответственно для каждой стадии формулируется и обосновывается свой критерий оптимальности, который непосредственно связан с гидрогеологическими и экономическими требованиями, предъявляемыми к решению задачи на рассматриваемой стадии. В настоящее время существует много различных критериев, позволяющих сравнивать между собой гидродинамически допустимые варианты. Во многих случаях критерий оптимальности связан с экономической эффективностью предлагаемого варианта. Техничко-экономическая оценка водохозяйственного объекта — завершающая стадия при решении задачи оптимизации, и при таком подходе сравнение различных схем водозаборных сооружений в основном заключается в сопоставлении капиталовложений и эксплуатационных расходов по исследуемым вариантам с учетом санитарно-гигиенических и экологических требований. В основу должно быть положено требование минимума всей совокупности народнохозяйственных затрат. В качестве критерия оптимальности рассматривается показатель сравнительной экономической эффективности капитальных вложений — приведенные затраты.

По каждому сравниваемому варианту они представляют собой сумму текущих затрат (эксплуатационных и капитальных вложений)

$$F = P_i + E_n K_i, \quad (212)$$

где K_i — капиталовложения по i -му варианту эксплуатации;

P_i — годовые эксплуатационные затраты по тому же варианту; E_n — нормативный коэффициент эффективности капиталовложений.

Такого рода экономический критерий рекомендуется использовать на стадии проектирования водохозяйственного объекта. При выборе варианта дальнейшей эксплуатации действующих водозаборов (положение эксплуатационных скважин зафиксировано) на первый план обычно выдвигаются гидродинамические, гидрогеохимические и санитарно-гигиенические требования к режиму эксплуатации, так как основные капитальные затраты уже произведены и не могут существенно изменяться для различных вариантов эксплуатации, а следовательно, и повлиять на рекомендации по внедрению того или иного варианта, хотя при расширении или реконструкции водозабора могут и должны к названным присоединиться новые технические и экологические требования.

На стадии эксплуатационной разведки в качестве оптимального рассматривается такой вариант разработки месторождения подземных вод, при котором обеспечивается их максимальное извлечение. При этом, как показано выше, возможно решение задачи оптимизации (см. рис. 76) двумя способами.

Максимальное продление срока эксплуатации водозабора имеющимся в наличии насосным оборудованием при заданном режиме водопотребления встречается на практике очень часто в связи с тем, что производительность действующего водозабора лимитирована утвержденной величиной эксплуатационных запасов и пропускной способностью магистральных водоводов.

Получение максимального суммарного расхода водозабора в течение заданного срока эксплуатации его встречается реже и связано со значительным ростом водопотребления в перспективе.

При разработке алгоритмов решения общей задачи оптимизации для действующих водозаборов, как показывает наш опыт, ее полное решение состоит из двух этапов: 1) выбор оптимального режима эксплуатации на весь заданный расчетный период времени, т. е. в результате решения выдаются рекомендации по распределению среднегодовых значений расходов между водозаборными скважинами, которые принимаются в качестве проектных на весь период дальнейшей эксплуатации водозабора; 2) управление эксплуатацией действующего водозабора и обеспечение выполнения найденного ранее оптимального варианта.

Основной задачей АСУ является выработка конкретных рекомендаций по рациональному режиму текущей эксплуатации водозабора для каждого отдельного интервала времени всего расчетного периода. При этом выработанный АСУ и рекомендованный режим эксплуатации должен максимально сохранять основное требование оптимальности, принятое на первом

этапе. Следовательно, критерий оптимальности, принятый на первом этапе, может выступать на втором в качестве одного из основных ограничений.

ВИДЫ И МЕТОДЫ ПОСТРОЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Модели в задачах оптимизации должны: 1) достаточно полно учитывать все природные, экологические, санитарно-гигиенические и технико-экономические факторы и отличаться высокой степенью достоверности по результатам выдаваемых прогнозов; 2) отличаться гибкостью по отношению к исходным данным и по мере их накопления постоянно проверяться и уточняться, при этом учитывается весь предшествующий опыт эксплуатации; 3) быть не очень сложными, содержать не слишком большое число параметров и экономно реализоваться на ЭВМ.

Виды моделей

Могут использоваться: физические (детерминированные) модели с «истинной» структурой объекта, полуфизические модели с обобщенной структурой и нефизические модели, рассматривающие объект как «черный ящик». В ряде случаев при моделировании сложных систем полезны комплексы этих моделей.

Физическая модель основана на физических законах, характеризует реальные структуры и значения переменных объекта. Должна иметь малое число легко интерпретируемых параметров. Гидрогеологические физические модели основываются на численной реализации дифференциальных уравнений, описывающих нестационарную фильтрацию. Такие модели, как правило, пространственные или плановые.

Использование их при решении оптимизационных задач даже с применением современных ЭВМ весьма трудоемко и может быть оправдано при управлении региональными запасами подземных вод, когда местоположение проектируемых водозаборов еще неизвестно или требуется учет взаимодействия водозаборов, эксплуатирующихся в существенно разных гидрогеологических условиях. При управлении режимом эксплуатации действующих водозаборов, как показали наши исследования, эффективным является применение точечных моделей, описывающих изменение во времени уровня подземных вод (или, например, минерализации) в каждой эксплуатационной скважине. Такие модели могут быть полуфизическими и нефизическими.

Полуфизическими называются модели, основанные на физических законах и имеющие обобщенную структуру и параметры. Методы построения таких моделей с обобщенными параметрами описаны в работах В. А. Грабовникова и

Б. М. Зильберштейна, Б. В. Боровского, Б. Г. Самсонова, Л. С. Язвина и др., а также в работах И. К. Гавич и Н. Н. Ленченко, в которых рассматривается построение для каждой скважины эквивалентной расчетной схемы на основе длительных режимных наблюдений, хорошо аппроксимирующих сложные гидрогеологические условия. При отсутствии длительного ряда режимных наблюдений можно выбирать вид эквивалентной схемы на основе прогнозного решения, полученного на полной физической модели [7, 10].

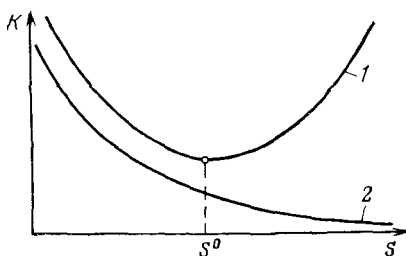
Нефизическими называем модели, которые представляют объект как «черный ящик», его математическое описание строится так, что выходные сигналы в виде основных выделяемых функций отвечают фактическим данным наблюдений и результатов измерения аналогичных параметров объекта. Они удобны, если не рассматривается задача изучения физической сущности объекта, а требуется получение достоверного прогноза на определенный интервал времени. Такие модели создаются на основе индуктивного подхода, когда по заданному выходу подбирается множество входов, и характеризуется тем, что: 1) получаются при помощи перебора многих моделей-кандидатов и выбора лучшей по некоторым внешним критериям; 2) могут быть построены на любых усредненных данных; 3) содержат оптимальное число параметров (причем их не следует интерпретировать физически). Подобные модели могут быть получены на основе разработанного А. Г. Ивахненко [17, 18] индуктивного метода самоорганизации моделей на ЭВМ, реализованного в алгоритмах и программах метода группового учета аргументов (МГУА).

В связи с тем что в гидрогеологической литературе указанный метод освещен весьма недостаточно, ниже приводятся его основные понятия из [17, 18].

Основы индуктивного метода самоорганизации моделей на ЭВМ

Сущность метода. Математические модели разнообразных сложных систем строятся по экспериментальным данным наблюдений рациональным перебором на ЭВМ многих вариантов. В теоретическую основу метода положены: принцип внешнего дополнения, по К. Геделю, и вытекающее из него деление исходных данных; принцип неокончателъности решений, по Д. Габору, связанный с понятием «свободы выбора», и принцип многорядной селекции моделей. Эти предпосылки позволяют утверждать, что математическое описание объекта имеет оптимальную сложность. В этом случае модель наиболее устойчива и при постепенном усложнении математического описания модели значения некоторых критериев сначала снижаются, доходят до минимума, а затем начинают увеличиваться. С помощью ЭВМ путем перебора можно

Рис. 79. Типовые кривые изменения внешнего (1) и внутреннего (2) критериев в зависимости от сложности модели. По А. Г. Ивахненко



находить минимум критерия и соответствующую ему единственную модель оптимальной сложности. Такой индуктивный подход направлен на всемерное уменьшение априорной информации, необходимой для моделирования. Роль человека сводится к организации перебора (поочередного опробования) многих моделей на ЭВМ. Он задает ЭВМ: 1) критерий выбора модели; 2) таблицу исходных данных; 3) вид опорной функции и степень ее сложности; 4) алгоритм генерации и перебора моделей.

Критерий выбора модели. Внешние критерии достаточно эффективны, они обладают свойствами внешнего дополнения, т. е. содержат новую внешнюю информацию и строятся с учетом разделения исходных данных на обучающуюся A , проверочную B и экзаменационную C последовательности. По данным A строятся модели-претенденты и оцениваются их коэффициенты, а выбор лучшей модели — модели оптимальной сложности — осуществляется по минимуму внешнего критерия на B . Для проверки прогнозирующей способности модели и оценки оптимального разделения исходных данных служит C . В работе [17] показано, что перебор моделей по внутреннему критерию, т. е. основанному на всех опытных данных (например, среднее квадратическое отклонение, рассчитанное по всем точкам), приводит к тупику: чем сложнее модель, тем она лучше. На рис. 79 приведены типовые графики изменения внутреннего и внешнего критериев от сложности модели S (S^0 — оптимальная сложность модели).

Выбор того или иного внешнего критерия зависит от целей моделирования. Наиболее распространены критерии регулярности K_p , минимума смещения $K_{см}$, баланса переменных K_b , а также комбинированные критерии (табл. 41).

Критерий регулярности представляет собой среднее квадратическое отклонение по данным проверочной последовательности

$$K_p = \sqrt{\sum_{i=1}^{M_B} (x_i^\Phi - x_i^M)^2 / \sum_{i=1}^{M_B} (x_i^\Phi)^2}, \quad (213)$$

где x_i^Φ , x_i^M — фактические и полученные на модели значения функции в i -й точке; M_B — число точек, отнесенных к проверочной последовательности.

Т а б л и ц а 41

Основные критерии, применяемые в теории метода группового учета аргументов (МГУА)

Критерий	Характеристика	Область применения
Критерий регулярности K_p	Минимальное среднее квадратическое отклонение, рассчитанное на новых точках, не использованных для получения коэффициентов модели	Однократный краткосрочный прогноз на 1—2 шага вперед
Критерий минимума смещения $K_{см}$	Максимальное совпадение значений выходной величины двух моделей, каждая из которых построена на половине опытных данных	Решение задачи идентификации
Критерий баланса переменных K_b	Минимальная величина дебаланса переменных на интервале экстраполяции, баланс между которыми известен на участке интерполяции	Однократный долгосрочный прогноз
Комбинированные критерии	1) критерий «смещение плюс регулярность» (K_1) 2) критерий «смещение плюс баланс» (K_2)	Построение физических моделей для: 1) краткосрочного и 2) долгосрочного прогнозирования

С помощью этого критерия можно отобрать лучшую модель, малочувствительную к небольшим изменениям исходных данных. Такая модель дает небольшую погрешность на новых точках и используется при краткосрочных прогнозах.

Критерий минимума смещения требует максимального совпадения значений выходной величины двух моделей, полученных на двух различных частях таблицы исходных данных,

$$K_{см} = \sum_{i=1}^{A+B} (x_i^A - x_i^B)^2 / \sum_{i=1}^{A+B} (x_i^{\Phi})^2, \quad (214)$$

где x_i^A , x_i^B — значения функции в i -й точке по двум моделям, полученным на последовательностях A и B .

С помощью этого критерия можно выбрать модель, наименее чувствительную к изменению множества опытных точек, по которым она получена. Он требует, чтобы модель давала одинаковые результаты на последовательностях опытных данных A и B . Критерий $K_{см}$ помогает решению задачи восстановления закона, скрытого в зашумленных экспериментальных данных, и поэтому рекомендуется для постановки задач идентификации.

Критерий может использоваться и для долгосрочного прогноза монотонных процессов, когда выбор модели оптимальной сложности удовлетворяет условию «модель вчера, сегодня и завтра» должна быть одной и той же. Модели, найденные по минимуму критериев регулярности и несмещенности, совпадают при точных данных. При зашумленных исходных данных минимум K_p смещается влево в сторону более простых моделей (рис. 80).

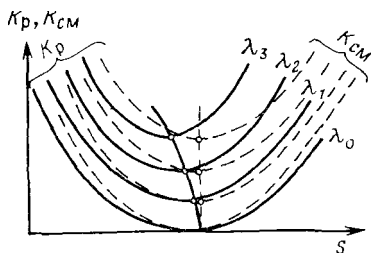


Рис. 80. Кривые зависимости критериев регулярности K_p и минимума смещения $K_{см}$ от сложности модели при уровнях помех $0 < \lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3$. По А. Г. Ивахненко

Критерий баланса переменных заключается в том, что законы (зависимости), открытые на интервале интерполяции, должны выполняться и на интервале экстраполяции, т. е. в области прогнозов. Запись K_b зависит от вида зависимости, связывающей переменные. Допустим, известно, что $\Phi = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, тогда уравнение баланса переменных примет вид $\Phi - f(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$, а K_b запишется

$$K_b = \sum_{i=T_1}^{T_2} [\Phi - f(x_1, x_2, \dots, x_n)]_i^2 / \sum_{i=T_1}^{T_2} (\Phi)_i^2, \quad (215)$$

где $T_2 - T_1$ — интервал времени, включающий точку прогноза. В задачах, где баланс переменных не известен, он может быть открыт при помощи $K_{см}$. С помощью K_b можно построить модель для однократного долгосрочного прогноза, удовлетворяющего условию: закон связи между переменными до прогноза и в процессе его должен быть одинаковым.

Комбинированные критерии используются, например, вида:

$$K_1 = \sqrt{(K_{см}/K_{см_{\max}})^2 + (K_p/K_{p_{\max}})^2};$$

$$K_2 = \sqrt{(K_{см}/K_{см_{\max}})^2 + (K_b/K_{b_{\max}})^2}, \quad (216)$$

где $K_{см_{\max}}$, $K_{p_{\max}}$, $K_{b_{\max}}$ — максимальные значения соответствующего критерия из всех возможных комбинаций моделей. Такой подход позволяет полнее формализовать требования к исходной модели.

Если применение комбинированного критерия связано с большим объемом вычислений, то для ускорения времени подсчета используется последовательно ряд критериев. По первому выбирается F (свобода выбора) лучших моделей-претендентов, из которых уже по второму — модель оптимальной сложности.

Таблица опытных данных. По принципу МГУА используется вся информация о работе объекта. На основании перебора моделей и выбора лучшей по минимуму внешнего критерия незначимые факторы отбраковываются, а соответствующие коэффициенты при них — зануляются. Возможен ввод запаздывающих аргументов, т. е. значений функции и аргументов в прошлые моменты времени. Все исходные данные представляются в виде таблиц через равные интервалы времени, величина которых зависит от требуемой продолжительности прогноза.

Выбор опорной функции и ее сложности. Разнообразие индуктивных самоорганизующихся моделей связано с так называемой опорной или базисной функцией. Априорный выбор класса опорной функции и максимальной сложности модели зависит от представлений геолога об объекте. Для точечных* моделей при монотонных процессах чаще всего используются алгебраические полиномы вида

$$y = \sum_{n=1}^N a_n \prod_{j=1}^l x_j^{s_{jn}}; \quad N = \prod_{j=1}^l (\sigma + j)/j = (\sigma + l)!/\sigma!l!, \quad (217)$$

где l — число аргументов; N — число членов полинома; σ — наибольшая степень полинома; s_{jn} — степени аргументов, принимающие значения $s_{jn} = 0, 1, \dots, \sigma$.

Для колебательных процессов в качестве опорной функции используется гармонический ряд с некрратными частотами

$$y_n = A_0 + \sum_{j=1}^m [A_j \sin(n\omega_j) + B_j \cos(n\omega_j)], \quad (218)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$

Если характер функциональной зависимости выражен неявно, то задают несколько опорных функций, лучшая из которых определяется по более глубокому минимуму внешнего критерия.

Алгоритм генерации и перебора моделей. В Институте кибернетики АН УССР А. Г. Ивахненко и др. разработаны две структуры алгоритмов самоорганизации: однорядные (комбинаторные) алгоритмы с занулением коэффициентов и многорядные алгоритмы с пороговым отбором [18].

Комбинаторный алгоритм МГУА позволяет построить и перебрать около 100 тыс. моделей различной сложности. Рассмотрим принцип его работы, когда в качестве опорной функции используется полином Колмогорова—Габора.

Пусть на некотором интервале задан ряд наблюдений значениями функции и двух аргументов ($l=2$). Необходимо отыскать структуру модели оптимальной сложности для заданной функциональной связи. С учетом этой связи и быстроедей-

* Для пространственных моделей опорной функцией служат разностные аналоги дифференциальных уравнений.

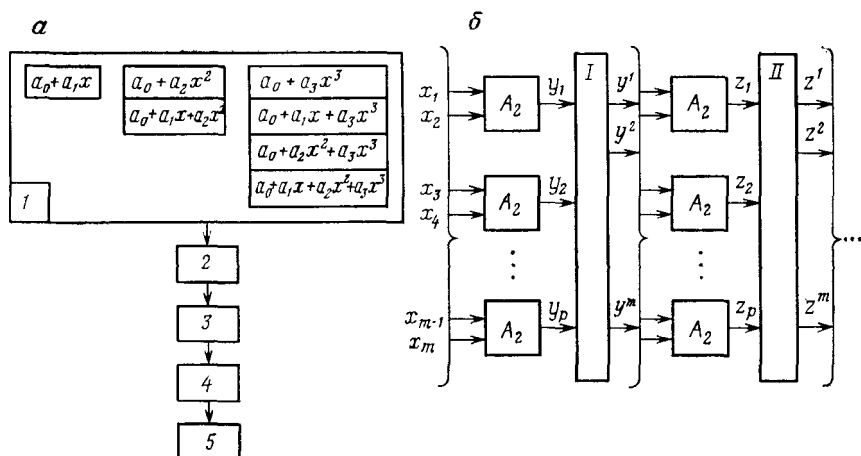


Рис. 81. Принципиальные схемы комбинаторного алгоритма МГУА (а) и пороговой структуры МГУА для числа переменных до 1000 (б). По А. Г. Ивахненко

1 — таблица постепенного усложнения модели; 2 — оценка коэффициентов по данным обучающейся последовательности; 3 — выбор модели по внешнему критерию; 4 — пересчет оценок коэффициентов модели по всем точкам; 5 — выход; I, II — пороговые отборы; F — лучших моделей по критерию селекции; A_2 — алгоритм попарной обработки переменных

вием ЭВМ задается максимальная степень полинома (например, $\sigma=4$) и тем самым однозначно определяется его структура:

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_1^2 + a_4 x_2^2 + a_5 x_1 \cdot x_2 + \dots + a_{N-2} x_1^3 \cdot x_2^3 + a_{N-1} x_1^4 + a_N x_2^4, \quad (219)$$

где y — функция; x_1, x_2 — аргументы (факторы); a_0, a_1, \dots, a_N — коэффициенты. При этом число членов полинома будет

$$N = (\sigma + 1)! / \sigma! 1! = (4 + 1) \cdot (4 + 2) / 1 \cdot 2 = 15.$$

В соответствии с уравнением (219) в программе «COMBI», приведенной в 1980 г. в «Справочнике по типовым программам моделирования» формируется $2^N - 1 = 65\,535$ частных структур моделей вида

$$\left. \begin{aligned} y &= a_0 + a_1 x_1 \\ y &= a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 \\ y &= a_1 x_1 + a_3 x_1^2 \\ &\dots \end{aligned} \right\}. \quad (220)$$

Коэффициенты моделей в (220), включая и (219), оцениваются с помощью метода наименьших квадратов по данным обучающейся последовательности A , а сравнение моделей по критериям (213) — (216) ведется по данным проверочной последовательности B . Число и номера точек наблюдений зависят от

вида используемого критерия, который выбирается в соответствии с целями моделирования. Схема комбинаторного алгоритма приведена на рис. 81, а. Как видно из примера, при двух аргументах и четвертой степени полинома, число перебираемых моделей (более 65 тыс.) находится на пределе современных возможностей ЭВМ.

Многорядные селективные алгоритмы МГУА позволяют строить модель оптимальной сложности при числе аргументов около 1 тыс. по 10—20 точкам наблюдений. В их основе лежит многорядная процедура постепенного усложнения модели (процедура селекции) с выбором на каждом ряду частных моделей, зависящих, как правило, от двух факторов, лучших по некоторому внешнему критерию. Пусть полное описание объекта имеет вид

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_N). \quad (221)$$

Тогда на первом ряду селекции

$$y_1 = f(x_1, x_2), \quad y_2 = f(x_2, x_3), \quad \dots, \quad y_k = f(x_{N-1}, x_N), \quad (222)$$

где $k = C_N^2$, при переходе на второй ряд селекции

$$z_1 = f(y_1, y_2), \quad z_2 = f(y_2, y_3), \quad \dots, \quad z_p = f(y_{k-1}, y_k), \quad (223)$$

здесь $p = C_k^2$.

Из ряда в ряд пропускается только задаваемое число аргументов (свобода выбора). На прекращение наращивания рядов селекции указывает глубина минимума внешнего критерия на проверочной последовательности B . Принципиальная схема пороговой структуры МГУА изображена на рис. 81, б.

Построение гидродинамических моделей по МГУА для краткосрочного прогнозирования

Построение индуктивных самоорганизующихся моделей по МГУА ведется в следующей последовательности.

1. Все данные режимных наблюдений подразделяются на периоды, в течение которых гидрогеологические условия разрабатываемого месторождения подземных вод характеризуются относительно постоянством (одинаковое влияние границ пласта, перетекание из соседних горизонтов и т. д.). Для построения моделей используются наблюдения того периода, гидрогеологические условия которого, как предполагается, будут отвечать и времени прогноза. Все данные о понижениях уровней и дебитах скважин представляются в виде таблиц с равным временным шагом дискретизации, величина которого зависит от количества исходных данных на предыстории и требуемой продолжительности прогноза, обычно квартал, полгода или год.

2. Для краткосрочного прогнозирования используется критерий регулярности (213). Данные подразделяются на обучающуюся A ($\sim 70\%$), проверочную B (20—25%) и экзамен-

национную C (5 %) последовательности. В последовательность C обычно включают 1—2 точки, стоящие последними в хронологическом ряду, а B образуется равномерно из всех опытных точек. Подробнее деление последовательности рассмотрено в [18].

3. Изменение уровня подземных вод в процессе их эксплуатации достаточно монотонно, поэтому в качестве опорной функции может использоваться алгебраический полином, содержащий время t , величину суммарного водоотбора QC , дебит скважины Q и их сочетания, например $S=f(t, \ln t, QC, QC \cdot t, QC \cdot \ln t, QC/t, Q, Q \cdot \ln t, Q \cdot t)$. Могут быть введены в западывающие значения аргументов, когда величина понижения определяется, например, как функция от понижения \bar{S} или расхода \bar{Q} в прошлый момент времени.

4. При числе аргументов менее 20 можно использовать комбинаторный алгоритм МГУА, реализованный в виде вычислительной программы СОМВИ для ЭВМ БЭСМ-6. При большом числе аргументов применяются многорядные селективные алгоритмы, также реализованные в виде вычислительных программ для современных ЭВМ.

