

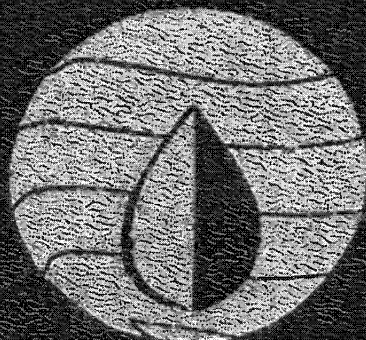
ОХРАНА ГЕОЛОГИЧЕСКОЙ СРЕДЫ

В.А. МИРОНЕНКО
В.Г. РУМЫНИН

ПРОБЛЕМЫ ГИДРОГЕОЭКОЛОГИИ

ТОМ 1

Теоретическое изучение
и моделирование
геомиграционных
процессов



**В.А. МИРОНЕНКО
В.Г. РУМИНИН**

ПРОБЛЕМЫ ГИДРОГЕОЭКОЛОГИИ

**ТОМ 1
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ
ИЗУЧЕНИЕ
И МОДЕЛИРОВАНИЕ
ГЕОМИГРАЦИОННЫХ
ПРОЦЕССОВ**

Монография в 3-х томах



МОСКВА

ИЗДАТЕЛЬСТВО МОСКОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ГОРНОГО УНИВЕРСИТЕТА

1 9 9 8

В.А. Мироненко, В.Г. Румынин. Проблемы гидрогеоэкологии. Монография в 3-х томах. Том 1. Теоретическое изучение и моделирование геомиграционных процессов. — М.: Издательство Московского государственного горного университета, 1998, — 611 с.

В монографии рассматриваются теоретические основы миграционных процессов, разрабатываются концептуальные (на базе исследования краевых задач) модели массопереноса в типовых гетерогенных водоносных системах с учетом физико-химических преобразований вещества; обосновываются эффективные алгоритмы решения миграционных задач методами математического (численного) моделирования; излагаются методы планирования и расчетные схемы интерпретации полевых индикаторных опробований; развиваются количественные подходы к постановке и обработке данных мониторинга качества подземных вод на участках их техногенного загрязнения; обосновываются модели для прогнозирования миграции высокоплотных солевых растворов, нефтепродуктов, радионуклидов и некоторых других веществ и компонентов, представляющих угрозу для подземной гидросферы на участках загрязнения; оценивается эффективность различных методов реабилитации качества подземных вод; обосновываются водоохранные мероприятия. Особенности практической реализации предлагаемых исследований авторов на различных объектах (горнодобывающие районы, водозаборы подземных вод, участки складирования высокотоксичных, в том числе радиоактивных, отходов, атомные электростанции и др.).

**Издание осуществлено при поддержке Российского Фонда
Фундаментальных Исследований по проекту 98—05—78006**

ISBN 5—7418-0123—4

- © В. А. Мироненко,
В.Г. Румынин, 1998 г.
 - © Издательство Московского
государственного горного
университета, 1998 г.
-

Содержание

ТОМ 1

Предисловие.....	27
Введение	29

ЧАСТЬ 1	Гидродинамические основы теории массопереноса в подземных водах и породах зоны аэрации.....	34

Глава 1. Основные физические механизмы массопереноса в водоносных породах и его математическая формализация	36

1.1. Формы переноса и рассеяния вещества	36
1.1.1. Конвективный перенос	36
1.1.2. Диффузионный перенос	43
1.1.3. Дисперсионный перенос	45
1.1.4. Осмос и наведенные им процессы.....	53
1.1.5. Основные представления о миграции многофазных жидкостей.....	59
1.2. Базовые уравнения и краевые условия для математического описания миграционных процессов.....	64
1.2.1. Общее уравнение массопереноса и его основные дифференциальные представления	64
1.2.2. Уравнения миграционного потока переменной плотности	68
1.2.3. Краевые условия	71

Глава 2. Анализ физико-математических моделей миграции в гомогенных водоносных породах	78
2.1. Расчетная схема поршневого вытеснения	79
2.2. Квазиодномерная расчетная схема продольной микродисперсии	82
2.3. Пространственные модели миграции в гомогенных водоносных породах	92
2.3.1. Поперечная микродисперсия в одномерном фильтрационном потоке	92
2.3.2. Особенности пространственного рассеяния в условиях неоднородного фильтрационного поля	103
 Глава 3. Анализ физико-математических моделей миграции (макродисперсии) в гетерогенных водоносных комплексах	117
3.1. Модели миграции в упорядоченного стратифицированных пластах	121
3.1.1. Двухслойные системы	122
3.1.2. Многослойные водоносные пласты	131
3.1.3. О значимости вертикальной конвекции в водоносных и разделяющих пластах	137
3.2. Комплексы трещиновато-пористых пород	141
3.2.1. Принципиальные модели массопереноса ...	143
3.2.2. О параметрической тождественности расчетных моделей миграции	151