Описанный метод был применен с целью построения моделей и оптимизации режима эксплуатации месторождения подземных вод, расположенного в краевой части крупного артезианского бассейна аридного района, гидрогеологическими особенностями которого являются: 1) относительно близкие расположения к водозабору и сложные по конфигурации области выходов водоносных пород на поверхность, а также наличие в рассматриваемом комплексе связанной с этим напорно-безнапорной фильтрации, сопровождающейся сработкой статических упругих и гравитационных запасов подземных вод при малом или практически полном отсутствии восполнения за счет инфильтрационного и другого естественного питания; 2) наличие гидравлически связанных горизонтов и комплексов с локальными участками перетекания по зонам тектонических разломов и гидрогеологическим окнам различного генезиса и площадным перетеканием различной интенсивности; 3) смена в процессе эксплуатации режима самоизлива на принудительный режим, при котором уровень подземных вод располагается ниже поверхности земли и испытывает интенсивное и неравномерное изменение по площади месторождения; 4) значительное изменение глубин залегания эксплуатирующегося водоносного горизонта от нулевых в области выхода его на поверхность до 500—800 м и более в зоне непосредственного расположения водозаборных скважин; 5) определенная неоднородность строения водоносных горизонтов и комплексов в целом.

Таким образом, гидрогеологические условия месторождения весьма сложные и не могут быть аппроксимированы ни одной из известных типовых расчетных схем.

На основании комбинаторного алгоритма МГУА для каждой водозаборной скважины были построены точечные модели, предназначенные для краткосрочного прогнозирования. Определялась зависимость между величиной понижения уровня в скважине, ее дебитом, суммарным водоотбором и временем сначала эксплуатации.

Вводились аналогичные запаздывающие аргументы на предыдущий момент. В качестве внешнего дополнения использовался критерий регулярности (213), а в качестве опорной функции — полином первой степени $\sigma=1$ с числом аргументов $l=10$, полная структура которого имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} S_j(t) = & a_{0j} + a_{1j}\bar{S}_j + a_{2j}t + a_{3j}\ln t + a_{4j}QC + \\ & + a_{5j}QC \cdot t + a_{6j}QC \ln t + a_{7j}QC/t + a_{8j}Q_j + \\ & + a_{9j}Q_j t + a_{10j}Q_j \ln t, \end{aligned} \quad (224)$$

здесь понижение уровня в j -й скважине; $S_j(t)$ — на прогнозный момент времени t , \bar{S}_j — на текущий момент времени; QC — планируемый суммарный водоотбор; Q_j — дебит j -й скважины; a_{0j}, \dots, a_{10j} — коэффициенты, определяемые комбинаторным алгоритмом МГУА; $j=1, 2, \dots, N$ — номера и число водозаборных скважин.

Для построения прогнозных моделей использовались данные, начиная с момента времени, когда депрессионная воронка достигла внешних границ пласта. Для решения задачи оптимального управления необходим прогноз на период времени, равный одному году (средняя продолжительность работы на водозаборе насосного оборудования), поэтому с целью построения модели оптимальной сложности использовались средние полугодовые значения аргументов.

Исходные данные при помощи генератора случайных чисел были разделены последовательности на A , B и C в соотношении 20:8:2. В результате зануления коэффициентов в уравнении (224) для каждой скважины был произведен полный перебор 2047 моделей. По минимуму критерия (213) на последовательности B были выбраны модели оптимальной сложности. При этом величина среднеквадратического отклонения по всем точкам исходных данных не превышала 3—5 %.

В качестве примера приведем модель оптимальной сложности для определения понижения уровня воды в скв. 19, вскрывающей основной водоносный горизонт. Данные наблюдений, которые использовались при построении такой модели, приведены в табл. 42 и на рис. 82, a , b .

По минимуму критерия (213) выбрана модель оптимальной сложности. После определения коэффициентов этой модели по

Таблица 42

Исходные данные для построения модели оптимальной сложности по уравнению (224)

Номер точки	Время с начала эксплуатации t , сут	Суммарный водоотбор QC , м ³ /сут	Дебит скважины Q , м ³ /сут	Понижение уровня воды в скважине		Абсолютная погрешность, м
				фактическое S_F , м	расчетное S_P , м	
1	2190	21 150	320	90,76	98,75	7,99
2	2372	27 835	605	116,23	116,51	0,28
3	2555	35 270	1680	124,78	128,69	3,91
4	2738	34 280	1400	129,20	130,28	1,08
5	2920	32 730	800	130,71	128,76	1,95
6	3102	34 000	1000	130,35	130,81	0,46
7	3285	36 790	700	129,87	127,58	2,29
8	3468	34 520	770	126,99	127,36	0,37
9	3650	33 355	500	125,30	128,44	3,14
10	3832	36 680	500	129,22	130,65	1,43
11	4015	32 640	500	129,54	134,17	4,63
12	4198	31 820	450	129,98	135,79	5,81
13	4380	42 720	890	145,47	137,22	8,25
14	4562	38 190	1000	148,99	146,36	2,63
15	4745	38 960	1000	147,85	148,95	1,10
16	4927	38 630	1300	165,96	154,06	11,90
17	5110	39 240	1420	158,71	161,76	3,05
18	5292	32 825	1150	171,08	167,04	4,04
19	5475	34 350	1330	169,43	166,80	2,63
20	5653	43 270	1500	156,82	161,39	4,57
21	5840	40 770	1000	165,15	163,29	1,86
22	6022	36 720	1000	170,00	167,49	2,51
23	6205	47 260	850	170,21	169,78	0,43
24	6388	51 350	600	176,74	170,19	6,55
25	6570	51 080	900	175,71	177,82	2,09
26	6752	54 950	850	179,94	180,72	0,76
27	6935	46 120	810	172,33	178,48	6,15
28	7118	42 555	350	178,37	181,24	2,87
29	7300	43 500	620	182,88	180,48	2,40
30	7482	37 189	950	186,82	188,64	1,82

Примечание. Точки последовательности: проверочной — 2, 5, 8, 10, 19, 22, 25, 28; экзаменационной — 29, 30.

всем опытным точкам она будет иметь следующий вид:

$$S = 115,23 + 0,248\bar{S} + (3,356 \cdot 10^{-7}t - 2,308 \cdot 10^{-4} \ln t) QC + + 1,084 \cdot 10^{-2}Q. \quad (225)$$

Величина критерия составила $K_p = 0,000441$, что говорит о хорошей прогнозирующей способности модели (погрешность на проверке 2,1 %, на экзамене — 1,15 %, среднеквадратическая на всех точках — 3,55 %). Полученная модель изображена на графике (рис. 82, б), а величины абсолютной погрешности в каждой точке приведены в табл. 42.

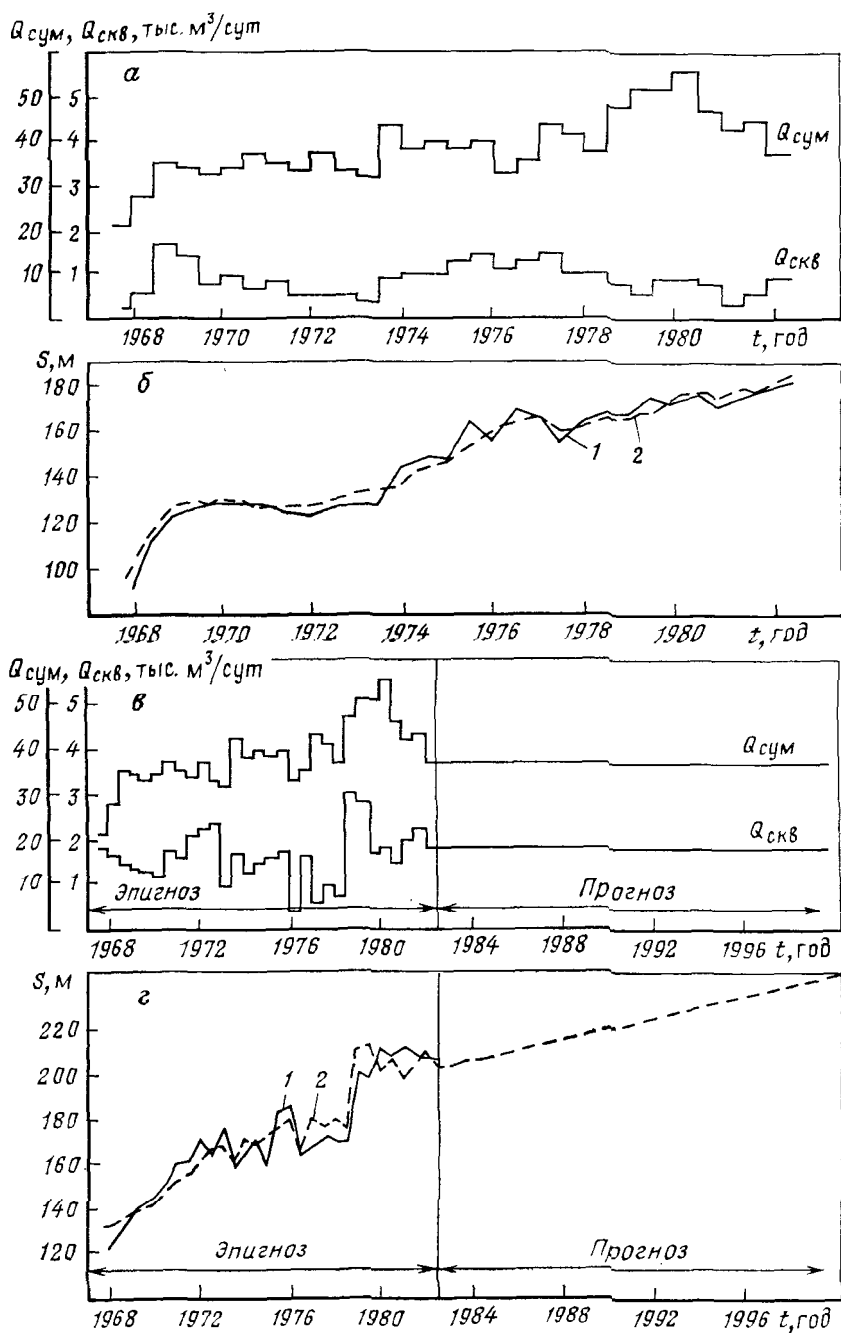


Рис. 82. Исходные данные для построения модели оптимальной сложности краткосрочного (а, б) и долгосрочного (в, г) гидродинамических прогнозов. По В. И. Угорцу

$Q_{скв}$, $Q_{сум}$ — графики изменения дебита скважины и суммарного водоотбора; кривые изменения понижений уровня подземных вод: 1 — фактического; 2 — модельного

Для гидрогеохимического краткосрочного прогноза строились аналогично гидрогеохимические модели путем выявления функциональной связи между минерализацией отбираемой воды и дебитом скважин $M=f(Q)$. Рассматривались полиномиальные модели типа

$$M = a_0 + a_1 Q + a_2 Q^2 + \dots + a_p Q^p, \quad (226)$$

где p — максимальная степень полинома. Примеры построения таких моделей приведены в главе 9.

Построение гидродинамических моделей по МГУА для долгосрочного прогнозирования

Построение моделей на основе данных эпигноза (предыстория некоторого процесса), способных хорошо работать, в будущем — трудоемкая задача. Это объясняется тем, что по имеющимся экспериментальным данным можно построить большое число моделей, дающих на интервале интерполяции хорошую сходимость с фактическими результатами. Однако на интервале экстраполяции они будут давать расходящийся веер решений, из которых только одно отвечает истинному ходу моделируемого процесса. Его можно найти при использовании критерия баланса переменных (215), согласно которому связь, установленная между переменными по заданным экспериментальным точкам в интервале интерполяции, выполняется и на интервале экстраполяции, т. е. в области прогноза. Если такой закон действительно существует и остается постоянным, то критерий баланса переменных обеспечивает точные долгосрочные прогнозы.

Пусть $\Phi(x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)) = 0$ — функция баланса (иначе, закон), связывающая переменные $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$. Из всех возможных прогнозирующих моделей для переменных $x_j(t)$ нужно выбрать такую систему, для которой на интервале экстраполяции (в окрестностях точки прогноза) эта будет наилучшей. Нарушение закона характеризуется величинами дебаланса

$$b_i = \Phi(x_1(t_i), x_2(t_i), \dots, x_n(t_i)),$$

которые рассчитываются для точек, принадлежащих интервалу экстраполяции, по различным прогнозирующим моделям для каждой переменной $x_j(t)$. Лучшей моделью считается та, для которой критерий баланса переменных будет равен

$$K_6 = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n b_{ji} = \min, \quad (227)$$

где $j=1, 2, \dots, n$ — число переменных; $i=1, 2, \dots, m$ — число временных интервалов в области прогноза.

Виды K_6 и способы их построения подробно изложены в [18]. Здесь рассмотрим K_6 в виде кольца разностей прямых и обратных функций в случае, когда связь переменных известна. Этот критерий использовался нами в решении задачи. Допустим, например, что для трех взаимосвязанных переменных заданы несмещенные законы $x_1 = f_{1-1}(x_2, x_3)$, $x_2 = f_{2-2}(x_1, x_3)$ и $x_3 = f_{3-3}(x_1, x_2)$, а функции f_{1-1} , f_{2-2} и f_{3-3} (называемые ниже прямыми) простые и допускают обратные определения переменных. Находим из первого уравнения обратную функцию $x_3 = f_{1-3}(x_1, x_2)$, из второго $x_1 = f_{2-1}(x_2, x_3)$, из третьего $x_2 = f_{3-2}(x_1, x_3)$. Первый индекс указывает номер уравнения, второй — номер определяемой переменной. Поскольку прямые и обратные законы точны, то имеем $f_{1-1} = f_{2-1}$; $f_{2-2} = f_{3-2}$; $f_{3-3} = f_{1-3}$. Критерий баланса переменных требует, чтобы

$$B = \sum_{i=1}^m (b_{1i}^2 + b_{2i}^2 + b_{3i}^2) = \min, \quad (228)$$

где b_{1i}^2 , b_{2i}^2 , b_{3i}^2 — квадраты невязок, равные

$$b_{1i}^2 = (f_{1-1} - f_{2-1})_i^2; \quad b_{2i}^2 = (f_{2-2} - f_{3-2})_i^2; \quad b_{3i}^2 = (f_{3-3} - f_{1-3})_i^2.$$

В задачах, где прогнозируемые переменные несвязанные, возможно искусственное расширение множества переменных за счет дополнения их временными рядами из исходных переменных по выбранному закону. Например, имеем временной ряд значений только одной переменной величины. Система уравнений образуется искусственно при помощи возведения в квадрат и извлечения квадратного корня из этой переменной:

прямые функции

$$\begin{aligned} x_1 &= x_2 = f_{1-1}(t); \\ x_2 &= x_1^2 = f_{2-2}(t); \\ x_3 &= \sqrt{x_1} = f_{3-3}(t); \end{aligned}$$

обратные функции

$$\begin{aligned} x_1 &= \sqrt{x_2} = f_{2-1}(t); \\ x_2 &= (x_3)^4 = f_{3-2}(t); \\ x_3 &= \sqrt{x_1} = f_{1-3}(t). \end{aligned}$$

Тогда критерий (227) может быть принят равным сумме квадратов разностей прямых и обратных функций при

$$\begin{aligned} b_{1i}^2 &= (f_{1-1} - f_{2-1})_i^2 = [x_1 - \sqrt{x_2}]_i^2; \\ b_{2i}^2 &= (f_{2-2} - f_{3-2})_i^2 = [x_2 - (x_3)^4]_i^2; \\ b_{3i}^2 &= (f_{3-3} - f_{1-3})_i^2 = [x_3 - \sqrt{x_1}]_i^2. \end{aligned} \quad (229)$$

Рассмотрим построение гидродинамических моделей для долгосрочного прогноза применительно к сложным гидрогеологическим условиям. Под такой моделью будем понимать зависимость величины понижения уровня воды в водозаборной скважине от времени, расхода самой скважины и суммарного водоотбора, выраженной в виде алгебраического полинома типа

$$S = a_0 + a_1 t + a_2^2 \ln t + a_3 QC + a_4 QCt + a_5 QC \ln t + a_6 QC/t + a_7 Q + a_8 Qt + a_9 Q \ln t. \quad (230)$$

Величины дебита скважины Q и суммарного водоотбора QC , переменные в период эпигноза, будем считать постоянными или изменяющимися по определенному (заранее заданному) закону в период прогноза. Тогда алгоритм построения и выбора модели оптимальной сложности может быть представлен следующим образом.

1. В результате последовательного зануления коэффициентов в полиноме (230) формируется таблица постепенного усложнения моделей, аналогичная той, которая приведена на рис. 81, а.

2. По результатам экспериментальных данных на интервале интерполяции $\{T_0, T_1\}$ по методу наименьших квадратов оцениваются коэффициенты моделей-претендентов.

3. Формируется критерий баланса переменных K_6 в виде кольца разностей прямых и обратных функций. С этой целью вводятся искусственные переменные $S_{1i} = S_i^2$ и $S_{2i} = \sqrt{S_i}$. Тогда $b_{1i}^2 = (f_{1-1} - f_{2-1})_i^2$, $b_{2i}^2 = (f_{2-2} - f_{3-2})_i^2$, $b_{3i}^2 = (f_{3-3} - f_{1-3})_i^2$, где $f_{1-1} = S$, $f_{2-2} = S_1$, $f_{3-3} = S_2$, $f_{2-1} = \sqrt{S_1}$, $f_{3-2} = (S_2)^4$, $f_{1-3} = \sqrt{S}$.

4. Проводится прогноз по каждой модели на интервале экстраполяции $\{T_1, T_2\}$ и определяются прогнозные величины S_i , S_{1i} , S_{2i} .

5. Рассчитывается K_6 типа (227) применительно к каждой модели для прогнозного интервала времени $\{T_1, T_2\}$:

$$K_6 = \frac{\sum_{i=T_1}^{T_2} (s - \sqrt{S_1})_i^2}{\sum_{i=T_1}^{T_2} S_i^2} + \frac{\sum_{i=T_1}^{T_2} (S_1 - (S_2)^4)_i^2}{\sum_{i=T_1}^{T_2} S_{1i}^2} + \frac{\sum_{i=T_1}^{T_2} (S_2 - \sqrt{S})_i^2}{\sum_{i=T_1}^{T_2} S_{2i}^2}. \quad (231)$$

С целью сокращения вычислений при расчете (231) предлагается по минимуму критерия несмещенности отобрать по 10 наиболее несмещенных моделей $S = f(t, QC, Q)$, $S_1 = f_1(t, QC, Q)$ и $S_2 = f_2(t, QC, Q)$ и в результате перебора 10^3 моделей-претендентов по минимуму (231) выбрать модель оптимальной сложности.

В качестве примера приведем модель для долгосрочного прогноза понижения уровня в скв. 13, вскрывающей основной

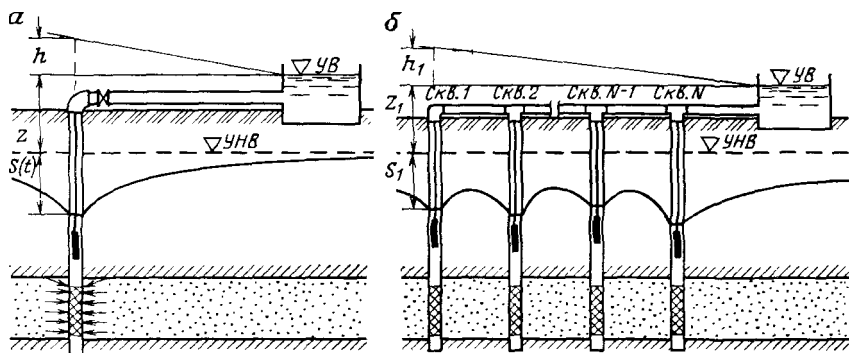


Рис. 83. Схемы одиночного водозабора (а) и линейного ряда скважин, соединенных одним сборным водоводом и резервуаром (б).

УВ — уровень воды в резервуаре; УНВ — уровень напорных вод

водоносный горизонт. Исходные данные режимных наблюдений приведены на рис. 82, а, г. В результате зануления коэффициентов в полиноме (230) было построено 1023 частных моделей, из которых при прогнозе $T_2 - T_1 = 17,5$ года по минимуму критерия (231) в качестве лучшей выбрана следующая:

$$S = 16,81 \ln t + (1,086 \cdot 10^{-4} \ln t - 2,628/t) QC + \\ + (2,185 \cdot 10^{-6} t - 1,553 \cdot 10^{-4} \ln t) Q. \quad (232)$$

Графически эта модель изображена на рис. 82, г. Величина среднеквадратического отклонения на интервале эпигноза составила 4,4 %, K_6 , рассчитанный на точки прогноза, — $6,49 \cdot 10^{-4}$, а среднеквадратическая погрешность прогноза — 8,0 %. Аналогичные модели были получены и для других скважин водозабора, на основе реализованной на ЭВМ БЭСМ-6 вычислительной программы «БАЛАНС».

ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ ГИДРАВЛИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ПЛАСТ — СКВАЖИНЫ — НАСОСЫ — ВОДОВОДЫ

Подземные водозаборы, как правило, состоят из большого числа скважин, соединенных между собой системой сборных водоводов, по которым вода от скважин с помощью насосов подается сначала в сборный резервуар, а потом к потребителю. Это единая гидравлическая система, поэтому любые изменения, происходящие на водозаборе и в зоне его влияния (изменение гидрогеологических условий на границах пласта, гидравлических параметров системы сбора и подачи воды и т. п.), приводят к перераспределению нагрузок между скважинами и изменению их расхода. Это учитывается при оптимальном управлении текущим режимом эксплуатации водозабора на стадии эксплуатационной разведки.

Рассмотрим математические модели работы такой гидравлической системы на примерах: одиночного водозабора (скважины) (рис. 83, *а*); группового, представленного линейным рядом скважин, подающих воду в один сборный резервуар (рис. 83, *б*).

Модель одиночного водозабора

Простейшая схема подачи воды от скважины по напорному водоводу в сборный резервуар показана на рис. 83, *а*. В этом случае насос, установленный в скважине, должен развивать напор, равный

$$H = z + S + h. \quad (233)$$

Здесь H — полная высота подъема воды из скважины; z — геометрическая высота подъема воды, равная разности отметок между уровнем воды в резервуаре и уровнем статического горизонта; h — гидравлические потери напора в водоводе на участке от насоса до точки подачи воды; S — понижение уровня воды в скважине, определяемое по формуле

$$S = Q(R_0 + \xi_c)/4\pi km, \quad (234)$$

где R_0 — фильтрационное сопротивление водоносного пласта; ξ_c — дополнительное сопротивление на несовершенство водозаборной скважины по степени и характеру вскрытия пласта.

Формулу (234) удобнее переписать в виде

$$S = Q/q, \quad (235)$$

где $q = 4\pi km/R_0 + \xi_c$ — удельный дебит скважины.

Гидравлические потери напора на участке водовода от насоса до резервуара составляют

$$h = (\bar{s}_\tau + \bar{s}_\text{в}) Q^2, \quad (236)$$

где \bar{s}_τ и $\bar{s}_\text{в}$ — сопротивления водоподъемных труб и водовода соответственно, зависящие от длины и диаметра водоводов.

Подставив формулы (235) и (236) в уравнение (233), получим величину необходимого водоподъема

$$H = z + Q/q + (\bar{s}_\tau + \bar{s}_\text{в}) Q^2. \quad (237)$$

Величина напора, создаваемого насосом, который эксплуатируется в пределах рабочей области характеристики Q — H погружного насоса, может быть описана уравнением

$$H = H_\text{н} - \bar{s}_\text{н} Q^2, \quad (238)$$

где $H_\text{н}$ и $\bar{s}_\text{н}$ — аналитические параметры характеристики Q — H , геометрическое изображение которой для одного из погружных насосов приведено на рис. 84.

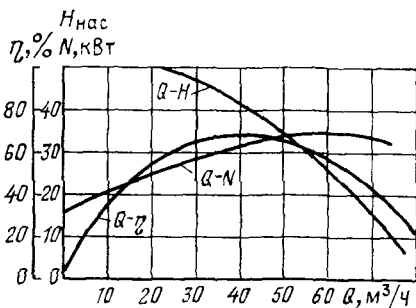


Рис. 84. Характеристики погружного центробежного насоса ЭЦВ 8-40-165

По формуле (229) определяются дебиты скважин и группового водозабора, соединенных самотечным водоводом. Удельное сопротивление $\bar{s}_в$ в этом случае равно нулю.

Модель группового водозабора

Математическая модель водозабора представлена линейным рядом скважин, подающих воду в один сборный водовод (см. рис. 83, б). Напор, требуемый для подачи воды в количестве Q_j из любой j -й скважины на заданную отметку, определяется по формуле (236) при гидравлических потерях напора воды, составляющих

$$h_j = \bar{s}_{Tj} Q_j^2 + \sum_{k=j}^N \left[\bar{s}_{вк} \left(\sum_{i=1}^k Q_i \right)^2 \right], \quad (240)$$

где $j=1, 2, \dots, N$ — порядковый номер и число водозаборных скважин.

Приравнявая его к величине напора, создаваемого насосом (238), получим в общем виде математическую модель всей системы

$$H_{nj} - z_j - \sum_{k=j}^N \left[\bar{s}_{вк} \left(\sum_{i=1}^k Q_i \right)^2 \right] - (\bar{s}_{Tj} + \bar{s}_{нj}) Q_j^2 - S_j = 0. \quad (241)$$

Такие модели используются при проектировании систем водоснабжения. Они рассмотрены в работах В. С. Алексеева, М. И. Васильева, Р. Х. Каримова, Г. М. Коммунара, Н. А. Плотникова и обобщены в [29].

Интерес в модели (241) представляют гидродинамические зависимости понижения уровня в j -й скважине от величин дебитов водозаборных скважин и времени эксплуатации $S_j = f(t, Q_j)$. При решении задачи оптимизации они должны отличаться двумя особенностями: наиболее полно учитывать все гидрогеологические условия эксплуатации и быть не слишком

После подстановки (238) в уравнение (237) и решения относительно Q получаем

$$Q_n = \left[\sqrt{(1/q)^2 + 4(H_n - z)} \times \right. \\ \left. \times (\bar{s}_T + \bar{s}_в + \bar{s}_н) - \right. \\ \left. - 1/q \right] / 2 (\bar{s}_T + \bar{s}_в + \bar{s}_н), \quad (239)$$

где Q_n — производительность используемого насоса при заданных гидравлических параметрах системы водоводов.

сложными. Первое требование обуславливается необходимостью точного определения величины понижения уровня в течение эксплуатации. От нее зависят дебиты водозаборных скважин, глубина погружения насоса под уровень подземных вод, длина водоподъемных труб и гидравлические потери напора в них. Простота гидродинамической модели связана с тем, что полная математическая модель всей гидравлической системы пласт — скважины — насосы — водоводы без учета величины понижения S_j весьма сложна и нелинейна относительно величины дебитов скважин Q_j .

Поэтому полезно использовать простые аналитические зависимости типа

$$S_j(t) = A_j + B_j Q_j. \quad (242)$$

Коэффициенты таких зависимостей определяются с помощью либо индуктивных методов самоорганизации моделей на ЭВМ при построении нефизических моделей для краткосрочных прогнозов (рассмотрено ниже), либо метода эквивалентных расчетных схем с обобщенными параметрами с целью построения полуфизических моделей для долгосрочных прогнозов (рассмотрено в [7, 10]).

В первом случае коэффициенты A_j и B_j с учетом полного полинома (223) устанавливаются по выражениям

$$A_j = a_{0j} + a_{1j} \bar{S}_j + a_{2j} t + a_{3j} \ln t + a_{4j} QC + a_{5j} QC \cdot t + a_{6j} QC \cdot \ln t + \\ + a_{7j} QC/t, \quad (243)$$

$$B_j = a_{8j} + a_{9j} t + a_{10j} \ln t. \quad (244)$$

Тогда в окончательном виде математическая модель гидравлической системы пласт — скважины — насосы — водоводы может быть записана следующим образом:

$$(\bar{s}_{Tj} + \bar{s}_{Hj}) Q_j^2 + \sum_{k=j}^N \left[\bar{s}_{Bk} \left(\sum_{i=1}^k Q_i \right)^2 \right] + B_j Q_j + (A_j + z_j - H_{Hj}) = 0. \quad (245)$$

В качестве примера рассмотрим модель линейного водозабора, состоящего из четырех эксплуатационных скважин, подающих воду по напорному водоводу в сборный резервуар (см. рис. 83, б). Все скважины эксплуатируются погружными электронасосами типа ЭЦВ-10-63-110; геометрические характеристики водоводов приведены в табл. 43. Величины сопротивлений участков сборного водовода \bar{s}_{Bj} и водоподъемных труб \bar{s}_{Tj} , рассчитанные для бывших в употреблении стальных трубопроводов, по их геометрическим размерам приведены в табл. 44. Здесь даны аналитические характеристики погружного насоса H_{Hj} и s_{Hj} , гидродинамические параметры A_j и B_j моделей типа (243) и (244), рассчитанные для текущего времени эксплуата-

Т а б л и ц а 43

Геометрические размеры водоводов

Номер скважины, участков водовода	Диаметр сборного водовода, мм	Длина сборного водовода на участке, м	Диаметр водоподъемных труб, мм	Длина водоподъемных труб, м
1	200	1500	150	100
2	225	1500	150	100
3	250	1500	150	100
4	300	1500	150	100

Т а б л и ц а 44

Гидравлические характеристики модели водозабора

Номер скважины	$\bar{s}_{Bj} \cdot 10^{-7},$ сут ² /м ⁵	$\bar{s}_{Tj} \cdot 10^{-7},$ сут ² /м ⁵	$\bar{s}_{Hj} \cdot 10^{-5},$ сут ² /м ⁵	$H_{Hj},$ м	$z_j,$ м	$B_j \cdot 10^{-2},$ сут/м ²	$A_j,$ м
1	18,627	6,021	1,66	144	20,0	1,475	51,07
2	9,685	6,021	1,66	144	14,1	1,389	50,35
3	5,184	6,021	1,66	144	10,6	1,301	52,20
4	1,886	6,021	1,66	144	6,1	1,504	55,74

ции, и разность между отметками уровня воды в сборном резервуаре и статическим уровнем z_j .

Математическая модель водозабора в виде системы уравнения (245) имеет вид

$$\left. \begin{aligned} &(\bar{s}_{T1} + \bar{s}_{H1}) Q_1^2 + \bar{s}_{B1} Q_1^2 + \bar{s}_{B2} \left(\sum_{i=1}^2 Q_i \right)^2 + \bar{s}_{B3} \left(\sum_{i=1}^3 Q_i \right)^2 + \bar{s}_{B4} \left(\sum_{i=1}^4 Q_i \right)^2 + B_1 Q_1 + (A_1 + z_1 - H_{H1}) = 0; \\ &(\bar{s}_{T2} + \bar{s}_{H2}) Q_2^2 + \bar{s}_{B2} \left(\sum_{i=1}^2 Q_i \right)^2 + \bar{s}_{B3} \left(\sum_{i=1}^3 Q_i \right)^2 + \bar{s}_{B4} \left(\sum_{i=1}^4 Q_i \right)^2 + B_2 Q_2 + (A_2 + z_2 - H_{H2}) = 0; \\ &(\bar{s}_{T3} + \bar{s}_{H3}) Q_3^2 + \bar{s}_{B3} \left(\sum_{i=1}^3 Q_i \right)^2 + \bar{s}_{B4} \left(\sum_{i=1}^4 Q_i \right)^2 + B_3 Q_3 + (A_3 + z_3 - H_{H3}) = 0; \\ &(\bar{s}_{T4} + \bar{s}_{H4}) Q_4^2 + \bar{s}_{B4} \left(\sum_{i=1}^4 Q_i \right)^2 + B_4 Q_4 + (A_4 + z_4 - H_{H4}) = 0. \end{aligned} \right\}$$

Решая такую систему относительно дебитов скважин Q_i методом последовательного приближения для гидравлических характеристик водозабора, приведенных в табл. 44, получим сле-

дующие расходы скважин: $Q_1=1254$ м³/сут, $Q_2=1447$ м³/сут, $Q_3=1598$ м³/сут и $Q_4=1701$ м³/сут. Величина суммарного водоотбора составит $Q_{\text{сум}} = \sum_{i=1}^4 Q_i = 6000$ м³/сут. Таким образом, используя математические модели типа (245), можно решить ряд практических задач.

1. Определить текущие дебиты водозаборных скважин при заданных гидравлических параметрах водоводов $\bar{s}_{тj}$ и $\bar{s}_{вj}$, характеристиках используемого насосного оборудования $\bar{s}_{нj}$ и $H_{нj}$ и гидродинамических параметрах пласта (в обобщенном виде) A_j и B_j .

2. Уточнить в процессе эксплуатации водозабора его гидравлические параметры — величины сопротивлений участков сборного водовода $\bar{s}_{вj}$, используемые при решении задачи оптимизации.

3. Подобрать рациональное насосное оборудование (характеристики насосов $\bar{s}_{нj}$ и $H_{нj}$) для реализации оптимального распределения дебитов между водозаборными скважинами.

УПРАВЛЕНИЕ РЕЖИМОМ ЭКСПЛУАТАЦИИ ДЕЙСТВУЮЩЕГО ВОДОЗАБОРА

Критерии выбора оптимального режима

На стадии эксплуатационной разведки месторождения подземных вод ставится задача управления режимом работы действующего водозабора с целью максимального продления срока его эксплуатации при заданном суммарном водоотборе. Такое управление осуществляется постоянным через заданные периоды оптимальным распределением дебитов между водозаборными скважинами и выбором рационального насосного оборудования в течение всего периода эксплуатации месторождения. Оно может выполняться на основе долгосрочного и краткосрочного прогноза. При долгосрочном прогнозе оптимальные значения расходов скважин определяются на основе предшествующего опыта их работы на весь период эксплуатации (или крупный его этап), продолжительность которого также является искомой величиной. По мере эксплуатации оптимальный режим каждый раз уточняется на основе долгосрочных гидрогеологических прогнозов, также уточняется и возможный срок эксплуатации всего месторождения в целом.

При краткосрочном прогнозе оптимальное распределение дебитов скважин определяется на срок, соизмеримый с возможной продолжительностью работы данного насосного оборудования (нередко 1—1,5 года). С учетом этого одновременно устанавливается оптимальный режим работы водозабора на весь следующий срок его эксплуатации, при этом уточняется и этот срок.

Выбор рационального насосного оборудования осуществляется на основе только краткосрочного прогнозирования.

Для выбора оптимального режима эксплуатации водозабора могут применяться различные подходы и связанные с ними критерии оптимальности, учитывающие гидрогеологические, технико-экономические, санитарно-гигиенические и другие показатели. Рассмотрим гидрогеологические и технические аспекты эксплуатации месторождения подземных вод. Экономические условия — минимальные эксплуатационные затраты на добычу воды — будем учитывать при выборе насосного оборудования, работающего в режиме оптимального КПД. Будем считать, что санитарно-гигиенические и экологические условия заданы и соблюдаются. Одним наиболее общим подходом является условие оптимальности, требующее при заданной величине суммарного водоотбора максимального продления срока эксплуатации водозабора. Целесообразно, чтобы это происходило при одновременном достижении в водозаборных скважинах уровней воды предельно допустимых значений, обусловленных, помимо гидрогеологических, санитарно-гигиенических и экологических условий, характером используемого насосного оборудования. Такой подход на стадии эксплуатационной разведки наиболее полный и требует установления на основе долгосрочных прогнозов не только оптимального распределения дебитов, но и максимального периода эксплуатации водозабора.

Другой подход связан с обеспечением такого режима работы водозабора, при котором в течение всей эксплуатации соблюдается наиболее пропорциональная по всей площади месторождения сработка эксплуатационных запасов подземных вод относительно величин предельно допустимых понижений. Использование такого критерия позволяет определить оптимальное распределение дебитов на любой момент времени $t \leq T_{\text{экс}}$, применяя для этого как долгосрочные, так и краткосрочные прогнозы. Последовательное применение такого подхода в течение всего срока работы водозабора приведет к концу его эксплуатации к формированию наибольшей депрессионной воронки, что при заданном суммарном водоотборе и обеспечит максимально возможный период эксплуатации водозабора и всего месторождения в целом.

Формулировка общего критерия оптимальности. Необходимо отыскать такие дебиты водозаборных скважин Q_i , при которых срок их эксплуатации T максимален, понижения уровней воды $S_j(T)$ в j -й водозаборной скважине не превышают предельно допустимых значений S_j^* , качество M_i отбираемой воды не превышает предельно допустимых значений основных показателей M^* , дебиты скважин находятся в возможных пределах их изменения Q_{\min} , Q_{\max} в соответствии с гидрогеологическими и техническими условиями эксплуатации скважин и насосного оборудования и в сумме обеспечивают планируемый суммарный водоотбор $Q_{\text{сум}}$. При этом в общем случае предполагаем, что задан-

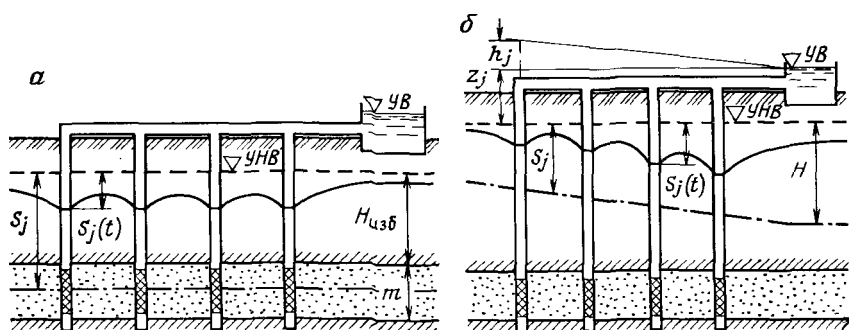


Рис. 85. Схемы линейного водозабора, когда величины предельно допустимых понижений уровней в скважинах определяются глубиной залегания водоносного горизонта (а) и максимальной высотой подъема воды насосом (б)

ные экологические и санитарно-гигиенические требования учтены при определении S_j^* и M^* . Математически условие оптимальности (209)–(211) в общем виде может быть записано: требуется найти такое распределение дебитов Q_i между водозаборными скважинами и срок их эксплуатации T , чтобы величина критерия

$$F = T \rightarrow \max \quad (246)$$

стремилась к максимуму при соблюдении следующих ограничений:

$$\sum_{i=1}^N Q_i = Q_{\text{сум}}; \quad S_j(T) \leq S_j^*; \quad \sum_{i=1}^N M_i Q_i \leq M^* Q_{\text{сум}}; \quad Q_{\min, i} \leq Q_i \leq Q_{\max, i}. \quad (247)$$

В скважинах значения S_j^* определяются либо глубиной залегания водоносного горизонта, либо максимальной высотой водоподъема используемого насосного оборудования. В первом случае, когда максимальная величина сработки уровня подземных вод меньше возможной высоты подъема насоса $H_{\text{нзб}} + 0,5m \leq H_{\text{нас}}$ (рис. 85, а), величина S_j^* определяется так:

$$S_j^* = H_{\text{нзб } j} + 0,5m_j, \quad (248)$$

где $H_{\text{нзб } j}$ — избыточный напор воды в j -й скважине над кровлей пласта; m_j — мощность пласта.

Во втором случае, когда $H_{\text{нзб}} + 0,5m > H_{\text{нас}}$ (рис. 85, б), величина S_j^* рассчитывается как

$$S_j^* = H_{\text{нас}} - z_j - h_j, \quad (249)$$

где z_j — расстояние от положения статического уровня в j -й скважине до расчетной точки подъема воды; h_j — гидравличе-

ские потери напора воды в сборном водоводе, определяемые по формуле (240). Следовательно, будем иметь

$$S_j^* = H_{\text{нас}} - z_i - \sum_{k=j}^N \left[\bar{s}_{\text{вк}} \left(\sum_{i=1}^k Q_i \right)^2 \right] - \bar{s}_T Q_j^2, \quad (250)$$

где \bar{s}_{Tj} , $\bar{s}_{\text{вк}j}$ — полные величины сопротивления водоподъемных труб и сборного водовода соответственно.

Таким образом, величина S_j^* в j -й скважине во втором случае весьма существенно зависит от гидравлических потерь напора в сборном водоводе, которые нелинейным образом связаны с дебитом всех водозаборных скважин. Как показали наши исследования, неучет таких потерь может привести к значительным погрешностям в расчетах: величина максимального периода эксплуатации оказывается в некоторых случаях завышенной по сравнению с действительной на 5—7 лет, а погрешность в определении дебитов отдельных скважин достигает 1500 м³/сут (или 50 %). Система (247), при условии выполнения уравнения (250) для гидродинамических моделей физического типа, или (230) относится к задачам математического программирования с довольно сложной структурой. Это связано с тем, что: 1) в качестве неизвестных рассматриваются не только Q_i , но и T ; 2) величины S_j нелинейны относительно времени T ; 3) величины S_j^* нелинейны относительно Q_i ; 4) величина минерализации воды в скважине в общем виде зависит от дебита Q_i и времени T : $M_i = f(Q_i, T)$. Решение такой системы трудоемко, особенно для водозаборов с большим числом эксплуатационных скважин. В наших исследованиях оно получено с использованием ЭВМ на основе разработанного в Институте кибернетики АН УССР модифицированного метода нелинейного программирования с управляемыми процессами отработки ограничений и движения к экстремуму, реализованного в виде вычислительной программы ОРТИМ и рассмотренного в работе Л. М. Бойчука в 1978 г.

Упрощение общего критерия оптимальности и его разновидности. Более простой вид названного выше общего критерия оптимальности может быть получен, если из него исключить неизвестную величину срока эксплуатации T , а оптимальное распределение дебитов получить путем подбора на различных фиксированные моменты $t \leq T$. Это можно осуществить следующими двумя приемами. В первом в качестве критерия рассматривается условие практически одновременного достижения в эксплуатационных скважинах уровнями воды предельно допустимых значений. При этом извлекается наибольшее количество подземной воды, что при заданной величине $Q_{\text{сум}}$ приводит к максимальному продлению срока эксплуатации водозабора. Математически это выполняется при условии определения

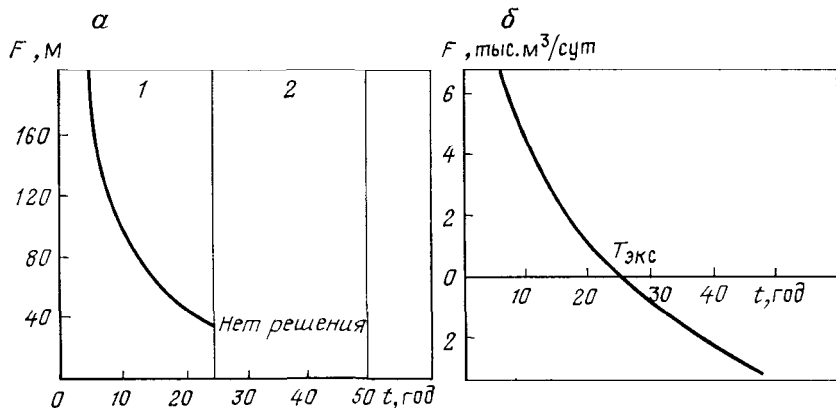


Рис. 86. Кривые изменения во времени критериев оптимальности

α — область, критерия: (251)—(252): 1 — есть решение, 2 — решение отсутствует; б — область критерия (253)—(254). По В. И. Угорцу

такого распределения дебитов Q_i , чтобы

$$F = \sum_{j=1}^N (S_j^* - S_j(t)) \rightarrow \min \quad (251)$$

соблюдались ограничения

$$S_j(t) \leq S_j^*, \quad t \leq T; \quad \sum_{i=1}^N Q_i = Q_{\text{сум}}; \quad \sum_{i=1}^N M_i Q_i \leq M^* Q_{\text{сум}}; \\ Q_{\min, i} \leq Q_i \leq Q_{\max, i}. \quad (252)$$

При постепенном увеличении времени t величина критерия оптимальности F будет уменьшаться и достигнет своего минимального значения (рис. 86, α), при котором дальнейшее увеличение срока эксплуатации $t > T$ приведет к тому, что система (251)—(252) будет несовместима. Найденное минимальное значение критерия F соответствует максимальному сроку эксплуатации водозабора T и оптимальному распределению дебитов Q_i между его скважинами.

Во втором приеме в качестве оптимального принимается условие максимального совпадения расчетного и планируемого суммарного водоотборов

$$F = \sum_{i=1}^N Q_i - Q_{\text{сум}} \rightarrow \min \quad (253)$$

на различные моменты времени $t \leq T$ при ограничениях

$$S_j(t) \leq S_j^*; \quad \sum_{i=1}^N (M^* - M_i) Q_i \geq 0; \quad Q_{\min, i} \leq Q_i \leq Q_{\max, i}. \quad (254)$$

При решении этой системы с постепенным увеличением времени t величина критерия оптимальности постепенно убывает и начиная с некоторого момента времени становится отрицательной (см. рис. 86, б). Момент времени, начиная с которого $F \leq 0$, является максимальной величиной срока эксплуатации водозабора, а соответствующее этому времени распределение дебитов — оптимальным.

Возможен еще и другой способ выбора оптимального режима эксплуатации, позволяющий определять дебиты водозаборных скважин на любой прогнозный момент времени. Оптимальным считается такое распределение дебитов между скважинами, при котором на любой момент величины понижений уровней в них пропорциональны предельно допустимым значениям, а в сумме дебиты соответствуют планируемому $Q_{\text{сум}}$ [36]. С математической точки зрения требуется найти такие значения Q_i , при которых на любой момент t отношения расчетных понижений уровней по всем водозаборным скважинам к их предельно допустимым значениям наименее отличаются от среднего значения по водозабору $L = S_{\text{ср}}(t)/S_{\text{ср}}^*$ (L — коэффициент пропорциональности). Тогда

$$F = \sum_{j=1}^N (L - S_j(t)/S_j^*)^2 \rightarrow \min \quad (255)$$

при соблюдении ограничений

$$\sum_{i=1}^N Q_i = Q_{\text{сум}}; \quad \sum_{i=1}^N M_i Q_i \leq M^* Q_{\text{сум}}; \quad Q_{\min i} \leq Q_i \leq Q_{\max i}; \quad t \leq T. \quad (256)$$

Выполнение этого условия к концу эксплуатации обеспечит одновременное достижение в скважинах водозабора уровнями предельно допустимых значений и извлечение наибольшего количества воды, что при заданном $Q_{\text{сум}}$ приведет к максимальному продлению срока эксплуатации всего месторождения. Пропорциональная сработка эксплуатационных запасов будет обеспечивать также равномерную нагрузку на сборный водовод, использование однотипного насосного оборудования, постоянное качество добываемой воды в течение всего периода эксплуатации водозабора.

Величина среднего по водозабору коэффициента пропорциональности L определяется из системы уравнений, которая представляет собой частный случай системы (254) — (255) при $F=0$:

$$S_j(t) = L \cdot S_j^*; \quad \sum_{i=1}^N Q_i = Q_{\text{сум}}. \quad (257)$$

Решая эту систему методами нелинейного программирования на ЭВМ, получим оптимальное распределение дебитов в интер-

Рис. 87. Типовая кривая зависимости коэффициента пропорциональности L от времени t для расчетной схемы неограниченного пласта с обобщенными гидродинамическими параметрами. По В. И. Угорцу

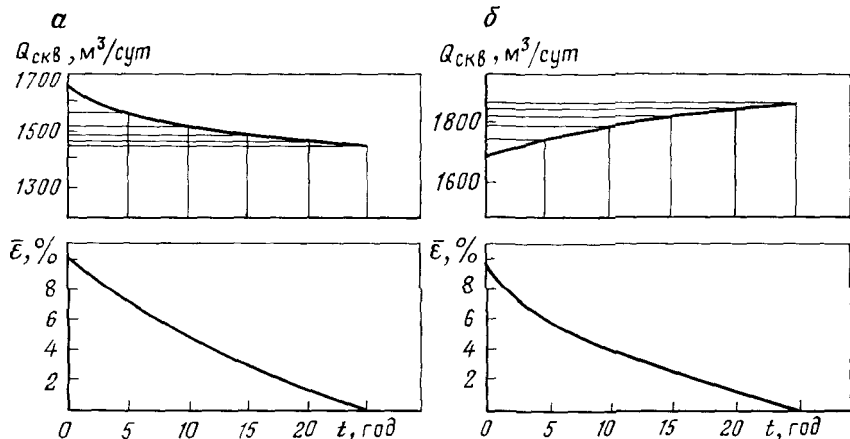
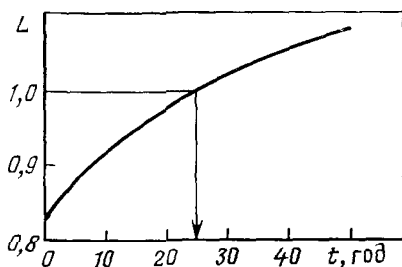


Рис. 88. Кривые зависимости оптимального дебита $Q_{скв}$ и величины погрешности ϵ от разности продолжительности прогноза. По В. И. Угорцу
а — при $L_i(t) > L_{ср}(t)$, б — при $L_i(t) < L_{ср}(t)$

вале $t - t_{пр}$, где t и $t_{пр}$ — соответственно текущее и прогнозное время эксплуатации.