3.2.3. Об аналогии между процессами массо- и теплопереноса	153
3.2.4. Некоторые обобщенные решения и их анализ.....	154
3.3. Анализ миграции в неупорядоченно-неоднородных системах на базе стохастических моделей макродисперсии	157
3.3.1. Общие представления о стохастических моделях	157
3.3.2. Анализ принципиальных результатов изучения трехмерной макродисперсии в неоднородных средах.....	162
3.3.3. Стохастический анализ некоторых частных задач миграции в макронеоднородных средах	169
3.3.3.1. Макродисперсия при площадной инфильтрации.....	169
3.3.3.2. Макродисперсия при плотностной конвекции.....	172
3.4. Макродисперсия в стохастически неоднородных средах с двойной пористостью	176
3.5. Основные выводы теоретического анализа	179
 Глава 4. Основные представления о переносе влаги и загрязнений через зону аэрации.....	192
 4.1. Теоретические основы влагопереноса в горных породах при неполном водонасыщении	193
4.1.1. Общая энергетическая характеристика процесса влагопереноса.....	193
4.1.2. Закон движения влаги.....	197

4.1.3. Влияние гетерогенности ненасыщенных сред на влагоперенос	203
4.1.4. Математические основы вертикального влагопереноса	210
4.2. Основные представления о массопереносе в ненасыщенных грунтах.....	215
4.2.1. Перенос в гомогенных грунтах	215
4.2.2. Особенности массопереноса в ненасыщенных гетерогенных средах.....	219
 ЧАСТЬ 2 Гидрогеохимические основы миграции подземных вод	 226
 Глава 5. Гидрогеохимическое описание условий и процессов, контролирующих качественный состав подземных вод	 226
 5.1. Естественный гидрогеохимический фон и его роль в проявлениях буферных свойств водоносной системы.....	227
5.1.1. Общие сведения о качественном составе подземных вод	227
5.1.2. Определяющие минеральные равновесия ..	231
5.2. Основные процессы физико-химического преобразования вещества в подземных растворах (без учета фильтрации)	236
5.2.1. Межфазовые сорбционные и ионообменные взаимодействия.....	237
5.2.1.1. Равновесная сорбция (адсорбция)	237

5.2.1.2. Модель поверхностного комплексообразования.....	246
5.2.1.3. Равновесный ионный обмен	248
5.2.1.4. Модель кинетики сорбционных и ионообменных взаимодействий	255
5.2.2. Термодинамика и кинетика процессов растворения-осаждения	257
5.2.3. Гомогенные (внутрифазовые) взаимодействия.....	262
5.2.3.1. Комплексообразование	262
5.2.3.2. Исходные представления о коллоидных формах переноса загрязнителей.....	264
5.2.3.3. Деструкция химических соединений	267
 Глава 6. Миграционные модели физико-химических трансформаций	281
 6.1. Миграция активных компонентов в гомогенных породах.....	281
6.1.1. Сорбционные и ионообменные взаимодействия.....	281
6.1.1.1. Равновесная сорбция	281
6.1.1.2. Особенности проявления кинетики сорбционных процессов	286
6.1.1.3. Ионообменные взаимодействия в потоке подземных вод	288
6.1.2. Закономерности миграции компонентов, участвующих в процессах растворения-осаждения	292
6.1.2.1. Простейшие расчетные схемы.....	293

6.1.2.2. Процессы равновесного растворения-осаждения вещества применительно к растворам сложного состава на подвижных гидрогеохимических барьерах	299
6.1.3. Влияние внутрифазных реакций на интенсивность массопереноса и характер концентрационных фронтов.....	309
6.1.3.1. Расчетные схемы, учитывающие роль комплексообразования в сорбционных и ионообменных процессах	309
6.1.3.2. Модель миграции радиоактивных растворов, содержащих коллоидные частицы	315
6.1.3.3. Деструкция мигрантов.....	318
6.2. Модели миграции неконсервативных компонентов в гетерогенных водоносных системах.....	325
6.2.1. Сорбция в стратифицированных пластах ...	326
6.2.2. Сорбция в стохастически неоднородных системах	330
6.2.3. Миграция в трещиновато-пористых породах.	333
6.2.3.1. Особенности межфазовых взаимодействий.....	333
6.2.3.2. Коллоидный транспорт вещества в трещиновато-пористых породах	335
6.2.3.3. Описание деструкции вещества в трещиновато-пористых породах	340
6.2.3.4. Обобщенный аналитический подход к исследованию миграции в гетерогенный системах.....	344