Использование условия оптимальности (255) — (256) позволяет в качестве исходных гидродинамических моделей применять как долгосрочные, так и краткосрочные модели. В первом случае в качестве времени прогнозов можно брать любое время $t_{пр}$, удовлетворяющее условию

$$t \leq t_{пр} \leq T_{экс}; \quad t_{пр} \rightarrow T_{экс} \quad (258)$$

и для каждого момента времени t , $t + \Delta t$, $t + 2\Delta t$, ..., $t_{пр}$ оптимальное распределение дебитов разделять на соответствующие интервалы $[t, t_{пр}]$, $[t + \Delta t, t_{пр}]$, ..., $[t + k\Delta t, t_{пр}]$. Во втором — весь период эксплуатации делится на интервалы $[t, t + \Delta t]$, $[t + \Delta t, t + 2\Delta t]$, ..., $[t + k\Delta t, t_{пр}]$ и оптимальное распределение дебитов устанавливается каждый раз перед началом следующего интервала времени. При этом величины оптимальных дебитов зависят от $t_{пр}$ и на каждом временном интервале различны. Это

связано с тем, что величина коэффициента L является функцией от времени $L = f(t)$. На рис. 87 показан типовой график изменения $L = f(t)$ для модели неограниченного пласта с обобщенными параметрами $S = \frac{Q}{4\pi k m_{об}} \ln \frac{2 \cdot 25 a_{об} t_{пр}}{r^2}$ ($k m_{об} = 90 \text{ м}^2/\text{сут}$; $a_{об} = 1,3 \times 10^6 \text{ м}^2/\text{сут}$; максимальная высота подъема воды $H_{нас} = 100 \text{ м}$). Аналогично зависят от $t_{пр}$ и рекомендуемые оптимальные величины дебитов скважины. На рис. 88 приведены графики изменения оптимального дебита $Q_i = f(t_{пр})$ и величины погрешности $\bar{\epsilon} = |Q(t + i\Delta t) - Q(t + (i-1)\Delta t)|$ в зависимости от разной продолжительности прогноза, из которых видно, что с увеличением $t_{пр}$ погрешность ϵ убывает и достигает нуля при $t_{пр} = T_{экс}$. Из сказанного следует

1. Общее условие оптимальности является весьма сложным и трудоемким ввиду существенной нелинейности величины понижения уровня воды от времени.

2. Метод подбора максимального срока эксплуатации водозабора при использовании систем (251) — (252) и (253) — (254) значительно упрощает их решение. При условии, если $M_i \neq f(Q_i)$ и если гидравлические потери напора воды не учитываются, то задача оптимизации сводится к задаче линейного программирования, решение которой может быть получено на основе модифицированного симплекс-метода с двусторонними ограничениями. Такой критерий рекомендуется для оптимизации режима эксплуатации неглубоко расположенных водоносных горизонтов, когда возможная величина сработки уровней подземных вод оказывается меньше высоты воды подъема насоса.

3. Использование системы (255) — (256) при условии (257) позволяет определять оптимальное распределение дебитов для любого времени прогноза. Методом подбора в этом случае может быть определена и величина максимального срока эксплуатации водозабора. Критерий рекомендуется применять при оптимизации режима эксплуатации глубоких водоносных горизонтов, когда предельно допустимые значения понижений определяются максимальной высотой подъема воды насосом и необходимостью учета гидравлических потерь напора воды в сборном водоводе. Оптимальное распределение дебитов зависит от продолжительности прогноза. При $t_{пр} \ll T_{экс}$ абсолютная погрешность $\epsilon = |Q(t_{пр}) - Q(T_{экс})|$ может достигать $500 \text{ м}^3/\text{сут}$, или 15—25 %. При $t_{пр} \rightarrow T_{экс}$ определение значений оптимальных дебитов по (246) — (247) и (255) — (256) дает близкие результаты.

4. Применение первых трех критериев позволяет использовать математические модели только для долгосрочного прогнозирования, критерий (255) — (256) более универсален и позволяет использовать долгосрочные и краткосрочные гидродинамические модели.

Математическая постановка задачи оптимального управления режимом эксплуатации действующего водозабора

Математическая постановка задачи рассматривается на основе полуфизических и нефизических геолого-математических моделей, когда в качестве оптимальных используются критерии типа (246)—(247) и (255)—(256). Управление режимом работы водозабора, эксплуатирующегося погружными электронасосами, осуществляется за счет создания сети резервных скважин. Контролируя КПД насосного оборудования, некоторые водозаборные скважины переводятся в состав резервных, а находящиеся в резерве включаются в эксплуатацию и для них подбирается рациональное насосное оборудование.

Решение задачи целесообразно разделить на два этапа. На первом этапе подбираются оптимальные величины дебитов скважин на основании проведенных режимных наблюдений за подземными водами в течение всего предшествующего периода эксплуатации и гидравлическими характеристиками системы пласт — скважины — насосы — водоводы. На втором — выбирается рациональное насосное оборудование для реализации полученного на первом этапе оптимального варианта эксплуатации водозабора.

Первый этап — определение оптимальных дебитов скважин

Рассмотрим два варианта решения задачи, когда в качестве исходных используются гидродинамические модели для долгосрочного прогноза, построенные на основе метода эквивалентных расчетных схем (вариант А) и индуктивного метода самоорганизации моделей на ЭВМ (вариант В).

Для обоих вариантов заданный водозабор состоит из N эксплуатационных скважин. Прогнозный период эксплуатации водозабора разобьем на k равных временных интервалов:

$$k = T_{\text{экс}} / \Delta t, \quad (259)$$

где Δt — периодичность решения задачи, зависящая от продолжительности безаварийной работы насосного оборудования. При сроке эксплуатации насосов около 1 года и большом числе водозаборных скважин ($N \geq 15-20$) целесообразно принимать Δt равным 1 кварталу.

Для каждого текущего временного интервала $[n \cdot \Delta t, (n+1) \cdot \Delta t]$, где $n=1, 2, \dots, k$ с водозабора на ИВЦ (см. рис. 77) поступает следующая исходная информация: число резервных N_1 , эксплуатирующихся N_2 и находящихся в ремонте N_3 скважин и их номера, причем $N_1 + N_2 + N_3 = N$; Q_{0i} — текущий расход i -й скважины.

Вариант А. Вычисление оптимальных расходов скважин выполняется на основе эквивалентной расчетной схемы неограниченного пласта с обобщенными параметрами km и a .

$$S_j = \sum_{i=1}^N \frac{Q_{0i}}{4\pi km_j} \left[-E_i \left(-\frac{r_{ij}^2}{4a_j(t_{\text{прив}} + t)} \right) \right] + \sum_{i=1}^N \frac{Q_i - Q_{0i}}{4\pi km_j} \times \\ \times \left[-E_i \left(-\frac{r_{ij}^2}{4a_j t} \right) \right], \quad (260)$$

где $t_{\text{прив}}$ — приведенное время эксплуатации i -й скважины, рассчитанное как отношение объема откачанной воды с начала эксплуатации к ее текущему расходу Q_{0i} . Требуется определить какие дебиты скважин Q_i на прогнозный интервал времени $(T - n \cdot \Delta t)$, при которых выполняется условие (246) — (247). Текущие рекомендуемые дебиты находятся в заданных пределах изменения дебитов $Q_{\min i} \leq Q_i \leq Q_{\max i}$, $i = 1, 2, \dots, N_1$; $Q_i = Q_{0i}$, $i = 1, 2, \dots, N_2$; $Q_i = 0$, $i = 1, 2, \dots, N_3$. Предельно допустимое значение понижения с учетом гидравлических потерь напора вычисляется по формуле (250), а расчетная величина минерализации отбираемой воды при эксплуатации месторождения слабо-минерализованных подземных вод определяется с помощью индуктивного метода самоорганизации моделей на ЭВМ полиномиальной зависимостью $M_i = f(Q_i)$ типа (226). Тогда в окончательном математическом виде задача выбора оптимальных дебитов скважин на первом этапе будет выглядеть следующим образом: $F = T \rightarrow \max$

при выполнении ограничений

$$\sum_{i=1}^N A_{ji}(T) Q_i + \sum_{k=j}^N \left[\bar{s}_{\text{вк}} \left(\sum_{i=1}^k Q_i \right)^2 \right] + \bar{s}_{\text{тj}} Q_j^2 \leq D_j - B_j(T); \\ \sum_{i=1}^N (a_{0i} + a_{1i} Q_i + \dots + a_{pi} Q_i^p) Q_i \leq M * Q_{\text{сум}}; \\ \sum_{i=1}^N Q_i \leq Q_{\text{сум}}; \quad Q_{\min, i} \leq Q_i \leq Q_{\max, i} \quad i = 1, 2, \dots, N_1; \quad (261)$$

$$Q_i = Q_{0i}, \quad i = 1, 2, \dots, N_2; \quad Q_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N_3,$$

где

$$A_{ji}(T) = \frac{1}{4\pi km_j} \left[-E_i \left(-\frac{r_{ij}^2}{4a_j(T - n\Delta t)} \right) \right]; \\ B_j(T) = \sum_{i=1}^N \frac{Q_{0i}}{4\pi km_j} \left\{ \left[-E_i \left(-\frac{r_{ij}^2}{4a_j(t_i + (T - n\Delta t))} \right) \right] + \right. \\ \left. + \left[-E_i \left(-\frac{r_{ij}^2}{4a_j(T - n\Delta t)} \right) \right] \right\}; \\ D_j = H_{\text{нас}} - z_j. \quad (262)$$

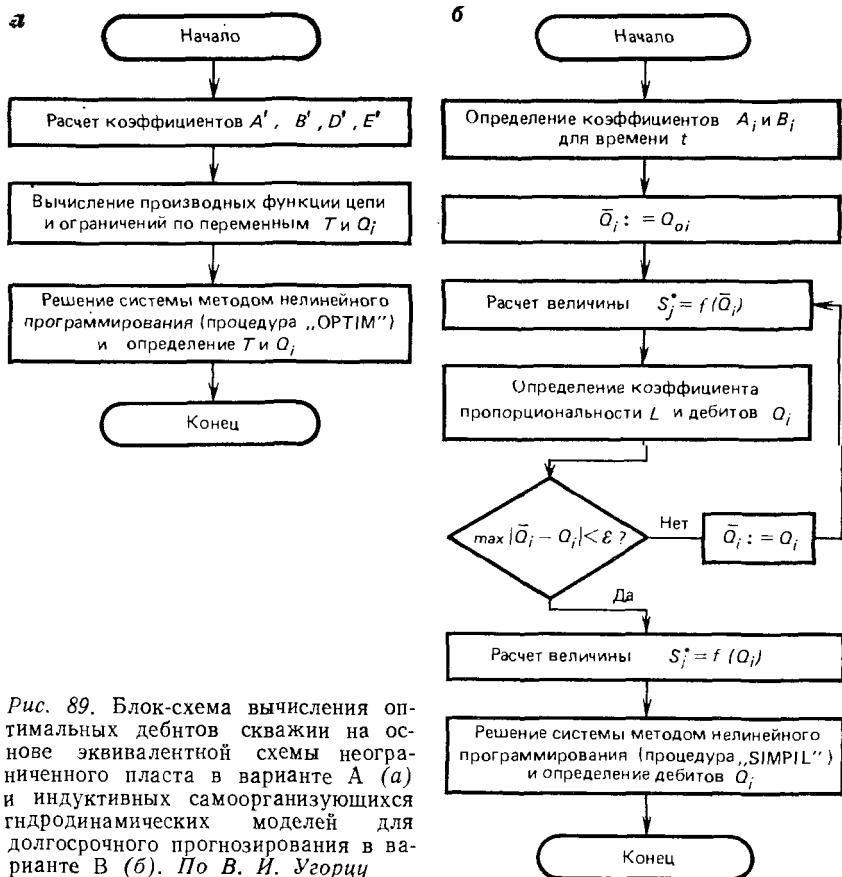


Рис. 89. Блок-схема вычисления оптимальных дебитов скважин на основе эквивалентной схемы неограниченного пласта в варианте А (а) и индуктивных самоорганизующихся гидродинамических моделей для долгосрочного прогнозирования в варианте В (б). По В. И. Угорцу

Здесь: Q_{oi} — текущий дебит i -й скважины; t_i — приведенное время эксплуатации i -й скважины с последним дебитом Q_{oi} ; km_i , a_i — обобщенные параметры пласта; $n = 1, 2, \dots, k$.

Система решается методом нелинейного программирования с управляемыми процессами отработки ограничений и движения к экстремуму, если определены первые производные функции цели и ограничений по переменным T и Q_i . С этой целью используется вычислительная программа OPTIM. Блок-схема алгоритма вычислений приведена на рис. 89, а.

Вариант В. Оптимальное распределение дебитов выполняется на основе гидродинамических и гидрогеохимических моделей типа (230) и (226), полученные по МГУА для долгосрочного прогноза. Требуется определить такое распределение дебитов скважин Q_i на прогнозный интервал времени $(T - n \cdot \Delta t)$, при котором выполняется критерий оптимальности (255) — (256), а оптимальные расходы скважин находятся в пределах изменения дебитов

для резервных скважин $Q_{\min i} \leq Q_i \leq Q_{\max i}$, $i = 1, 2, \dots, N_1$;
 для эксплуатирующихся скважин $Q_i = Q_{0i}$, $i = 1, 2, \dots, N_2$;
 для скважин, находящихся в ремонте $Q_i \approx 0$, $i = 1, 2, \dots, N_3$.

Для заданной величины прогнозного времени модель (230) представляется в более простом виде:

$$S_i(t) = A_i + B_i Q_i. \quad (263)$$

Здесь

$$A_i = a_{0i} + a_{1i}t + a_{2i} \ln t + a_{3i}Q_{\text{сум}} + a_{4i}Q_{\text{сум}}t + a_{5i}Q_{\text{сум}} \ln t + a_{6i}Q_{\text{сум}}/t;$$

$$B_i = a_{7i} + a_{8i}t + a_{9i} \ln t.$$

Критерий оптимальности (255) — (256) с учетом (257) и (263) преобразуется в задачу нелинейного программирования

$$F = d_0 + d_1 Q_1 + \dots + d_N Q_N + d_{N+1} Q_1^2 + \dots + d_{2N} Q_N^2 \rightarrow \min;$$

$$Q_1 + Q_2 + Q_3 + \dots + Q_N = Q_{\text{сум}};$$

$$\sum_{i=1}^{N_1} (a_{0i} + a_{1i}Q_i + \dots + a_{pi}Q_i^p) Q_i \leq M^* Q_{\text{сум}}; \quad (264)$$

$$Q_{\min i} \leq Q_i \leq Q_{\max i}, \quad i = 1, 2, \dots, N_1;$$

$$Q_i = Q_{0i}, \quad i = 1, 2, \dots, N_2; \quad Q_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N_3;$$

где

$$d_0 = \sum_{j=1}^N (L - A_j/S_j^*)^2;$$

$$d_j = 2B_j/S_j^* \left(\frac{A_j}{S_j^*} - L \right), \quad j = 1, 2, \dots, N;$$

$$d_j = (B_j/S_j^*)^2, \quad j = N+1, \dots, 2N. \quad (265)$$

Здесь $a_{0i}, a_{1i}, \dots, a_{pi}$ — коэффициенты гидрогеохимических моделей (226), а A_j и B_j — гидродинамических моделей типа (263). Величина коэффициента L определяется из системы (257):

$$Q_1 + Q_2 + \dots + Q_N = Q_{\text{сум}};$$

$$A_1 + B_1 Q_1 = L \cdot S_1^*;$$

$$A_2 + B_2 Q_2 = L \cdot S_2^*;$$

$$\dots \dots \dots$$

$$A_N + B_N Q_N = L \cdot S_N^*.$$

Откуда

$$L = \frac{Q_{\text{сум}} + \sum_{j=1}^N \frac{A_j}{B_j}}{\sum_{j=1}^N \frac{S_j^*}{B_j}};$$

$$Q_j = S_j^* \cdot L - A_j/B_j. \quad (267)$$

В связи с тем что $S_j^* = f(Q_i^2)$, система (266) нелинейна относительно Q_j . Для ее решения используется метод последовательного приближения, алгоритм которого заключается в следующем (см. рис. 89, б): 1) дебитам скважин присваивается некоторое начальное распределение расходов, например текущие значения $\bar{Q}_j = Q_{0j}$; 2) определяют S_j^* по формуле (250); 3) вычисляют коэффициент L и дебит Q_j по формулам (257); 4) выполняется проверка условия $\max |Q_j - \bar{Q}_j| < \varepsilon$ (где ε — заранее заданная малая величина). Если оно не выполняется, то значению \bar{Q}_j присваивают Q_j и переходят к пункту 2. После того как определен коэффициент L , оптимальные расходы Q_j скважин уточняются из системы (264) с обозначениями (265) на основе оптимизации нелинейным симплекс-методом (метод деформируемого многогранника [40]) с ограничениями типа неравенства. Для этого используется вычислительная программа SIMPL.

Второй этап — выбор рационального насосного оборудования

Выбор осуществляется в два подэтапа. На первом определяется лучшая марка насосного оборудования для резервных скважин, на втором — уточняется режим работы всей гидравлической системы пласт — скважины — насосы — водоводы.

Выбор марки насосного оборудования для резервных скважин. Пусть известны дебиты продолжающих эксплуатироваться водозаборных скважин и определены оптимальные расходы резервных скважин. Требуется подобрать для резервных скважин такое насосное оборудование, которое бы осуществляло подачу оптимального количества воды Q_j на расчетную высоту H_p

Т а б л и ц а 45

Характеристика погружных насосов типа ЭЦВ

Марка насоса	Параметры насосов		Границы рабочей области	
	H_n , м	$s_n \cdot 10^{-5}$, сут ² /м ⁵	Q_{\min} , м ³ /сут	Q_{\max} , м ³ /сут
ЭЦВ 8-25-100	122	6,75	384	816
ЭЦВ 8-25-100	191	11,98	480	816
ЭЦВ 8-40-65	94	3,30	624	1200
ЭЦВ 8-40-165	220	5,90	624	1200
ЭЦВ 10-63-65	88	1,11	1200	1800
ЭЦВ 10-63-110	144	1,66	1200	1800
ЭЦВ 10-63-150	203	2,66	1200	1800
ЭЦВ 10-63-180	258	3,05	1200	1800
ЭЦВ 10-120-60	82	0,26	1680	3840
ЭЦВ 12-160-65	85	0,13	3360	4800
ЭЦВ 12-160-100	131	0,22	3120	4920

не менее требуемой, которая определяется по формуле (233).

При большом числе резервных скважин выбор марки насосов автоматизируется. Для этого в памяти ЭВМ создается архив данных характеристик имеющихся на водозаборе насосов (табл. 45), а сами насосы подбираются по алгоритму, блок-схема которого приведена на рис. 90:

- 1) рассматривается скважина с номером $j=1$;
- 2) для нее подбирается насос с номером $i=1$;
- 3) из каталога насосов для i -го номера в порядке записи ($i=1, 2, \dots, m$, где m — число занесенных в каталог насосов) считываются его характеристики: границы рабочей (с наибольшими значениями КПД) области и аналитические характеристики

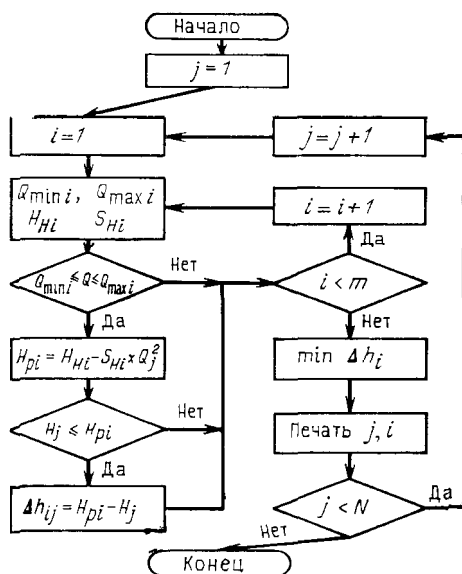


Рис. 90. Блок-схема выбора рационального насосного оборудования для поддержания оптимального варианта эксплуатации водозабора. По В. И. Угорцу
Номера: $i=1, 2, \dots, m$ — марок насосного оборудования; $j=1, 2, \dots, N_1$ — резервных скважин

стики зависимости $Q-H$ в виде коэффициентов H_{ni} и S_{ni} ;

- 4) проверяется условие $Q_{min j} \leq Q_j \leq Q_{max j}$, где Q_j — требуемый оптимальный дебит j -й скважины. Если это условие не выполняется, то переходят к пункту 8;
- 5) рассчитывается высота напора H_p , создаваемого насосом, по формуле (238) при заданном значении Q_j и величинах H_{ni} и S_{ni} , сосчитанных из каталога для данного насоса;
- 6) величина сравнивается с требуемой высотой подъема воды, определяемой по формуле (233) с учетом гидравлических потерь напора воды (240). Если условие $H_j \leq H_{pi}$ не выполняется, то переходят к пункту 8;
- 7) определяется величина избытка напора $\Delta h_{ij} = H_{pi} - H_j$ и переходят к пункту 8;
- 8) если $i < m$, то $i := i + 1$, и переходят опять к пункту 3;
- 9) если $i = m$, то находится минимальная величина Δh_{ij} , по которой и выбирается номер марки насоса;
- 10) если $j < N_1$, где N_1 — число резервных скважин, то $j := j + 1$, и переходят к пункту 2.

Уточнение дебитов скважин при совместной работе всех элементов водозабора. Проводится проверочный расчет совместной работы гидравлической системы пласт — скважины — насосы — водоводы и уточняются дебиты скважин и понижения уровней в них, напоры, развиваемые насосами в скважинах и в расчетных точках сети, расходы и потери напора на линиях водоводов.

Расчет производится по формуле (245), например, для модели, которую можно применить к схеме линейного водозабора (см. рис. 83, б). В этой системе число неизвестных Q_j ($j=1, 2, \dots, N$) всегда равно числу уравнений N , если решение осуществляется методом последовательного приближения. Введем обозначение для условного сопротивления \bar{s}_j всех общих участков водовода для каждой из N скважин при подаче из нее расхода Q_j . Это сопротивление условного участка для рассматриваемой j -й скважины, на котором возможны такие же потери напора при пропуске расхода Q_j , как и на общем для этой скважины участке водовода при подаче из каждой скважины соответствующего расхода. Аналогичный прием был предложен А. Е. Беланом, П. Д. Хоружим в 1981 г. Тогда можно составить равенства:

$$h_{nj} = \bar{s}_j Q_j^2 = \sum_{k=j}^N \left[\bar{s}_{bk} \left(\sum_{i=1}^k Q_i \right)^2 \right], \quad (268)$$

откуда

$$\bar{s}_j = \sum_{k=1}^N \left[\bar{s}_{bk} \left(\sum_{i=1}^k Q_i \right)^2 \right] / Q_j^2. \quad (269)$$

Используя эти уравнения, зависимость (245) можно записать в следующем виде:

$$(\bar{s}_{Tj} + \bar{s}_{nj} + \bar{s}_j) Q_j^2 + B_j Q_j + (A_j + z_j - H_{nj}) = 0; \quad (270)$$

отсюда

$$Q_j = \frac{\sqrt{B_j^2 + 4(H_{nj} - A_j - z_j)(\bar{s}_{Tj} + \bar{s}_{nj} + \bar{s}_j)} - B_j}{2(\bar{s}_{Tj} + \bar{s}_{nj} + \bar{s}_j)}. \quad (271)$$

Уточненные дебиты скважин рассчитываются по следующему алгоритму, блок-схема которого показана на рис. 91: 1) величинам дебитов скважин присваиваются оптимальные значения

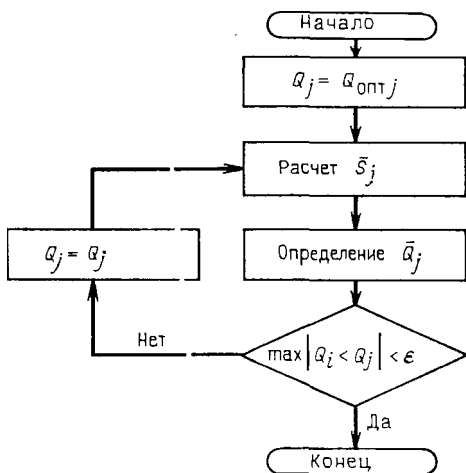


Рис. 91. Блок-схема уточнения дебитов скважин при совместной работе всех элементов гидравлической системы пласт — скважины — насосы — водоводы. По В. И. Угорцу

$j=1, 2, \dots, N$ — номера водозаборных скважин

Таблица величин коэффициента пропорциональности L по группам скважин для действующего водозабора

Год	Значение коэффициента пропорциональности $L = S_j/S_j^*$ по группам скважин								Суммарный расход водозабора, м ³ /сут
	1	2	3	4	5	6	7	среднее по водо- забору	
1978	0,44	0,51	0,48	0,51	0,53	0,52	0,50	0,50	37 000
1979	0,43	0,50	0,54	0,53	0,55	0,58	0,56	0,53	39 000
1980	0,50	0,58	0,58	0,59	0,56	0,60	0,60	0,57	45 000
1981	0,52	0,58	0,57	0,57	0,55	0,60	0,57	0,57	45 000
1982	0,51	0,58	0,56	0,57	0,57	0,58	0,56	0,55	42 000
1983	0,52	0,57	0,58	0,56	0,58	0,57	0,56	0,55	42 000

расходов, полученные в результате первого этапа решения задачи $\bar{Q}_j = Q_{j \text{ опт}}$; 2) по формуле (269) рассчитывают величины условных сопротивлений s_j ; 3) по формуле (271) определяют дебиты скважин Q_j ; 4) проверяют выполнение условия $\max |\bar{Q}_j - Q_j| < \epsilon$, где ϵ — заданная точность решения системы уравнений. Если оно не выполняется, то $\bar{Q}_j = Q_j$, и переходят к пункту 2.

После того как дебиты водозаборных скважин уточнены, выполняется прогноз понижения уровня в них на ориентировочный срок работы насосного оборудования ($t_n = 1\text{—}1,5$ года) с целью обоснования глубины погружения насоса под уровень подземных вод для резервных скважин и проверки неосушения насосов для уже эксплуатируемых скважин. При необходимости по полной физической модели решается прогнозная задача изменения режима подземных вод в пределах всего месторождения и оценивается создающаяся гидродинамическая и гидрогеохимическая обстановка, по анализу которой могут решаться задачи, связанные с оценкой: 1) эффективности действия существующей сети наблюдательных скважин и необходимости ее изменения; 2) целесообразности переоценки эксплуатационных запасов подземных вод месторождения; 3) экологических воздействий (охрана природной среды и т. п.).

Рассмотрим в качестве примера опыт управления режимом эксплуатации действующего водозабора для месторождения слабоминерализованных подземных вод, приуроченного к краевой части крупного артезианского бассейна. Гидрогеологические условия его кратко описаны выше. Созданная на базе ЭВМ в 1978 г. и функционирующая до настоящего времени АСУ водозабором позволяет оперативно (1 раз в квартал) регулировать текущий режим эксплуатации водозабора в целом, т. е. определять очередность и число скважин, переводящихся в резерв, подбирать для них рациональное насосное оборудование и контролировать гидродинамический и гидрохимический режим подземных вод в зоне влияния водозабора и месторождения в целом.

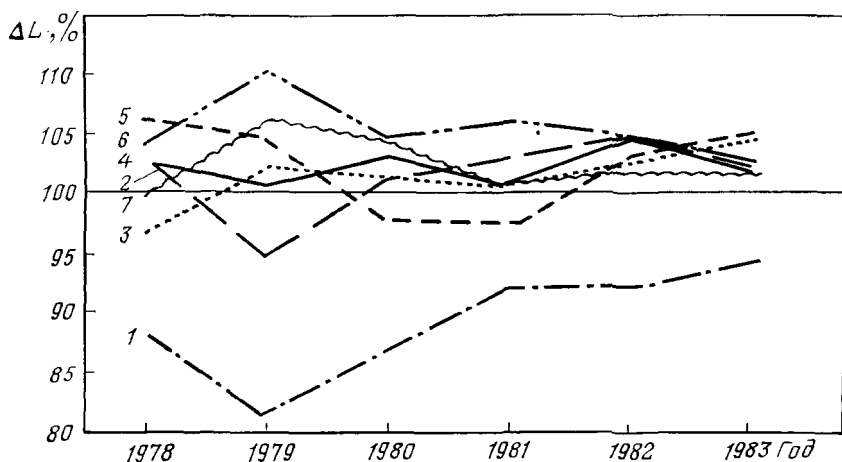


Рис. 92. Эпюра отклонения коэффициента пропорциональности ΔL по группам скважин (1—7) от средней величины для действующего водозабора. По В. И. Угорцу

Оптимальное распределение дебитов между водозаборными скважинами осуществлено на основе критерия (256) с комплексным использованием двух видов геолого-математических моделей — эквивалентной расчетной схемы неограниченного пласта с обобщенными гидродинамическими параметрами, которая периодически уточняется на основе нефизических индуктивных моделей, построенных для долгосрочного прогноза, и технической модели водозабора, описанной уравнением (241). Водозабор представляет собой линейный ряд, состоящий из 29 скважин и вытянутый в меридиональном направлении. Обобщенные значения коэффициента водопроницаемости $km_{об}$ составляют 90—110 м²/сут при средней величине проницаемости $a_{об} = 1.3 \cdot 10$ м²/сут. Минерализация подземных вод изменяется в пределах от 1,8 до 4,0 г/л, увеличиваясь с севера на юг. Водозаборные скважины эксплуатируются в основном погружными электронасосами, марки которых приведены в табл. 50, и лишь на юге несколько скважин еще работают в режиме самонизлива.

С целью управления все скважины водозабора были сформированы в 7 групп. В табл. 46 представлены значения коэффициентов пропорциональности снижения уровня по группам водозаборных скважин, одинаковые величины которых характеризуют оптимальный режим эксплуатации, а на рис. 92 приведена эпюра отклонения коэффициента L для групп скважин (1, 2, 3 и т. д.) от среднего значения по всему водозабору. Из них видно, что за пять лет функционирования АСУ-Водозабор эксплуатация скважин осуществлялась в режиме, близком к оптимальному. Кроме того, имеется тенденция к уменьшению величины отклонения ΔL от оптимального режима с 20 % в 1979 г. до 5—7 % в 1983 г. Постоянное невыполнение плана водотбора из первой группы объясняется техническими сложностями перевода самоизливающихся скважин в режим принудительной эксплуатации. Для остальных 6 групп, скважины которых эксплуатируются погружными электронасосами, величина отклонения от оптимального режима составляет в настоящее время 2—4 %. Средняя минерализация отбираемой воды 2,7—2,8 г/л, что не превышает предельно допустимого значения в 3 г/л. Наблюдается наиболее пропорциональная сработка эксплуатационных запасов подземных вод в пределах всего месторождения

ГИДРОГЕОХИМИЧЕСКИЕ ПРОГНОЗЫ НА ДЕЙСТВУЮЩЕМ ВОДОЗАБОРЕ

Изучение гидрогеохимических особенностей гидрогеологических объектов преимущественно в условиях активной их эксплуатации сложная многоцелевая проблема. Одна из важных задач — установление главных факторов, формирующих естественное гидрогеологическое поле объекта и изменяющих его под влиянием интенсивной хозяйственной деятельности человека, например, эксплуатации подземных вод водозаборами. При этом следует подчеркнуть, что гидрогеохимические поля наиболее часто характеризуются вероятностно-стохастической природой их существования в силу того, что они являются многокомпонентными по содержанию определяющих переменных и весьма разнообразными по происхождению и проявлению факторов, воздействующих на эти переменные [2, 16, 20, 23 и др.]. В таких условиях далеко не всегда можно применить для изучения таких полей детерминированные методы. Как показал опыт наших исследований, неплохие результаты в выявлении природы формирования гидрогеохимических полей дает факторный анализ, а в задачах их прогнозирования индуктивный метод самоорганизации моделей на ЭВМ в алгоритмах метода группового учета аргументов (МГУА). Эти результаты освещаются ниже.

ФАКТОРНЫЙ АНАЛИЗ ПРИ РЕШЕНИИ ВОПРОСОВ ФОРМИРОВАНИЯ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ПОДЗЕМНЫХ ВОД И ВЫЯВЛЕНИЯ ЕСТЕСТВЕННЫХ ИСТОЧНИКОВ ИХ ЗАГРЯЗНЕНИЯ В ПРОЦЕССЕ ЭКСПЛУАТАЦИИ

Метод факторного анализа (ФА) создан и разработан американскими психологами-экспериментаторами Л. Л. Тэрстоуном, Ч. Спирменом и др. в 1930—1940 гг. В СССР метод получил развитие в трудах известного советского психолога В. Д. Небылицина и в настоящее время широко применяется в биологии, медицине, экономике, геологии и других науках. Используется ФА для интерпретации инженерно-геологической и, в меньшей степени, гидрогеологической информации [16, 39]. Ниже рассмотрены особенности его применения для анализа результатов гидрогеохимических исследований.

Основы факторного анализа применительно к решению гидрогеохимических задач

Метод ФА базируется на гипотезе о том, что любая система (или процесс) характеризуется внутренними параметрами или факторами, не наблюдаемыми непосредственно, которые могут быть выявлены через наблюдаемые (или измеряемые) пере-

менные величины. Последние являются лишь косвенными характеристиками параметров изучаемой системы, т. е. допускается, что функционирование изучаемой системы, протекание каких-либо процессов определяются конечным числом t -факторов, каждый из которых характеризуется конкретным набором генетически взаимосвязанных переменных величин и контролирует определенную сторону функционирования системы. Задача анализа — выделение главных факторов и описание с их помощью механизма функционирования системы (или протекания процессов). При этом предполагается, что выделяемые главные факторы не коррелируют между собой, в то время как любая из рассматриваемых переменных величин может входить в несколько факторов (или во все), т. е. коррелировать с ними. Наблюдаемые переменные входят в факторную модель не в чистом виде, а в виде так называемых факторных весов (нагрузок) a , вычисляемых на основе коэффициентов взаимной корреляции переменных r .

Основная модель ФА имеет следующий вид:

$$z_j = \sum_{i=1}^t a_{ji} F_i + u \quad (j = 1, 2, \dots, n). \quad (272)$$

Здесь переменная z_j , характеризующая систему в целом, зависит от алгебраической суммы t -факторов и фактора u . Факторы F_1, F_2, \dots, F_t учитывают корреляции между наблюдаемыми x_1, x_2, \dots, x_t , которые выражаются в модели в виде их нагрузок $a_{j1}, a_{j2}, \dots, a_{jt}$, а фактор u — оставшаяся дисперсия.

Задача отыскания главных факторов решается в следующей последовательности.

1. Формулируется общая цель исследований и в зависимости от нее выбирается метод ФА. Существуют две его основные модификации: 1) Q -модификация, направленная на изучение взаимосвязей между объектами; 2) R -модификация, выявляющая характер взаимосвязей между переменными.

Под объектами понимают отдельные части системы (подсистемы), которые подвергаются испытанию (тестированию), с целью установления общих факторов, характерных для всей системы. Переменные — это параметры, которые фиксируются непосредственно на конкретных объектах. Переменные и объекты выбирают, исходя из конкретных целей исследований. При анализе гидрогеохимических полей в качестве объектов рассматривают отдельные точки (скважины, источники и т. п.), в которых опробуется испытываемое гидрогеохимическое поле (водоносный горизонт, комплекс и т. д.) для получения необходимых переменных (химические компоненты состава подземных вод, загрязняющие компоненты).

Можно выделить два типа гидрогеохимических задач, которые могут решаться с помощью ФА: 1) типизация гидрогеохимических условий — группировка объектов на основании каких-либо общих факторов (θ -метод); 2) установление генетиче-

ских взаимосвязей между компонентами химического состава подземных вод, показателями, физико-химического состояния среды, внешними факторами, т. е. задачи формирования химического состава подземных вод как в естественных условиях, так и в процессе их загрязнения и истощения (*R*-метод).

2. Производится выбор объектов исследований — наиболее типичных, представительных точек, в которых производилось гидрогеохимическое опробование. Выбор должен удовлетворять двум требованиям: иметь надежную гидрогеологическую стратиграфическую привязку объектов и по возможности эти объекты должны быть равномерно распределены по площади гидрогеохимического поля и глубине изучаемого водоносного комплекса или горизонта.

3. Определяется общий для всех объектов набор переменных, характеризующих состояние изучаемой системы, и оценивается их надежность и представительность. Переменные могут быть представлены конкретными или обобщенными значениями, мерами их рассеяния, быть заданы экспертными оценками (больше, меньше и т. д.).

С целью получения более достоверной модели желательно переменные задавать в виде обобщенных значений и иметь в виду следующее: 1) определения выбранных переменных (это в первую очередь относится к показателям химического состава подземных вод и физико-химическим свойствам среды) должны быть выполнены по единым методикам и не должны содержать систематических погрешностей измерения; 2) оценки средних значений переменных должны быть равноточными, подсчитанными по выборкам, объем которых больше оптимального или равен ему; 3) поскольку изучаются корреляционные зависимости между наблюдаемыми параметрами, во избежание погрешностей, связанных с асимметрией распределения значений переменных и нелинейностью корреляционных связей между ними, должно быть выполнено их преобразование (нормализация, центрирование, стандартизация).

В итоге формируется матрица исходных данных, столбцами которой являются значения переменных по всем выбранным объектам, а строки представляют собой значения переменных по каждому конкретному объекту. Затем рассчитывается взаимокорреляционная матрица (матрица интеркорреляций) — *R* выбранных параметров, которая редуцируется, т. е. единицы; стоящие на главной диагонали матрицы (корреляции каждой переменной между собой), заменяются на значения общностей этих переменных. Под общностью переменной понимают ту часть дисперсии, которая обусловлена факторами, общими для нескольких переменных. Известно несколько приемов расчета общностей [25], однако на практике используют максимальные значения коэффициентов корреляции в каждом столбце (независимо от знака они берутся как положительные величины), которые записываются в качестве общностей в главной диаго-

нали матрицы R . Введение общностей позволяет свести к минимуму в расчетах влияние специфических факторов u и погрешностей [25]. Для нахождения средних значений стандартных отклонений и корреляционной матрицы R может быть использована программа CORRE, опубликованная в «Сборнике научных программ на Фортране» за 1974 г.

4. Выделение факторов начинается с определения факторных весов (нагрузок) соответствующих переменных по первому, второму и другим факторам и построения матрицы факторов A . Решается задача методами матричной алгебры и сводится к отысканию собственных значений и собственных векторов корреляционной матрицы R . Отыскивая факторные веса параметров, входящих в первый фактор, максимизируют сумму

при условии

где V_1 — полный вклад переменных в общую дисперсию; r_{jk} — коэффициент корреляции переменных j и k .

$$\begin{aligned} (h_1^2 - \lambda) a_{11} + r_{11} a_{21} + \dots + r_{1n} a_{n1} &= 0; \\ r_{21} a_{11} + (h_2^2 - \lambda) a_{21} + \dots + r_{2n} a_{n1} &= 0; \\ \dots & \\ r_{n1} a_{11} + r_{n1} a_{21} + \dots + (h_n^2 - \lambda) a_{n1} &= 0. \end{aligned} \quad (275)$$

$$\begin{vmatrix} (h_1^2 - \lambda) r_{12} & r_{13} & \dots & r_{1n} \\ r_{21} (h_2^2 - \lambda) & r_{23} & \dots & r_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ r_{n1} & r_{n2} & r_{n3} & \dots & (h_n^2 - \lambda) \end{vmatrix} = 0, \quad (276)$$

При совместном решении систем (275) и (276) определяются факторные веса при первом факторе

$$a_{j1} = \alpha_{jk} \sqrt{\lambda} / \sqrt{\sum_1^n \alpha_{j1}}, \quad (277)$$

где α_{jk} — одно из возможных решений систем (275) и (276).

Решение системы (275) α_{jk} называют собственным вектором, т. е. задача отыскания факторных весов переменных по первому фактору сводится к отысканию собственных значений и собственных векторов систем (275) и (276).

Далее решается задача выделения второго фактора, учитывающего максимум дисперсии, оставшейся после извлечения первого фактора. Для этого вычисляют матрицу остаточных коэффициентов корреляции (с учетом вычета первого фактора):

$$R_1 = R - \bar{R}_1, \quad (278)$$

где \bar{R}_1 — симметричная матрица произведений факторных весов при первом факторе.

В работе [25] показано, что для вычисления факторных весов по второму фактору a_{j2} нет необходимости максимизировать функцию V_2 и максимальное значение матрицы R_1 является вторым собственным значением исходной матрицы R . Последующие собственные значения и собственные векторы получаются также из матрицы R вплоть до получения заданного числа факторов m , которое не может превышать числа переменных n .

При небольшом числе объектов и переменных, а также для ориентировочных расчетов определения нагрузок переменных на факторы можно пользоваться центроидным методом, базирующемся на ручном счете [25]. Алгебраическая процедура основана на одном из уравнений ФА (274), описывающем связь между коэффициентами корреляции r_{jk} и соответствующими факторными нагрузками:

$$r_{jk} = a_{jF_1} \cdot a_{kF_1} + a_{jF_2} \cdot a_{kF_2} + \dots + a_{jF_t} \cdot a_{kF_t} \quad (279)$$

и означаящем, что корреляция между переменными j и k (r_{jk}) в случае t некоррелированных факторов F , общих для обеих переменных, равна сумме произведений нагрузок каждого из факторов на эти переменные. С помощью уравнения (279) рассчитывается корреляция между двумя переменными, если известны нагрузки общих для них факторов. Основой ФА является противоположная задача: исходя из известных корреляций рассчитать факторные нагрузки. Факторная нагрузка j -й переменной на общий фактор F_1 рассчитывается путем суммирования элементов столбца редуцированной матрицы R и деления полученной суммы на корень квадратный из суммы всех столб-

цов матрицы. Запишем в общем виде редуцированную матрицу интеркорреляций R :

	x_1	x_2	x_3	\dots	x_n
x_1	h_1^2	r_{12}	r_{13}	\dots	r_{1n}
x_2	r_{21}	h_2^2	r_{23}	\dots	r_{2n}
x_3	r_{31}	r_{32}	h_3^2	\dots	r_{3n}
\dots	\dots	\dots	\dots	\dots	\dots
x_n	r_{n1}	r_{n2}	r_{n3}	\dots	h_n^2

(280)

$$\Sigma r \quad \Sigma r_1 \quad \Sigma r_2 \quad \Sigma r_3 \quad \dots \quad \Sigma r_n$$

Обозначим суммы столбцов в матрице соответственно Σr_1 ; Σr_2 ; Σr_3 ; \dots ; Σr_n , а общую сумму коэффициентов корреляции матрицы через $T = \Sigma r_1 + \Sigma r_2 + \Sigma r_3 + \dots + \Sigma r_n$, тогда нагрузка 1-й переменной на 1-й фактор будет вычисляться по формуле $a_{11} = \Sigma r_1 / \sqrt{T}$, 2-й — на 1-й $a_{21} = \Sigma r_2 / \sqrt{T}$, j -й переменной на 1-й фактор $a_{j1} = \Sigma r_j / \sqrt{T}$ и т. д.

Определяя нагрузки переменных на первый фактор, мы выделили из совокупности коэффициентов корреляции некоторую часть общей дисперсии, которая может быть приписана первому фактору. Поэтому вычисление нагрузок выбранных переменных на последующие факторы необходимо начинать с расчета новых коэффициентов корреляции, выражающих ту часть оставшейся общей дисперсии, которая может быть отнесена за счет других факторов.

В соответствии с (279) корреляции между переменными x_1 и x_2 ; x_1 и x_3 \dots ; x_1 и x_n , обусловленные первым фактором, равны произведению его нагрузок по этим переменным: $r_{x_1 x_2} = a_{11} \cdot a_{21}$; $r_{x_1 x_3} = a_{11} \cdot a_{31}$; \dots ; $r_{x_1 x_n} = a_{11} \cdot a_{n1}$. Однако рассчитанные корреляции (с учетом общностей h^2) равны соответственно h_1^2 , r_{21} , r_{31} , \dots , r_{n1} и отличаются от $r_{x_1 x_2}$, $r_{x_1 x_3}$, \dots , $r_{x_1 x_n}$ на величины $\delta_{11} = h_1^2 - a_{11}^2$, $\delta_{21} = r_{21} - a_{11} \cdot a_{21}$, $\delta_{31} = r_{31} - a_{11} \cdot a_{31}$, \dots , $\delta_{n1} = r_{n1} - a_{11} \cdot a_{n1}$.

Полученные остатки δ и представляют собой ту часть общей дисперсии, которая остается после извлечения 1-го фактора. Причем δ могут быть получены как с положительным, так и с отрицательным знаком. Отрицательный знак перед остатком корреляции δ означает, что переменные x_1 и x_2 имеют обратную связь, т. е. имеют противоположные знаки. Аналогично рассчитываются δ во всех других столбцах с учетом алгебраических знаков.

Рассчитанные остаточные значения коэффициентов корреляции записываются в новую матрицу, которая называется матрицей первых остатков корреляций.

	x_1	x_2	x_3	\dots	x_n
x_1	δ_{11}	δ_{12}	δ_{13}	\dots	δ_{1n}
x_2	δ_{21}	δ_{22}	δ_{23}	\dots	δ_{2n}
x_3	δ_{31}	δ_{32}	δ_{33}	\dots	δ_{3n}
\dots	\dots	\dots	\dots	\dots	\dots
x_n	δ_{n1}	δ_{n2}	δ_{n3}	\dots	δ_{nn}

(281)

Извлечение нагрузок переменных x_1, x_2, \dots, x_n на 2-й фактор производится в соответствии с описанной выше методикой и сопровождается процедурой обращения алгебраических знаков [25]. Таким же образом вычисляются факторные нагрузки на 3-й, 4-й и все последующие факторы.

Итогом вычислений является матрица факторов A

	F_1	F_2	F_3	\dots	F_m
x_1	a_{11}	a_{12}	a_{13}	\dots	a_{1m}
x_2	a_{21}	a_{22}	a_{23}	\dots	a_{2m}
x_3	a_{31}	a_{32}	a_{33}	\dots	a_{3m}
\dots	\dots	\dots	\dots	\dots	\dots
x_n	a_{n1}	a_{n2}	a_{n3}	\dots	a_{nm}

(282)

Максимальное число факторов, которое может быть выделено в процессе исследований, определяется по формуле Тэрстуна

$$m = (2n + 1 - \sqrt{8n + 1})/2. \quad (283)$$

Поскольку положение факториальных осей (собственных векторов) в пространстве оказывается фактически произвольным, то следующим этапом является нахождение такого расположения факториальных осей, при котором бы они проходили через скопления в пространстве групп переменных. С этой целью осуществляется ортогональное вращение матрицы факторов A по методу варимакс (попарное изменение положения факториальных осей) до тех пор, пока проекции каждой переменной на факториальные оси (факторные нагрузки a) не окажутся близкими либо к 0, либо к 1. Таким образом, дальнейшие операции направлены на отыскание угла поворота факторных осей θ и факторных нагрузок a' , соответствующих новому расположению координатных осей. Результатом вы-

числений является построение таблицы (матрицы) главных факторов В. Эти расчеты, как и построение матрицы факторов А, могут быть выполнены по подпрограммам EIGEN, TRACE, LOAD, VARMX, опубликованным в «Сборнике научных программ на Фортране» за 1974 г.

6. Затем производится интерпретация определенных ранее главных факторов, начинающаяся с выделения внутри каждого фактора переменных со значимыми факторными нагрузками. Следует отметить, что однозначных критериев, позволяющих выделить значимые факторные нагрузки, пока не существует. Известно, что порядок ее значимости определяется размером выборки, и обычно в случае больших выборок (100 объектов и более) значимыми принято считать нагрузки величиной от 0,3 и выше. При уменьшении выборки до нескольких десятков объектов значимыми считаются нагрузки величиной 0,4—0,5 и выше.

После выполнения этой операции каждый фактор будет характеризоваться только теми переменными, которые наиболее тесно коррелируют с данным фактором и определяют его роль в протекании изучаемого процесса. Правильная, логичная интерпретация совокупности значимых переменных, входящих в каждый из факторов, требует от исследователя глубокого знания и понимания геологогидрогеологических условий изучаемого района (тектоники, литологии, палеогидрогеологии, современных динамики и геохимии подземных вод и т. д.).

В качестве примера в табл. 47 приведена матрица главных факторов, полученная в расчете, выполненном для одного из участков артезианского бассейна, расположенного в аридной зоне СССР. В матрице даны лишь значимые величины нагрузок на факторы F_1 , F_2 , F_3 , которые позволяют интерпретировать гидрогеохимическую информацию следующим образом. Переменные, входящие в фактор F_1 , делятся на 2 группы в зависимости от знака, стоящего перед факторной нагрузкой. Это говорит о том, что внутри каждой из групп переменные связаны прямой зависимостью, а каждая взятая отдельно переменная из одной группы связана обратной зависимостью с любой переменной другой группы. Далее, анализируя фактор F_1 , можно отметить, что он максимально нагружен такими переменными, как M , $(Na+K)^+$, Ca^{2+} , Mg^{2+} , SO_4^{2-} , Cl^- , Y — имеющими прямую связь и достаточно высокие значения факторных нагрузок (значимость 0,7 и выше). Такой характер взаимосвязи переменных объясняется тесной зависимостью величины минерализации подземных вод M и концентрацией главных солеобразующих компонентов $[SO_4^{2-}$, Cl^- , $(Na+K)^+$, Ca^{2+} , $Mg^{2+}]$ от расстояния до области питания водоносного комплекса Y . По мере удаления от области питания происходит нарастание величины минерализации подземных вод и концентраций соответствующих компонентов. Присутствие в факторе F_1 таких переменных, как F^+ , HCO_3^- и pH (с обратными знаками),

Т а б л и ц а 47

Матрица главных факторов

Номер п/п	Переменные	Факторы		
		F_1	F_2	F_3
1	M	0,891	—0,602	0,911
2	(Na + K) ⁺	0,852		
3	Ca ²⁺	0,841		
4	Mg ²⁺	0,830		
5	HCO ₃ [—]	—0,844		
6	SO ₄ ^{2—}	0,701		
7	Cl [—]	0,711		
8	F ⁺	—0,669		
9	B [—]		—0,751	
10	Br [—]		—0,901	
11	Sr ²⁺	0,501		
12	pH	—0,601		
13	H			0,850
14	T °C		—0,892	
15	C [—] /Br [—]		0,773	
16	X			0,709
17	Y	0,805		
18	$\sqrt{X^2 + Y^2}$			

позволяет говорить о том, что наиболее вероятной причиной обогащения фтором подземных вод является благоприятная гидрогеохимическая обстановка, характеризующаяся наличием слабощелочных гидрокарбонатных вод, в которых фтор мигрирует наиболее активно, переходя в раствор из фосфоритов и фторсодержащих силикатов, входящих в состав водоносных песков и песчаников водоносного комплекса. Фактор F_2 наиболее нагружен такими переменными, как Br[—], T°, Cl[—], B[—], имеющим прямую связь. Такое сочетание параметров наталкивает на мысль, что причиной появления в подземных водах брома и бора могут быть горячие воды, поступающие в изучаемый водоносный комплекс по зонам тектонических нарушений. Фактор F_3 указывает на прямую зависимость минерализации подземных вод M от глубины их залегания H и расстояния по короткой оси линзы X.

Примеры аналогичной интерпретации гидрохимической информации проводятся в работе [16].

Изучение условий формирования подземных вод краевой части артезианского бассейна и естественных источников их загрязнения

Предметом изучения является альб-сеноманский водоносный комплекс одного из артезианских бассейнов, расположенных в аридной зоне СССР. Необходимость и актуальность изу-

чения гидрогеохимических условий водоносного комплекса обусловлены тем, что он является главным источником водоснабжения крупного региона и характеризуется сложными геологическими и гидрогеологическими условиями, которые и определяют сложное гидрогеохимическое поле (рис. 93).

Областью питания изучаемого комплекса является предгорная часть района, где водоносные породы выходят на поверхность и содержат грунтовые воды. По мере удаления от области питания водоносные отложения погружаются на глубину и приобретают избыточный напор, который в наиболее прогнутых участках артезианского бассейна, там где располагается водозабор, достигает 500—600 м над кровлей пласта и более. Структурно-тектонический план прогиба, на фоне которого сформировался изучаемый артезианский бассейн, осложнен положительными структурами (валы, купола), разбитыми серией разломов меридионального и субмеридионального простирания. Сложные геологоструктурные условия района в сочетании с фациальными изменениями в составе водосодержащих пород создают условия для изменения их водопроницаемости в диапазоне от 5—10 до 80—100 м²/сут. Совокупность этих и других причин обуславливает сложную картину изменения химического состава и минерализации подземных вод комплекса как на площади его распространения, так и по мере погружения на глубину.

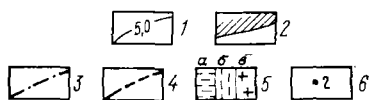
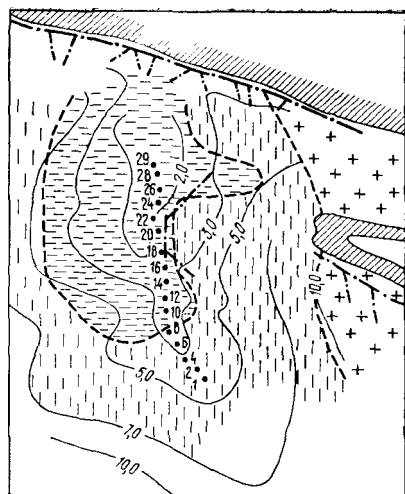


Рис. 93. Гидрохимическая карта первого альбеского водоносного горизонта артезианского бассейна

1 — изометры, г/л; 2 — область питания водоносного горизонта; 3 — тектонические нарушения; 4 — границы областей распространения вод различного состава; 5 — области распространения подземных вод различного состава (по В. А. Сулину); 6 — водозаборная скважина

Водоносный комплекс содержит воды от сульфатных натриевых и гидрокарбонатных натриевых до хлоридных кальциевых (по В. А. Сулину). Соотношение концентраций отдельных ионов в подземных водах находится в тесной зависимости от величины общей минерализации. Так, при минерализации вод до 2—3 г/л они, как правило, имеют гидрокарбонатный натриевый состав, при увеличении ее до 5—10 г/л состав изменяется на сульфатный натриевый и с дальнейшим увеличением минерализации переходит в хлоридный кальциевый или хлоридный

магний. Из микрокомпонентов в подземных водах содержится: фтор, бром, бор, стронций, калий, литий, рубидий, кремниевая кислота, иногда цезий. В газовом составе преобладает сероводород. Количество органических веществ в среднем составляет 50 мг/л, органические кислоты в большинстве проб отсутствуют.

Наиболее пресные воды с минерализацией 2—4 г/л, используемые для водоснабжения, располагаются в центральной части изучаемого района в виде линзы, протягивающейся от области выхода водоносных пород на поверхность в южном направлении на 60—80 км. Длина короткой оси линзы около 30—40 км. По вопросу формирования этих вод существует две точки зрения: одни исследователи полагают, что образование линзы солоноватых вод связано с внедрением древних инфильтрационных вод в неоген-четвертичное время из области питания, другие считают, что воды сформировались за счет перетекания более пресных вод пермо-триаса по зоне разломов, секущей осадочный мезо-кайнозойский чехол в центральной части района (см. рис. 93).

В наиболее пресной части линзы располагается водозабор, эксплуатирующий подземные воды альб-сеноманского водоносного комплекса с целью водоснабжения. Контроль за изменением режима подземных вод в процессе эксплуатации осуществляется регулярными наблюдениями, проводимыми на эксплуатационных и наблюдательных скважинах, расположенных в зоне влияния водозабора. За 20-летний период эксплуатации по каждой из скважин накопился представительный ряд (более 60—80) наблюдений общей минерализации, содержания макро- и микрокомпонентов, температуры подземных вод и других показателей, которые используются как исходные.

Изучаемый комплекс защищен от проникновения в него техногенных загрязнений мощной толщей палеоген-неогеновых глин (200—500 м) и мергелей мелового возраста, являющихся верхним региональным водоупором. Вместе с тем существует потенциальная опасность загрязнения слабосоленых вод линзы, используемых для водоснабжения, некондиционными водами, располагающимися на флангах месторождения, а также в выше- и нижележащих водоносных горизонтах. Некондиционные воды обладают повышенной (5 г/л и более) минерализацией и содержат повышенные количества хлоридов, сульфатов, брома и других компонентов и могут быть вовлечены в зону влияния водозабора в процессе его эксплуатации.

Задача установления источников загрязнения подземных вод неотделима от задачи изучения условий их формирования. Рассматривая вопрос о формировании современного состава подземных вод, распределения их минерализации, источниках появления в них различных микрокомпонентов, можно более достоверно решить проблему об источниках и причинах изменения гидрогеохимических условий и обосновать модель про-

гноза их изменения в процессе эксплуатации. Таким образом, две эти задачи решались нами совместно и взаимно дополняли друг друга. Использован *R*-метод факторного анализа, позволяющий установить генетические связи между отдельными компонентами химического состава подземных вод, внешними параметрами среды и другими параметрами, оказывающими влияние на формирование химического состава подземных вод и его изменение в естественных и нарушенных эксплуатацией условиях [23].

Были выбраны 80 скважин (объектов), равномерно распределенных по территории артезианского бассейна и вскрывающих изучаемый водоносный комплекс на различных интервалах глубин. За основные переменные приняты: 6 основных макрокомпонентов, общая минерализация M , величина pH , глубина до кровли водоносного горизонта H , температура подземных вод (T в $^{\circ}C$), Cl^{-}/Br^{-} , координаты точек опробования X и Y , параметр $\sqrt{X^2 + Y^2}$, микрокомпоненты (всего 18 переменных; табл. 48). Расчетные значения переменных, изменяющихся во времени (концентрации основных макрокомпонентов, общая минерализация), были заданы в виде обобщенных, стандартизированных значений, рассчитанных по выборкам, объем которых был больше оптимального. Определения макро- и микрокомпонентного состава подземных вод выполнялись на протяжении всех 20 лет эксплуатации скважин одной химической лабораторией, с использованием стандартных методик и не содержат систематических погрешностей определения концентраций химических компонентов.

Для того чтобы проследить характер взаимосвязи выбранных переменных в зависимости от различных гидрогеохимических условий и установить возможность поступления в изучаемый водоносный комплекс некондиционных вод на различных участках водозабора, ФА выполнялся для выделения зон с различной минерализацией подземных вод: 1) $0,5 \div 2,0$ г/л; 2) $2,0 \div 3,0$ г/л; 3) $3,0 \div 4,0$ г/л; 4) в пределах зоны с минерализацией $0,5 \div 4,0$ г/л; 5) за пределами 4-граммовой зоны (см. табл. 48, расчеты соответственно 1, 2, 3, 5; 6) с целью изучения влияния зоны тектонических нарушений на формирование состава подземных вод и оценки ее как участка, опасного с позиции поступления некондиционных вод из соседних водоносных горизонтов, был произведен расчет 4 (см. табл. 48), по скважинам, расположенным рядом с тектоническими нарушениями. Для проверки гипотезы о наличии общих факторов, определяющих условия формирования подземных вод во всех выделенных зонах, был выполнен суммарный расчет 7 (см. табл. 48), в который вошли все опробованные на территории артезианского бассейна скважины. По выделенным участкам были составлены матрицы фактического материала размером: 1) расчет 1 — 18×15 (18 переменных \times 15 скважин); 2) расчет 2 — 18×20 ; 3) расчет 3 — 18×17 ; 4) расчет 4 — 18×15 ;

Результаты факторного анализа

Номер расчета, содержание	Предельная величина факторного веса	Выделенные факторы	Параметры, входящие в выделенные факторы (факторная модель)
1. По скважинам, расположенным в пределах 2-граммового контура	0,5	F_1 F_4 F_2	Cl^- ; SO_4^{2-} ; H ; T , $-Y$; $\sqrt{X^2 + Y^2}$. $-\text{Br}^-$, Cl/Br ; $-X$; $-\text{Sr}^{2+}$. F^+ ; $(\text{Na} + \text{K})^+$; HCO_3^- .
2. То же, 3-граммового контура	0,5	F_2 F_5 F_3 F_4	Ca^{2+} ; $-\text{HCO}_3^-$; pH , $-\text{F}^+$; Y , $\sqrt{X^2 + Y^2}$. $(\text{Na} + \text{K})^+$; SO_4^{2-} ; $-X$, Sr^{2+} . M ; Mg^{2+} ; Cl^- ; H ; T ; X , B^- . $-\text{Br}^-$; H ; $-T$, Cl/Br .
3. То же, 4-граммового контура	0,5	F_2 F_3 F_4	Ca^{2+} ; Mg^{2+} ; SO_4^{2-} ; HCO_3^- ; $-\text{F}^+$; $-\text{pH}$; Y ; $\sqrt{X^2 + Y^2}$; Sr^{2+} . $-\text{M}$; $(\text{Na} + \text{K})^+$; $-\text{Cl}^-$; SO_4^{2-} ; $-T$; $-H$. $-\text{Br}^-$; Cl/Br ; B^- .

Номер расчета, содержание	Предельная величина факторного веса	Выделенные факторы	Параметры, входящие в выделенные факторы (факторная модель)
4. По скважинам, расположенным в зоне влияния тектонических нарушений	0,5	F_1	$M; (Na + K)^+; Ca^{2+}; Mg^{2+}; Cl^-; SO_4^{2-}; Br^-; Cl/Br; Y;$ $\sqrt{X^2 + Y^2}.$
		F_5	$-M, HCO_3^-; -X; Sr^{2+}.$
		F_2	$-F^+; -pH; H; T.$
		F_4	$-Br; Cl/Br; -B^-.$
5. По скважинам, расположенным в пределах линзы минерализацией до 4 г/л	0,3	$F_1 + F_2$	$M; (Na + K)^+; Ca^{2+}; Mg^{2+}; Cl^-; SO_4^{2-}; -HCO_3^-; -F^+;$ $-pH; Y; Sr^{2+}.$
		F_4	$-(Na + K)^+; -Br^-; -T; Cl/Br; -B^-.$
		F_3	$M; H; X.$
6. По скважинам, расположенным за пределами линзы	0,5	F_2	$Ca^{2+}; Mg^{2+}; SO_4^{2-}; -HCO_3^-; -F^+; -H; -T; Cl/Br.$
		F_3	$M; (Na + K); Cl^-; -pH; H.$
		F_4	$B^-; SO_4^{2-}; Br^-; -Y; \sqrt{X^2 + Y^2}.$
		F_5	$-X; -Sr^{2+}.$
7. По всем скважинам (суммарный расчет)	0,3	$F_1 + F_2$	$M; (Na + K)^+; Ca^{2+}; Mg^{2+}; Cl^-; SO_4^{2-}; HCO_3^-; -F^+;$ $Br^-; -pH; Y; \sqrt{X^2 + Y^2}.$
		F_4	$(Na + K)^+; Br^-; T; -Cl/Br.$
		$F_3 + F_5$	$M; Ca^{2+}; Mg^{2+}; Cl^-; -HCO_3^-; H; X; Sr^{2+}.$
		$F_2 + F_4$	$-HCO_3^-; -F^+; Br^-; T; B^-.$

5) расчет 5 — 18×55 ; 6) расчет 6 — 18×25 и 7) расчет 7 — 18×80 . Методом ранговой корреляции были рассчитаны матрицы интеркорреляций соответственно $R_1, R_2, R_3, \dots, R_7$. Дальнейшие расчеты производились методом главных факторов (R -модификация) по усовершенствованной программе ФАСТО, помещенных в «Сборнике научных программ на Фортране» за 1974 г. Результаты расчетов приведены в табл. 48.

Из табл. 48 видно, что общее число главных факторов, определяющих процесс формирования подземных вод рассматриваемого водоносного комплекса, равняется 5. Выделенные факторы располагаются в выполненных расчетах в различных сочетаниях (F_2, F_3, F_4, F_5 — расчет 2; F_2, F_3, F_4 — расчет 3; F_1, F_2, F_4, F_5 — расчет 4 и т. д.) и, как показано ниже, каждый из них характеризует одну из сторон процесса формирования подземных вод. Однако есть варианты, когда один из выделенных факторов характеризует два близких по генезису процесса. Такие факторы обозначены в табл. 48 двойными индексами ($F_1 + F_5$ — расчет 5; $F_4 + F_5$ — расчет 6 и др.). Выделенные факторы включают переменные с факторными нагрузками, равными или превышающими предельные значения (см. табл. 48). Указанные переменные входят в факторы в различных комбинациях и интерпретируются с позиций конкретных гидрогеологических условий следующим образом.

1. Фактор F_1 отражает взаимосвязь основных солеобразующих компонентов $(\text{Na} + \text{K})^+$, SO_4^{2-} , Ca^{2+} , Mg^{2+} , Cl^- , HCO_3^- , минерализации M , pH , ряда микрокомпонентов (F , иногда Bg или Sr) и зависимость их величины от расстояния до области питания водоносного горизонта Y .

2. Фактор F_2 , характеризующий взаимосвязь переменных, влияющих на миграцию фтора и мобилизацию его из породы. В этот фактор входят такие переменные, как Na^+ , HCO_3^- , pH , характеризующие щелочность среды, Ca^{2+} , который контролирует миграцию фтора в подземных водах. Кроме того, в этот же фактор входит расстояние до области питания Y .

3. Фактор F_3 , показывающий зависимость минерализации M и ее основных компонентов Na^+ , Cl^- (иногда SO_4^{2-} , Ca^{2+} , Mg^{2+}) от глубины H : в ряде случаев от температуры и расстояния по короткой оси линзы X .

4. Фактор F_4 , позволяющий выделить взаимосвязь переменных, определяющих появление брома в подземных водах данного района. В один фактор с бромом входят B^- , $(\text{Na} + \text{K})^+$, температура, Cl/Bg и иногда глубина залегания вод H .

5. Фактор F_5 , характеризующий условия миграции стронция в конкретной гидрогеохимической среде. В один фактор со Sr^{2+} входят расстояние по короткой оси линзы X и HCO_3^- -ион.

Рассмотрим, как распределены выделенные факторы по различным участкам артезианского бассейна и в каком сочетании они входят в расчеты 1—7 (см. табл. 48).

Фактор F_1 отражает, на наш взгляд, генеральную тенденцию в формировании подземных вод краевой части рассматриваемого артезианского бассейна, связанную с внедрением древних инфильтрационных вод со стороны области питания водоносного комплекса. Для краткости назовем его **и н ф и л ь т р а ц и о н н ы м**. Инфильтрационный фактор отчетливо выделяется в расчетах, сделанных: 1) для зоны расположения контура с минерализацией 2 г/л (расчеты 1, 2), для зоны влияния тектонических нарушений (расчет 4); 3) в сочетании с факторами F_2 , F_1 входит в расчеты, выполненные для всей зоны распространения слабоминерализованных вод (расчет 5), и в расчет, выполненный для всей матрицы исходной информации (расчет 7). Инфильтрационный фактор характеризуется прямой зависимостью концентрации основных солеобразующих компонентов и минерализации от расстояния до области питания водоносного горизонта (факторные веса имеют одинаковые знаки). При выполнении расчета 6 инфильтрационный фактор не выделяется, что указывает на ограниченный характер внедрения метеорных вод.

Нехарактерное сочетание параметров, входящих в один фактор с Y в расчете 1 (Cl^- , SO_4^{2-} , глубина H , температура T в $^{\circ}C$ объясняется тем, что 2-граммовый контур располагается на стыке двух структурных элементов (предгорного прогиба и куполообразного поднятия). При этом концентрация основных солеобразующих компонентов, с одной стороны, прямо зависит от глубины и температуры (при погружении в предгорный прогиб), а с другой — имеют обратную связь с расстоянием Y (при последующем поднятии на куполообразное поднятие концентрации этих компонентов убывают).

Фактор F_2 выделяется в расчетах, выполненных как для участков с невысокой минерализацией подземных вод 2—4 г/л (см. табл. 48, расчеты 1, 2, 3), так и для участка с минерализацией более 4 г/л (расчет 6). Анализ сочетания переменных, входящих в фактор на различных уровнях минерализации подземных вод, позволяет проследить условия появления и миграции фтора в подземных водах. Так, при невысоких значениях минерализации подземных вод в один фактор с фтором с одинаковым знаком входят Na^+ , HCO_3^- , рН, а с противоположным — Ca^{2+} , а также расстояние до области питания Y . Этот факт указывает на то, что причиной повышенных концентраций фтора в слабосоленых водах центральной части линзы является щелочная, гидрокарбонатная среда, которая способствует его миграции и мобилизации из фосфоритов. Присутствие в подземных водах Ca^{2+} контролирует концентрацию в них фтора (его избыток выводится из раствора в виде флюорита). Данное явление четко прослеживается по мере удаления от области питания. В этом направлении увеличивается минерализация подземных вод, растет содержание Ca^{2+} , убывает концентрация HCO_3^- и рН, а в связи с этим падает и концент-

рация фтора. По сути дела, этот фактор также характеризует влияние инфильтрации на формирование вод современного состава. В данном случае в нем отражено влияние среды и состава вод, измерение которых связано с инфильтрацией, на миграцию фтора.

Сочетание параметров, входящих в один фактор с фтором в расчете 4 (см. табл. 48), выполненном для зоны влияния тектонических нарушений, указывает на возможность его поступления из верхних горизонтов. Для этого имеются гидрохимические предпосылки — увеличение концентрации фтора вверх по разрезу. Здесь, помимо рН, факторный вес которого имеет одинаковый знак с факторным весом фтора, присутствуют с обратным знаком глубина и температура. Поступление фтора из нижних горизонтов вряд ли возможно, так как среда и состав вод юрских горизонтов неблагоприятны для миграции этого элемента.

Фактор F_3 выделяется практически во всех расчетах, за исключением расчетов 1, 4, и характеризует тенденцию, присущую большинству артезианских бассейнов, — увеличение минерализации подземных вод с глубиной. В состав фактора входят с одинаковым знаком минерализации, основные микрокомпоненты Na^+ , SO_4^{2-} , Cl^- , глубина и температура, что характеризует их прямую взаимосвязь. Присутствие в этом факторе иона HCO_3^- с обратным знаком, подчеркивает его инфильтрационное происхождение (расчет 7).

В факторе F_4 необходимо обратить внимание на определенный набор переменных, который сопутствует бром в различных расчетах. В один фактор с бромом, как правило, входят В, Na, Т (в °С), Н. Эта закономерность прослеживается как в расчетах, выполненных по отдельным участкам (расчеты 1, 2, 3, 4, 6), так и в суммарных расчетах (расчеты 5 и 7). Чтобы выяснить вопрос о том, что определяет такое сочетание параметров, следует сказать об источниках брома в подземных водах района.

Анализ палеогидрогеологических условий показывает, что подземные воды альб-сеноманского комплекса формировались в условиях морских бассейнов с нормальной соленостью. Инфильтрации, имевшие место в более поздние эпохи, могли только уменьшить первоначальную минерализацию подземных вод. Следовательно, ожидаемые значения Cl/Br -коэффициента должны составлять величину около 300 (или превышать ее). Однако в центральной части линзы значения коэффициента Cl/Br имеют порядок 200—250, что говорит о некотором избытке Br в подземных водах альб-сеноманского комплекса. Аналогичное явление отмечалось В. В. Красинцевой в подземных водах Предкавказья. Дополнительным источником брома она считала нижезалегающие галогенные отложения, из которых этот элемент поступает посредством диффузионного переноса.

Присутствие в одном факторе с бромом таких параметров, как глубина и температура, позволяет нам также считать его дополнительным источником нижележащие горизонты, в которых бром содержится в промышленных концентрациях. Однако перенос элемента вряд ли осуществляется диффузионным путем. Прямая зависимость от температуры позволяет думать о поступлении брома с более горячими водами по зонам тектонических нарушений. Присутствие в одном факторе с бромом бора указывает на возможную сингенетичность этих элементов. Следует отметить, что вопрос генезиса брома и бора в подземных водах альб-сеноманского комплекса требует дальнейшего изучения и аргументации.

Фактор F_5 , присутствующий в расчете 7 в сочетании с фактором F_3 , характеризует общие закономерности концентрации стронция в подземных водах (способность его накапливаться по мере увеличения глубины, минерализации и хлоридности вод). Прямая связь с расстоянием от центра линзы X и обратная с содержанием HCO_3^- -иона подчеркивает обедненность этим элементом слабосолоноватых вод. Источником стронция в подземных водах, по-видимому, является целестин, который входит в качестве эпигенетической составляющей в фосфоритовые конкреции меловых отложений.

В заключение кратко сформулируем выводы, которые вытекают из результатов факторного анализа гидрогеохимической информации рассматриваемого района.

1. Подтверждается, что линза слабосолоноватых (до 4—5 г/л) вод имеет инфильтрационное происхождение. Связь с соседними горизонтами в пределах линзы также существует, о чем свидетельствует характер взаимоотношений фтора и брома с коррелируемыми параметрами. Однако влияние современной инфильтрации ограничено контурами линзы, за пределами которой сохраняются, по-видимому, древние, инфильтрационные воды, смешанные с седиментационными.

2. Можно предположить, что наряду с остаточным бромом, который сохранился в водах после воздействия инфильтрации (в пределах линзы), и седиментационным бромом (за ее пределами) дополнительное количество этого элемента поступает в альб-сеноманский комплекс с юрскими водами по зонам тектонических нарушений.

3. Источником фтора в подземных водах района, по всей вероятности, являются водоносные породы. Фтор интенсивно мобилизуется из пород слабоминерализованными щелочными (инфильтрационными) водами. Поэтому максимальные концентрации этого элемента приурочены к наиболее пресной части линзы.

4. Стронцием подземные воды обогащаются за счет целестина, содержащегося в водоносных породах. Интенсивность высвобождения этого элемента, так же как и фтора, зависит от миграционной среды. Стронций хорошо мигрирует в высокоми-

нерализованных, хлоридных водах и плохо — в слабоминерализованных, сульфатных.

Исходя из анализа главных факторов, объединяющих группы генетически связанных параметров, можно указать источники загрязнения подземных вод месторождения в процессе его интенсивной эксплуатации.

1. Поскольку зона влияния инфильтрационного фактора ограничена 4-граммовым контуром минерализации подземных вод альб-сеноманского комплекса, а скважины водозабора, особенно в южной его части, располагаются в непосредственной близости от этого контура, возможно подтягивание к скважинам более соленых некондиционных (4—5 г/л) вод. Этому процессу способствует возрастающая интенсивность эксплуатации водозабора — ввод новых скважин, увеличение по площади воронки депрессии, рост горизонтальных градиентов движения потока подземных вод (см. гл. 8).

2. Возможен также и вертикальный переток некондиционных вод из выше- и нижележащих, более минерализованных горизонтов. Подток может носить как локальный характер (перетекания по зонам тектонических разломов), так и площадной («рассеянный» разгрузка через относительный водоупор). Наиболее опасен локальный переток, так как он ведет к непосредственному смешению слабосоленоватых вод месторождения с солеными водами нижележащих горизонтов. На наличие такого смешения указывает выделенный в большинстве расчетов фактор F_4 , характеризующий поступление в подземные воды альб-сеноманского водоносного комплекса брома и бор-содержащих вод более глубоких структурных этажей.

3. Наряду с определением возможных источников загрязнения подземных вод результаты ФА позволяют, с одной стороны, вскрыть генезис такого биологически активного компонента, как фтор, а с другой — позволяют надеяться на то, что его концентрации не будут возрастать с течением времени, так как источником фтора в подземных водах являются фторсодержащие горные породы (фактор F_2), в которых фтор содержится в незначительном (до 0,01 %) количестве.

4. Менее изучен вопрос, касающийся присутствия в подземных водах стабильного стронция, однако полученные результаты позволяют думать, что стронций, как и фтор представляет собой продукт выщелачивания горных пород.

Результаты ФА были использованы при построении моделей краткосрочного и долгосрочного прогнозов изменения минерализации подземных вод альб-сеноманского водоносного комплекса в процессе их эксплуатации, а также позволили более достоверно обосновать ограничения на изменения гидрогеохимических условий в общей модели оптимизации условий эксплуатации изученного месторождения подземных вод.

Задачи краткосрочного прогнозирования

Проблема охраны подземных вод от загрязнения, особенно для проектируемых и действующих водозаборов, теснейшим образом связана с необходимостью составления гидрогеохимических прогнозов разной заблаговременности. Для составления таких прогнозов чаще всего используются различные аналитические или численные решения, основанные на теории фильтрации или массопереноса [2, 4, 11]. Если водозаборы находятся в сложной природной обстановке, то нередко возникают значительные трудности в достоверном выполнении прогнозных расчетов. Особенно, как показывает наш опыт, весьма полезно использовать вероятностно-статистические подходы к составлению краткосрочных гидрогеохимических прогнозов при наличии длительных наблюдений за режимом подземных вод [7, 23]. Необходимость в таких прогнозах особенно проявляется на стадии эксплуатационной разведки, когда имеется вероятность в процессе эксплуатации ухудшения качества подземных вод, отбираемых для водоснабжения или других нужд. При этом может быть два предельных случая, отличающихся подходом к решению задачи о возможном изменении качества подземных вод: 1) при котором источники и характер их действия как загрязнителей известны и 2) когда такие источники и интенсивность их проявления неизвестны. В первом случае при наличии достаточного объема исходной информации и надлежащей постановке полевых исследований можно выявить физический механизм загрязнения и, используя детерминированный подход, решить задачу. Во втором неопределенность взаимодействий практически исключает использование подобного подхода.

Такое сложное и неопределенное взаимодействие факторов, формирующих естественную гидрогеохимическую обстановку, часто встречается в краевой зоне сложнопостроенных артезианских бассейнов и усиливается эксплуатацией, особенно в аридных районах, где современное инфильтрационное питание не является ведущим источником восполнения эксплуатационных запасов подземных вод. Сложные литолого-фациальные и тектонические условия формируют пространственную изменчивость фильтрационных и емкостных свойств водоносных горизонтов, различную интенсивность и характер их гидравлической связи, что приводит к существованию различных по формированию минерализации и химическому составу подземных вод. При наличии благоприятных геоморфологических, геологических и физико-географических условий на наиболее проницаемых участках могут формироваться линзы пресных и слабоминерализованных вод, которые представляют интерес как источники для водоснабжения. Окружающие их некондицион-

ные (с точки зрения хозяйственно-питьевого или другого водоснабжения) воды условно представляются загрязненными. При эксплуатации водозаборами таких месторождений подземных вод создается сложная обстановка. Помимо влияния естественных факторов возникает еще группа причин, обусловленных техническими условиями самой эксплуатации водозабора. Из них в первую очередь следует назвать: 1) гидродинамическое несовершенство эксплуатационных скважин, которое при изменении нагрузок на скважину может обусловить приток в ее ствол вод с различным составом и минерализацией из различных частей водоносного горизонта; 2) перетекание в основной водоносный горизонт вод с иной минерализацией по затрубному пространству колонн и нарушениям в эксплуатационных колоннах скважин и некоторые другие.

Анализ наблюдений за гидрогеохимическим режимом подземных вод показывает, что действие указанных факторов не всегда проявляется однозначно, и выделить среди них главные, даже на отдельных временных отрезках, не представляется возможным. Однако при решении инженерных гидрогеохимических задач важно представлять не только степень воздействия каждого из факторов, а также и их комплексное влияние на изменение гидрогеохимической обстановки в районе водозабора. Причем одним из главных параметров гидрогеохимического режима, по которому можно характеризовать суммарное влияние действующих факторов, является минерализация подземных вод.

Основываясь на гипотезе о том, что пропорции смешения вод различной минерализации, поступающих в призабойную зону водозаборной скважины, а следовательно, и результирующая, прогнозная минерализация отбираемых вод зависят от режима и интенсивности эксплуатации конкретных скважин. В качестве основного режимобразующего фактора может быть выбран дебит скважин.

В таких случаях можно поставить задачу выявления вероятностной связи между изменениями дебитов действующих водозаборных скважин и минерализацией отбираемой ими подземной воды для каждой скважины в отдельности и в сумме для всех по водозабору. Установив такую связь, можно использовать ее для решения инженерных задач, выполняя на этой основе краткосрочное гидрогеохимическое прогнозирование. Например, на стадии эксплуатационной разведки, когда изучаются условия работы действующего водозабора и выбирается наиболее рациональный вариант его эксплуатации, можно результаты гидрогеохимических прогнозов использовать для решения двух задач: 1) определения тенденций в изменении качества отбираемой воды и 2) корректировки принятых в задаче оптимизации ограничений на диапазон допустимых изменений минерализации воды от регулируемых величин дебитов эксплуатационных скважин.

В качестве метода краткосрочного прогноза изменения минерализации подземных вод может быть использован аппарат парного корреляционного анализа или индуктивный метод самоорганизации моделей на ЭВМ в алгоритмах МГУА. Оба подхода позволяют в условиях влияния на функцию минерализации нескольких факторов оценить ее зависимость от главного режимобразующего фактора. Рассмотрим методологические принципы такого прогнозирования.

Основные принципы краткосрочного гидрогеохимического прогноза на действующем водозаборе

Задача составления краткосрочного прогноза изменения минерализации воды в процессе эксплуатации водозабора включает: 1) изучение естественной гидрогеохимической обстановки месторождения и выделение главных режимобразующих факторов; 2) изучение созданной эксплуатацией водозабора гидрогеохимической обстановки и районирование зоны его влияния по степени суммарного воздействия гидродинамических и гидрогеохимических факторов, влияющих на изменение минерализации отбираемых подземных вод; 3) подготовка и обоснование исходных данных; 4) построение серии конкурирующих прогнозных уравнений связи $M=f(Q)$ по каждой скважине и выбор уравнения, обладающего наилучшей прогнозирующей способностью; 5) составление краткосрочных прогнозов и оценка минерализации отбираемой воды $M_{пр}$ по прогнозному значению дебита $Q_{пр}$.

Этап выявления главных режимобразующих факторов, сформировавших в геологическом аспекте естественную гидрогеохимическую обстановку, изложен в первой части настоящего раздела. Содержание второго этапа определяется конкретной гидрогеологической обстановкой месторождения подземных вод, поэтому рассмотрим его при изложении конкретного примера, а сейчас приведем основные методологические принципы построения вероятностно-статистических гидрогеохимических моделей.

Данные, исходные для составления гидрогеохимического прогноза, представляются в виде временных рядов $M=f(t)$ и $Q=f(t)$. Экспериментальные значения M и Q , включаемые в статистические выборки, должны быть предварительно отбраны (во избежание использования ошибочных определений) и округлены с точностью, не превышающей погрешность их определения.

Использование материалов режимных наблюдений как за гидрогеохимическими, так и гидродинамическими параметрами при статистической обработке подразумевает интерполяцию рядов исходных данных, поскольку одним из требований, органичивающих применение корреляционного анализа, является син-

хронность измерения коррелируемых параметров. На практике измерения расходов (Q) скважин и значений минерализации (M) отбираемых вод часто смещены по времени. В этом случае возникает необходимость оценить погрешность, которая возникает при интерполяции. Это важно для правильного выбора интервала дискретизации. Можно свести к минимуму эту погрешность путем выбора оптимального интервала интерполяции временных рядов, исходя из конкретных частот замеров параметров M и Q . С этой целью использовалась так называемая граничная частота Найквиста f_c . В работе Дж. Бендата и А. Пирсона «Измерение и анализ случайных процессов» показано, что с учетом граничной частоты шаг дискретизации записывается как $h=1/2f_c$.

Здесь f_c характеризует средний интервал (период) между двумя соседними замерами коррелируемых параметров $T_{ср}$: $f_c=1/T_{ср}$.

Обычно частота замеров минерализации подземных вод по скважинам составляет в среднем 4—6 точек в год, т. е. каждая точка характеризует 2—3-месячный период. Поскольку наблюдения за изменением дебита водозаборной скважины производятся чаще (не реже 1 раза в месяц), значения функции $Q=f(t)$ осредняются в пределах 2—3-месячного периода ($T_{ср}=2,5$ мес). Отсюда согласно формуле дискретизации значение $f_c=0,4$, а шаг дискретизации $h=1/2 \cdot 0,4=1,3$ мес.

С указанным шагом функции $M=f(t)$ и $Q=f(t)$ на временном отрезке 15—16 лет может быть выделено 125—130 интервалов синхронных значений минерализации и дебита.

Расчет уравнений связи $M=f(Q)$ для каждой водозаборной скважины выполняется в нескольких вариантах с целью выбора наилучшей модели, обладающей максимальной прогнозирующей способностью.

Задача может решаться двумя путями.

1. Построение кривых регрессии $M_i=f(Q_i)$ вида $M_i=a_{0i}+a_{1i}Q_i$; $M_i=a_{0i}+a_{1i}Q_i+a_{2i}Q_i^2$; $M_i=a_{0i}+a_{1i}Q_i+a_{2i}Q_i^2+a_{3i}Q_i^3$ и т. д. по методу наименьших квадратов. Метод широко освещен в специальной литературе, поэтому здесь не будем останавливаться на его особенностях. Выбор оптимального уравнения связи $M=f(Q)$ выполняется в этом случае в значительной мере волевым способом, по величине корреляционного отношения η . По данным работы А. А. Коноплянцева, С. М. Семенова «Прогноз и картирование режима грунтовых вод», вышедшей в 1974 г., можно сказать, что наилучшей прогнозирующей способностью обладают уравнения, для которых корреляционная связь M с Q характеризуется $\eta=0,8$ и выше.

В данной книге по величине корреляционного отношения η дается оценка точности методики. Так, при $\eta \geq 0,9$ хорошая; $\geq 0,8$ — удовлетворительная; $\geq 0,6$ — слабая; $\leq 0,6$ — неудовлетворительная.

Прогнозирующая способность уравнения регрессии может

быть ориентировочно оценена также с помощью среднеквадратической погрешности корреляционного отношения

$$m = (1 - \eta^2) / \sqrt{n}, \quad (284)$$

где n — число коррелируемых членов.

Отношение η/m характеризует тесноту корреляционной связи параметров M и Q и должно быть не менее 3 единиц.

2. Расчет гидрогеохимических моделей $M = f(Q)$ с помощью комбинаторного алгоритма МГУА, реализованного в виде вычислительной программы COMBI. Основные принципы метода МГУА и выбора модели оптимальной сложности приведены в главе 8. Здесь только остановимся на главных особенностях его применения к составлению гидрогеохимических прогнозов.

В качестве опорной функции для составления уравнений связи $M = f(Q)$ использовался полином Колмогорова — Габора, максимальная степень которого принималась $\sigma = 4$, а число аргументов $l = 1$. Полная структура полинома имеет вид

$$M_i = a_{0i} + a_{1i}Q_i + a_{2i}Q_i^2 + a_{3i}Q_i^3 + a_{4i}Q_i^4, \quad (285)$$

где $i = 1, 2, \dots, N$ — номер водозаборной скважины.

Поскольку искомая модель должна наиболее полно отвечать физическому смыслу и в то же время обладать высокой прогнозирующей способностью, в качестве критерия выбора лучшей модели целесообразно использовать комбинаторный критерий, состоящий из нормированных значений критериев несмещенности и регулярности. Все исходные данные были разделены на обучающуюся A , проверочную B и экзаменуемую C последовательности в соотношении 45:45:10. В результате поочередного зануления коэффициентов полинома (285) сформировано 31 частное описание вида $M = a_0$; $M = a_0 + a_1Q$; $M = a_1Q$, $M = a_0 + a_4Q^4$ и т. д., коэффициенты которых оценивались по фактическим данным замеров минерализации воды и дебитов скважин, на основе метода наименьших квадратов. Для каждого частного описания определялись критерии: 1) несмещенности $K_{см}$ по зависимости (214) и его нормированное значение $K_{см}/K_{см\max}$; 2) регулярности K_p по зависимости (213) и его нормированное значение $K_p/K_{p\max}$; 3) комбинаторный K_1 по формуле (216), а также среднеквадратическое отклонение (СКО) модельных значений минерализации от фактических по всем точкам и ошибка на экзамене (ОЭ). По минимуму K_1 определялась оптимальная структура прогнозирующей модели и соответствующие ей коэффициенты полинома. Как выяснилось в процессе расчетов, выбор модели зависит от порядка разбиения опытных данных на последовательности A , B и C . Поэтому лучшим считалось такое разбиение, при котором минимальное значение K_1 было максимально (принцип «минимакса»).

Составление краткосрочного гидрогеохимического прогноза на действующем водозаборе

Рассмотрим решение этой задачи на примере крупного водозабора, действующего в краевой части артезианского бассейна, краткая характеристика которого приведена в главе 8 (см. рис. 93).

По результатам изучения процесса формирования химического состава подземных вод, выполненного выше с помощью факторного анализа, были установлены основные факторы, действующие в естественных условиях: 1) взаимосвязь водоносных горизонтов и, главным образом, локальное перетекание по зонам тектонических нарушений (что часто бывает в зоне краевой разгрузки артезианских вод); 2) подтягивание вод с иной минерализацией в плане. В процессе создания и эксплуатации крупных водозаборов происходит изменение интенсивности гидравлической связи водоносных горизонтов между собой, изменяются также гидродинамические условия внутри самих рабочих горизонтов, что может вызвать активизацию влияния естественных факторов, определяющих некондиционные значения минерализации подземных вод месторождения.

Районирование территории водозабора производится по степени воздействия факторов, влияющих на изменение минерализации отбираемых подземных вод. По соотношению минерализаций подземных вод район расположения водозаборных скважин разделен на 5 участков.

Как видно из табл. 49, по мере движения вдоль водозаборного ряда с юга на север (от скв. 1 к скв. 29) разница минерализации воды в соседних горизонтах закономерно изменяется, уменьшаясь от 2—4 до 0,9—1 г/л. Это позволяет сделать вывод о том, что общая минерализация и состав подземных вод альб-сеноманского комплекса в центральной и северной частях водозаборного ряда (скв. 12—29) формируются в основном за счет смешения вод всех трех рабочих горизонтов. Связь между горизонтами осуществляется по зонам тектонических наруше-

Таблица 49

Соотношения минерализаций подземных вод

Номера выделенных участков	Номера скважин	Минерализация подземных вод, г/л			Разница минерализации в соседних горизонтах, г/л	
		Сеноманский горизонт	Альбский горизонт		Сеноманский и первый альбский	Второй и первый альбский
			Первый	Второй		
I	1—5	5,0—8,5	3,0—4,0	7,0—8,0	2,0—4,5	4,0
II	5—12	3,5—5,0	2,5—3,0	5,0—7,0	1,0—2,0	2,5—4,0
III	12—18	3,0—3,5	2,25—2,5	3,0—5,0	0,7—1,0	0,7—2,5
IV	18—22	3,0	2,1—2,5	3,0—3,5	0,5—0,9	1,0
V	22—29	3,0—4,0	1,9—2,0	3,0—3,5	2,0	1,0—1,5

ний, оперяющих периклинальную часть пересекающей водозаборный ряд положительной структуры. Здесь наблюдается увеличение песчанистости водоносных отложений, уменьшение в них количества глинистых прослоев и в связи с этим улучшение фильтрационных свойств (km достигает 80—100 м²/сут).

В южной части водозаборного ряда влияние фактора перетекания выражено менее активно, на что указывает устойчивое, значительное различие в минерализации подземных вод соседних горизонтов, достигающее 4,0—4,5 г/л в районе скв. 1—5. Помимо этого, в южной части водозабора увеличивается глинистость водоносных коллекторов, ухудшаются их фильтрационные свойства (km уменьшается до 30—60 м²/сут).

Для оценки возможности подтягивания вод с иной минерализацией в плане на ЭВМ выполнены расчеты величин горизонтальных скоростей движения контуров, разделяющих воды с различной минерализацией. Аналитические расчеты выполнены по фильтрационным схемам, обеспечивающим получение максимальных значений искомых скоростей. Для сравнения аналогичные оценки сделаны по схеме поршневого вытеснения с использованием средних градиентов, создающихся в зоне влияния водозабора в процессе его эксплуатации [7]. С этой целью использовались результаты моделирования как обратных, так и прогнозных задач на ЭВМ. Результаты показали, что порядок горизонтальных скоростей составляет $n \cdot 10^{-2}$ — $n \cdot 10^{-3}$ м/сут, т. е. первые метры в год, и, следовательно, фактор может играть роль только в условиях близкого расположения скважин к контуру вод с иной минерализацией. Если сравнивать различные участки водозабора по удаленности от него 3-граммового контура, то эти условия не одинаковы для южной и северной его частей (см. рис. 93). Так, в северной части водозаборного ряда (участки IV и V, табл. 49) этот контур удален от него на 7—10 км, в южной — всего на 1—2 км (скв. 1—12, участки I, II) и пересекает водозаборный ряд в районе скв. 5. Скважины 1—5 располагаются уже в зоне распространения вод с минерализацией до 4 г/л. Таким образом, условия для подтягивания к водозабору вод с иной минерализацией в плане наиболее благоприятны в районе скв. 1—12. Градиент изменения минерализации по длине водозаборного ряда составляет здесь величину порядка 0,1—0,2 г/л·км, а для центральной и северной частей значения его не превышают 0,05 г/л·км.

Большинство эксплуатационных скважин водозабора характеризуется различной степенью гидродинамического несовершенства вскрытия водоносного пласта. Это обстоятельство при изменении минерализации воды по глубине водоносного горизонта создает предпосылки для изменения минерализации отбираемых вод в процессе эксплуатации с разной интенсивностью водоотбора. Действие этого фактора может проявляться в южной части водозаборного ряда (см. табл. 49, участки I,

Номер скважин	Номер модели	Вид модели	Характеристика модели					
			СКО, %	$K_{cm} \cdot 10^{-4}$	$K_{cm}/K_{cm \max}$	$K_p/K_{p \max}$	K_i	ОЭ, %
24	1	$M = 2075$	4,96	0,23	0,044	0,562	0,563	3,12
	2	$M = 2107 - 3,156 \cdot 10^{-2} Q$	4,81	3,39	0,635	0,834	1,048	3,21
	3	$M = 2092 - 1,048 \cdot 10^{-5} Q^2$	4,86	5,16	0,967	0,944	1,351	3,36
26	1	$M = 1994 - 3,966 \cdot 10^{-6} Q^3$	4,14	4,72	0,129	0,113	0,172	2,83
	2	$M = 1981 - 2,184 \cdot 10^{-11} Q^4$	4,12	4,71	0,129	0,316	0,341	2,94
	3	$M = 2013 - 6,865 \cdot 10^{-2} Q$	4,19	5,96	0,164	0,407	0,438	3,01

II, скв. 1—12), где по экспериментальным данным разница для верхней и нижней частей первого альбского горизонта достигает максимальных значений—0,5—0,8 г/л. По-видимому, определенное влияние на перераспределение водопритока из различных частей горизонта оказывает также процесс образования каверн вблизи фильтров эксплуатационных скважин, что связано с изменением скоростей фильтрации в призабойной зоне. Выделить из приведенной группы факторов главные очень сложно. Можно говорить только о преобладающем влиянии локальной взаимосвязи горизонтов в северной части водозабора (скв. 12—29) или о возможном влиянии подтягивания более соленых вод с флангов месторождения и из нижних частей горизонтов на юге (скв. 1—12). Однако в целом по водозабору и для отдельных эксплуатационных скважин эти факторы действуют одновременно, что и учитывает математическая модель, построенная по методу МГУА.

Конкурирующие прогнозирующие гидрогеохимические модели были рассчитаны с помощью метода МГУА для 29 водозаборных скважин, вскрывающих основной первый альбский водоносный горизонт месторождения. В качестве примера в табл. 50 приведены основные характеристики по трем моделям, выбранным с помощью указанных выше алгоритмов и критериев для скважин 24 и 26. Величины СКО, полученные на всех опытных точках, приблизительно одинаковы и не могут служить критерием выбора лучшей структуры модели. Для этого используются критерии внешнего дополнения K_{cm} , K_p и K_i , величины которых также представлены в табл. 50. По минимуму комбинированного критерия K_i в качестве моделей оптимальной сложности, обладающих наилучшими прогнозирующими возможностями, выбраны: для скв. 24 (рис. 94, а) $M = 2075$ (т. е. $M = \text{const}$), для скв. 26 (см. рис. 94, б) $M = 1994 -$

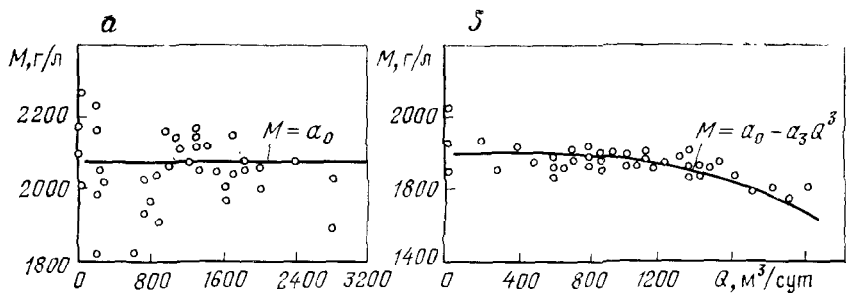


Рис. 94. Кривые зависимости минерализации от дебита водозаборных скважин

— $3,966 \cdot 10^{-8} Q^3$. Сам прогноз минерализации $M_{\text{пр}}$ отбираемых вод с заблаговременностью на 1 год рассчитывается подстановкой в выбранное уравнение прогнозного значения дебита $Q_{\text{пр}}$. На основании анализа характера взаимосвязи параметров M и Q , все скважины водозабора можно разделить на 2 группы: 1) скважины, по которым с увеличением водоотбора (Q) отмечается уменьшение минерализации воды (M); 2) скважины, в которых с увеличением дебита измерений минерализации отбираемой воды не происходит ($M = \text{const}$). Интересно проследить расположение скважин этих групп в пределах месторождения подземных вод. Так, скважины, относящиеся к первой группе, располагаются в концевых частях водозаборного ряда (см. табл. 49, скв. 2 и 4 в южной части водозабора, скв. 20, 21, 22, 26 — в северной), а в центральной части водозабора группируются скважины, по которым минерализация воды не изменяется с изменением дебита (см. табл. 49, скв. 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14 и др.). Заметим, что скважины 2-й группы значительно больше (70 %), чем 1-й. Это позволяет сделать вывод о том, что по большинству скважин водозабора режим изменения минерализации отбираемых вод не зависит от режима эксплуатации водозабора. Изменение минерализации отбираемых вод в концевых частях водозаборного ряда различно для южной и северной его частей (см. рис. 94). Так, на севере некоторое опреснение отбираемой воды при увеличении дебита скважин можно объяснить подтягиванием более пресных вод из центральной и северной частей линзы. Уменьшение минерализации подземных вод в южной части водозабора (скв. 2, 4), очевидно, обусловлено гидродинамическим несовершенством этих скважин: фильтры их располагаются в верхней части водоносного горизонта, что способствует образованию у кровли пласта прифильтровой каверны, по которой в ствол скважины поступает более пресная вода из верхней части горизонта. Данные краткосрочных гидрогеохимических прогнозов позволили в процессе решения задачи о выборе оптимального варианта эксплуатации водозабора исключить из целевой функции гидрогеохимические ограничения.

Проблема охраны подземных вод от загрязнения и истощения в условиях интенсивного техногенного воздействия является одной из ведущих проблем современной гидрогеологии как в области теоретических исследований, так и решения прикладных задач. Сложность и широта проблемы, ее многоплановость, а также ограниченность исследованных аспектов не позволили авторам с необходимой полнотой осветить научно-методические принципы комплексного изучения и прогнозирования процессов загрязнения и истощения подземных вод. Однако авторы полагают, что полученные методические и практические результаты позволяют им высказать следующее.

1. Гидрогеологические исследования в области охраны окружающей природной среды, в том числе подземных вод, от загрязнения и истощения имеют большую практическую значимость, результаты этих исследований являются базой для решения многих экологических задач, которыми занимаются специалисты сопредельных наук, в частности, инженерной геологии, почвоведения и др.

2. В развитии теоретических исследований миграции загрязняющих компонентов в подземных водах успешно используются для прогнозирования и определения расчетных миграционных параметров гидродинамические модели конвективного и диффузионно-конвективного массопереноса, различным образом учитывающие сопровождающие перенос физико-химические взаимодействия. Имеющиеся данные указывают на неоднозначность идентификации натурального процесса миграции аппроксимирующими его существующими математическими моделями. Нужны иные подходы. Однако достоверность идентификации и надежность определения миграционных параметров могут быть повышены использованием при диагностике и интерпретации данных опытно-миграционных исследований ЭВМ и комплексных пакетов-программ типа СОРМ, характеризующих типовые модели и позволяющих оценивать статистическими критериями выбор наилучших из них для аппроксимации изученных процессов миграции.

3. В исследованиях процесса миграции загрязняющих веществ в подземных водах особое место занимает изучение физико-химических процессов и форм миграции веществ в подземных водах, взаимодействия загрязняющих веществ с горными породами, живыми организмами и пластовыми водами, влияния этих и биологических процессов на миграцию подземных вод и гидрохимическую структуру потока, на фильтрационные и емкостные свойства пород, структуру их порового пространства как

сложной целостной гидрогеологической системы. Эти процессы изучены еще мало, многие из них проявляются по-разному в различной геохимической обстановке, в статических и динамических условиях. Необходимо развивать и углублять физико-химическое теоретическое обоснование этих гидрогеохимических и биологических взаимодействий, разрабатывать методику их изучения отдельно и обобщенно в лабораторных и полевых условиях. При этом важна комплексность подхода, позволяющая одновременно вести гидродинамические, физико-химические, биологические и температурные исследования. Только в этом случае можно получить необходимое обоснование надежности широко используемых сейчас в гидродинамических моделях массопереноса обобщенных параметров, таких как эффективная пористость, коэффициенты гидродисперсии, массообмена и возможность их переноса на прогностические модели.

4. Полезно наряду с известными физико-химическими и термодинамическими методами изучения процессов миграции загрязняющих веществ в подземных водах развивать и другие теоретические подходы и описывать процессы миграции загрязнителей и иных компонентов в гидродинамическом потоке подземных вод с позиций молекулярно-кинетической теории. Особенностью такого подхода является учет не только концентрации мигрирующего вещества, но и подвижности его частиц, которая коррелирует с коэффициентом активности компонента. Выдвигается положение о том, что каждый компонент раствора в гидродинамическом потоке имеет свою физическую скорость миграции, тогда как структура и размеры порового пространства, в котором происходит миграция, являются едиными для различных компонентов.

В соответствии с молекулярно-кинетическим подходом к изучению массопереноса сорбция в динамических условиях рассматривается как торможение частиц потока, связанное с их взаимодействием с адсорбционными центрами водовмещающих пород. Предлагаемая молекулярно-кинетическая модель миграции выведена и проверена экспериментально пока для сравнительно простых условий квазистационарной одномерной фильтрации при постоянстве на входе концентрации мигрирующего вещества и может рассматриваться как базовое решение. Однако в будущем она может быть развита и для многомерной фильтрации с переменной концентрацией загрязнителей и других компонентов на входе. Этот переход к более сложным случаям фильтрации подземных вод облегчается логической связью предполагаемой математической модели с основным законом фильтрации.

5. Эффективность дальнейших теоретических и экспериментальных исследований физико-химических, биологических и гидродинамических особенностей процесса миграции загрязняющих и других компонентов в подземных водах зависит от взаимной увязки и тесного комплексирования геофильтрационных, геохи-

мических, геотермических, гидрогеобиологических исследований как единого целостного подхода, конкретные методы исследований которого специально должны быть ориентированы на решение проблемы охраны подземных вод.

6. Гидрогеологические (в том числе гидродинамические, гидрогеохимические, гидрогеотермические, гидрогеобиологические) прогнозы на современном этапе должны отвечать требованиям непрерывности, адаптации обратной связи, целостности и оптимальности. Аналогичные требования относятся также к процессу схематизации гидрогеологических условий и построению моделей на всех стадиях разведки. Отражают они стадийность изучения объекта в процессе изысканий и его эксплуатации.

7. Находимо дальнейшее развитие гидродинамических методов оценки восполнения эксплуатационных запасов подземных вод в сложных условиях, в частности, с учетом постепенного заиливания инфильтрационных сооружений. Это определяется тем, что одним из рациональных средств борьбы с истощением ресурсов подземных вод является восполнение их запасов путем перевода части поверхностного и речного стока в подземный через систему инфильтрационных бассейнов. Эффективность таких мероприятий определяется в значительной мере режимом работы этих бассейнов и их взаимодействием с водозаборами. Управление этим процессом базируется на использовании количественных методов расчета.

АСУ-Водозабор позволяет на стадии эксплуатационной разведки рационально управлять не только режимом эксплуатации действующего водозабора, но и режимом подземных вод в пределах всего месторождения.

Эффективность дальнейших исследований по проблеме охраны и рационального использования подземных вод требует не только совершенствования научно-методических основ ее изучения, но и организации контроля и проведения целенаправленных систематических наблюдений на реальных типовых объектах (мониторинга), данные по которым позволяют более глубоко изучить физику реальных процессов тепломассопереноса, физико-химических и других взаимодействий в системе подземная вода как сложный раствор — порода — газ — живое вещество, развивать теоретические и экспериментальные методы исследований, разрабатывать эффективные способы ведения изысканий, вовремя предупреждать загрязнение и истощение подземных вод, осуществляя оптимальное управление их эксплуатацией.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Аверьянов С. Ф. Борьба с засолением орошаемых земель. М., Колос, 1978.
2. Бер Я., Заславски Д., Ирмей С. Физико-математические основы фильтрации воды. М., Мир, 1971.
3. Белоусова А. П., Гавич И. К. Изучение процессов солепереноса в породах зоны аэрации и грунтовых водах БСК-4 лабораторными методами. Геология и разведка. — Изв. вузов, 1983, № 8, с. 111—116.
4. Бочевер Ф. М., Лапшин Н. Н., Орадовская А. Е. Защита подземных вод от загрязнения. М., Недра, 1979.
5. Великов Б. Роль физико-химических процессов в миграции загрязнителей в подземных водах; Ежегодник Высшего горно-геол. ин-та, том 28. София, 1980—1981 г., с. 303—315.
6. Веригин Н. Н., Шержуков Б. С. Диффузия и массообмен при фильтрации жидкостей в пористых средах. — В кн.: Развитие исследований по теории фильтрации в СССР. М., 1969, с. 237—313.
7. Гавич И. К. Теория и практика применения моделирования в гидрогеологии. М., Недра, 1980.
8. Гавич И. К., Михайлова А. В., Тумаркин Г. Ц. Методы системного анализа мелиорации и водного хозяйства /Под ред. Б. Г. Штепы. («Оптимизация водозаборно-дренажных скважин»). Л., Гидрометеониздат, 1983, с. 121—134.
9. Гидродинамические и физико-химические свойства горных пород /Н. Н. Веригин, С. В. Васильев, В. С. Саркисян, Б. С. Шержуков. М., Недра, 1977.
10. Гидродинамическое обоснование выбора оптимальных условий эксплуатации месторождения подземных вод комплексным моделированием на АВМ и ЭВМ /Гавич И. К., Ленченко Н. Н., Михайлова А. В., Тумаркин Г. Ц. — Изв. вузов. Сер. геология и разведка, 1974, № 3, с. 89—94.
11. Гольдберг В. М., Газда С. Гидрогеологические основы охраны подземных вод от загрязнения. М., Недра, 1984.
12. Гылыбов М. М. К расчету восполнения запасов подземных вод в условиях постепенного заиливания инфильтрационных сооружений. Докл. Междунар. ассоциации гидрогеол. (МАГ), т. 15, Вильнюс, 1979, с. 317—322.
13. Гылыбов М. М. Миграция загрязнителей в водоносном пласте при переменной интенсивности загрязнения на границе. Науч. конф. по моделированию миграции в подзем. водах. Т. 1. Дрезден, Технолог. ин-т, 1979, с. 94—100.
14. Гылыбов М. М., Пенчев П. К методике определения гидрогеологических параметров массопереноса в водоносных пластах — Труды Болгар. геол. о-ва, № 3, 1984, 25 с.
15. Девис Дж. Статистика и анализ геологических данных. М., Мир, 1977.
16. Йереско К. Г., Клован Ди, Реймент Р. А. Геологический факторный анализ. Л., Недра, 1980.
17. Ивахненко А. Г. Долгосрочное прогнозирование и управление сложными системами. Киев, Техника, 1975.
18. Ивахненко А. Г. Индуктивный метод самоорганизации моделей сложных систем. Киев, Наукова думка, 1982.
19. Искусственное пополнение подземных вод в системах хозяйственно-питьевого водоснабжения /В. М. Берданов, К. С. Боголюбов, Е. Е. Моложавая и др. М., Стройиздат, 1978.
20. Крайнов С. Р., Швеи В. М. Основы геохимии подземных вод. М., Недра, 1980.
21. Кульчицкий Л. И., Усъяров О. Г. Физико-химические основы формирования свойств глинистых пород. М., Недра, 1981.
22. Лаврентьев А. М. Оценка питания грунтовых вод на территории Б. Ставропольского канала путем анализа влагопереноса в зоне аэрации. — Изв. вузов. Сер. Геология и разведка, 1979, № 8, с. 46—79.
23. Лисенков А. Б., Денисов В. А. Генетические связи элементов хими-

ческого состава подземных вод Южного Мангышлака, изученные с помощью факторного анализа. — Изв. вузов. Сер. Геология и разведка, 1977, № 8, с. 83—92.

24. МIRONENKO В. А., РУМИНИН В. Г., УЧАЕВ В. К. Охрана подземных вод в горнодобывающих районах. Л., Недра, 1980.

25. ОКУНЬ Я., Факторный анализ. М., Статистика, 1976.

26. ПЕНЧЕВА Е., ПАВЛОВА В. Влияние сорбционно-осадочных и ионообменных природных барьеров на миграцию индикаторов с аномальной концентрацией в щелочных, нейтральных и кислых водах. Болгар. АН инж. геол. и гидрогеол., № 7, 1978, 3—16.

27. ПЕНЧЕВ П. Операционно-регрессионная модель для интерпретации экспериментальных исследований массопереноса в подземных водах. Канд. дисс. София, 1980, 183 с.

28. ПЕНЧЕВ П., ВЕЛИКОВ Б. Экспериментальные исследования одновременной миграции тяжелых металлов в песках средней крупности. — Изв. вузов. Сер. Геология и разведка, 1982, № 2, с. 110—116.

29. ПЛОТНИКОВ Н. А. Проектирование систем искусственного восполнения подземных вод для водоснабжения. М., Стройиздат, 1983.

30. РОШАЛЬ А. А. Методы определения миграционных параметров. М., ВИЭСМС, 1980, 62 с. (Обзор ГГИ).

31. САМОЙЛОВ О. Я. Структура водных растворов электролитов и гидратация ионов. М., изд-во АН СССР, 1957.

32. САМОЙЛОВ О. Я., СОКОЛОВ Д. С. Влияние ионов натрия и кальция на миграцию бора в подземных рассолах. Докл. АН СССР, 1960, т. 133, № 6, с. 1428—1430.

33. САМОЙЛОВ О. Я. Общие вопросы теории гидратации ионов в водных растворах. — В кн. Состояние и роль воды в биологических объектах. М. 1967, с. 31—40.

34. САМОЙЛОВ О. Я. К основам кинетической теории гидрофобной гидратации в разбавленных водных растворах (об эффекте препятствий) — Журнал физической химии, 1978, т. 52, вып. 8, с. 1857—1860.

35. ТЮТЮНОВА Ф. И. Физико-химические процессы в подземных водах. М., Наука, 1978.

36. УГОРЕЦ В. И. Оптимизация режима эксплуатации месторождения подземных вод в сложных гидрогеологических условиях на основе индуктивного метода самоорганизации моделей на ЭВМ. — Изв. вузов. Сер. Геология и разведка, 20 с.

37. УСЕНКО В. С. Искусственное восполнение запасов и инфильтрационные водозаборы подземных вод. Минск, Наука и техника, 1972.

38. Физико-химические процессы в глинистых породах/Под ред. Ю. Б. Осипова, М., изд-во МГУ, 1980.

39. Формирование подземных вод как основа гидрогеологических прогнозов. Материалы I-ой Всес. гидрогеол. конф. М., Наука, 1982, т. 1, 424 с., т. 2, 358 с.

40. ХИММЕЛЬБЛАУ Д. Прикладное нелинейное программирование. М., Мир, 1975.

41. ШЕСТАКОВ В. М. Динамика подземных вод. М., Изд-во МГУ, 1979.

42. ЭРДЕИ-ГРУЗ Т. Явления переноса в водных растворах. М., Мир, 1976.

43. FRIED J. J. Groundwater pollution, Elsevier sci. publ. comp., Amsterdam, 1975.

44. FRIMMEL F. Komplexierung von Metallionen durch Gewässerhuminstoffe, Z. Wasser Abwasser Forsch., 14, 1981, N 1. 7—10.

45. FRIMMEL F. H., J. GEYWITZ und B. L. VETKOV Modellversuche zum Ligandeneinfluss auf den Schwermetall transport im Grundwasser, Vom Wasser, 61, 1983, 17—29.

46. LOEBERING H. G. L. WEIL, K.-E. QUENTIN: Analytik der Pestizide in Wasser, Vom Wasser, 51, 1978, 265—271.

47. OGATA A. Theory of Dispersion in Granular Media, U. S. Geol. Survey, Prof. Paper, 1—411, 1970.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие. <i>И. К. Гавич, В. М. Швец</i>	3
---	---

ЧАСТЬ I

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПОДЗЕМНЫХ ВОД

Глава 1. Физико-химические (гидрогеохимические) и биогеохимические процессы, обуславливающие миграцию загрязнителей в подземных водах	5
Общая постановка задач исследований. <i>Б. Великов</i>	5
Процессы элиминирования. <i>Б. Великов</i>	7
Процессы ремобилизации. <i>Б. Великов</i>	15
Процессы сочетания элиминирования и ремобилизации. <i>Б. Великов</i>	16
Санитарно-гигиенические аспекты изучения распространения загрязнений в подземных водах. <i>Ю. А. Рахманин</i>	24
Глава 2. Особенности гидрогеохимических процессов миграции загрязнителей в подземных водах с позиций молекулярно-кинетической теории водных растворов	31
Основные представления молекулярно-кинетической теории водных растворов. <i>А. Б. Воронов</i>	31
Микрозональность порового пространства водоносных пород в соответствии с особенностями теплового движения частиц раствора. <i>А. Б. Воронов</i>	37
Основные расчетные формулы миграции загрязнителей в подземных водах с позиций молекулярно-кинетической теории водных растворов. <i>А. Б. Воронов</i>	43
Оценка соответствия молекулярно-кинетической модели миграции загрязняющих компонентов экспериментальным данным. <i>А. Б. Воронов</i>	54
Лабораторные исследования на основе молекулярно-кинетической модели. <i>А. Б. Воронов, Н. Н. Муравьева</i>	57
Экспериментальные исследования процессов миграции при изучении проблемы глубокой очистки бытовых сточных вод в естественных коллекторах. <i>Н. Н. Муравьева, И. К. Гавич</i>	62
Глава 3. Расчеты миграции загрязнителей в водоносных пластах и интерпретация опытно-миграционных исследований	73
Основные расчетные модели массопереноса в фильтрационной среде. <i>М. Гылыбов, П. Пенчев</i>	73
Миграция загрязнителей в водоносных пластах при переменной интенсивности загрязнения на границах. <i>М. Гылыбов</i>	81
Интерпретация миграционных исследований и определение миграционных параметров с применением ЭВМ. <i>П. Пенчев</i>	90
Глава 4. Лабораторные исследования процессов миграции загрязнителей. Б. Великов	106
Модельные исследования для определения параметров главных физико-химических процессов	106
Миграционные исследования и определение форм элиминирования	121
Исследования по выбору индикатора при миграционных опытах	138

Глава 5. Полевые исследования миграции и определение миграционных параметров с применением ЭВМ. П. Пенчев	143
Проведение ОМИ в условиях откачки и интерпретация выходных данных с применением программы CORM	144
Опытно-миграционные исследования в нижнемеловом карстовом водоносном горизонте (район г. Шумен, НРБ)	146
Опытно-миграционные исследования в водоносном горизонте четвертичных аллювиальных отложений (район г. Софии, НРБ)	151
Глава 6. Прогноз влияния орошения на качество подземных вод	158
Гидрогеохимические прогнозы в проблеме охраны подземных вод на мелиорируемых территориях. <i>И. К. Гавич</i>	158
Схематизация гидродинамических и гидрохимических условий применительно к определению миграционных параметров. <i>А. П. Белоусова</i>	167
Характеристика физико-химических процессов в системе порода — вода. <i>А. П. Белоусова</i>	172
Математические модели солепереноса в породах зоны аэрации. <i>А. П. Белоусова</i>	173
Экспериментальные исследования процессов солепереноса на водно-балансовых участках. <i>И. К. Гавич, А. П. Белоусова</i>	174
Определение миграционных параметров солепереноса по экспериментальным данным. <i>И. К. Гавич, А. П. Белоусова</i>	179
Прогноз изменения качества подземных вод под влиянием орошения. <i>И. К. Гавич, А. П. Белоусова</i>	192
Оценка результатов предварительного прогноза изменения гидрохимических условий. <i>И. К. Гавич, А. П. Белоусова</i>	211
ЧАСТЬ II	
РАЦИОНАЛЬНОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОДЗЕМНЫХ ВОД КАК МЕТОД ОХРАНЫ ИХ ОТ ИСТОЩЕНИЯ	
Глава 7. Восполнение запасов подземных вод с учетом постепенного заилиenia инфильтрационных сооружений. М. Гылыбов	215
Изменение отдачи инфильтрационных сооружений при их эксплуатации	216
Повышение уровня подземных вод под действием инфильтрационных сооружений в условиях постепенного заилиenia	220
Расчет взаимодействия инфильтрационных сооружений с водозаборами	224
Глава 8. Оптимизация эксплуатации месторождения подземных вод на основе АСУ-Водозабор в сложных гидрогеологических условиях	229
Задачи оптимизации и управления при разработке месторождений подземных вод. <i>И. К. Гавич, В. И. Угорец</i>	229
Общие принципы решения задач оптимизации. <i>И. К. Гавич, А. В. Михайлова, В. И. Угорец</i>	238
Виды и методы построения математических моделей. <i>И. К. Гавич, В. И. Угорец</i>	249
Построение модели гидравлической системы пласт — скважины — насосы — водоводы. <i>В. И. Угорец</i>	264
Управление режимом эксплуатации действующего водозабора. <i>В. И. Угорец, И. К. Гавич, А. В. Михайлова</i>	269
Глава 9. Гидрогеохимические прогнозы на действующем водозаборе	286
Факторный анализ при решении вопросов формирования химического состава подземных вод и выявления естественных источников их загрязнения в процессе эксплуатации. <i>А. Б. Лисенков, В. М. Швец</i>	286
Краткосрочные гидрогеохимические прогнозы. <i>А. Б. Лисенков, И. К. Гавич, В. И. Угорец</i>	305
Заключение	314
Список литературы	317