ЧАСТЬ 3	Численное моделирование процессов загрязнения подземных вод 352
Глава 7. Анализ принципов и методов численного моделирования процессов загрязнения подземных вод 353	
7.1. Общие представления о численных методах решения задач массопереноса и принципах постро- ения численных схем 354	
7.1.1. Краткая характеристика методов конечных разностей и конечных элементов 354	
7.1.2. Построение поля напоров.....356	
7.1.3. Свойства конечно-разностных аппрокси- маций одномерных уравнений переноса.....357	
7.1.4. Поперечная численная дисперсия 365	
7.1.5. Аппроксимация временной производной...367	
7.1.6. Особенности задания граничных условий..369	
7.1.7. Принципы решения матричных уравнений .370	
7.1.8. Основы метода характеристик и метода случайных блужданий 373	
7.1.9. Обобщающие выводы 375	
7.2. Принципы построения численных алгоритмов для решения задач миграции подземных вод 380	
7.2.1. Расщепление дифференциальных опера- торов в уравнениях переноса 380	
7.2.2. Схема аппроксимации составляющих пе- реноса.....382	
7.3. Специфика численных моделей и схем при ана- лизе различных механизмов миграции 392	

7.3.1. Алгоритмы численного моделирования миграции с учетом физико-химических взаимодействий	292
7.3.1.1. Общие принципы моделирования миграции многокомпонентных растворов	393
7.3.1.2. Особенности моделирования кинетических процессов (на примере сорбции)	401
7.3.2. Особенности численного моделирования миграции подземных вод переменной плотности и некоторые частные результаты	405
7.3.3. Особенности моделирования миграции в трещиновато-пористых средах	412
 Глава 8. Исследование процессов миграции на численных моделях	422
 8.1. Исследование на математических моделях массопереноса в гетерогенных водоносных пластах.....	422
8.1.1. Анализ закономерностей макродисперсии ..	423
8.1.2. Анализ чувствительности на стохастических моделях гетерогенных сред с неупорядоченной структурой	429
8.2. Исследование на математических моделях простейших физико-химических взаимодействий при миграции подземных вод	436
8.2.1. Ионообменные процессы	437
8.2.1.1. Ионный обмен при миграции в комплексах гомогенных пород.....	437
8.2.1.2. Ионный обмен при миграции в комплексах гетерогенных пород	442

8.2.2. Исследование процессов комплексообразования.....	448
8.3. Исследование на математических моделях некоторых особенностей радионуклидного транспорта в подземных водах	449
8.3.1. О точности сеточных решений высокоградиентных задач массопереноса.....	449
8.3.2. Исследование миграции радионуклидов в составе многокомпонентных растворов.....	451
8.4. Исследование миграции несмешивающихся жидкостей в ненасыщенной зоне	459
8.5. Некоторые замечания о состоянии исследований по численному моделированию миграции	461

ЧАСТЬ 4	Принципы и методы прогноза процессов загрязнения подземных вод	467

Глава 9. Схематизация миграционных процессов .469

9.1. Исходные предпосылки схематизации	469
9.2. Схематизация геофильтрационных условий массопереноса	471
9.2.1. Схематизация пространственной изменчивости и анизотропии фильтрационных свойств водоносных пластов	471
9.2.2. Схематизация пространственной структуры фильтрационного потока	473

9.2.3. Схематизация условий питания (разгрузки) водоносных пластов по площади их распространения	477
9.2.4. Заключительные выводы	479
9.3. Схематизация процессов массопереноса (собственно миграционная схематизация)	480
9.3.1. Схематизация влияния массопереноса на расчетную схему фильтрации	481
9.3.2. Схематизация гидродинамических процессов миграции (на примере физически и химически нейтральных компонентов)	484
9.3.2.1. Выявление значимости отдельных механизмов конвективно-дисперсионного переноса и схематизация структуры миграционного потока (в гомогенных породах)	484
9.3.2.2. Схематизация граничных условий миграции	489
9.3.2.3. Особенности схематизации миграционного процесса в гетерогенных водоносных комплексах	493
9.3.3. Особенности схематизации миграционного потока в условиях плотностной конвекции	495
9.3.4. Схематизация физико-химических условий и процессов миграции неконсервативных компонентов	498
9.4. О значении схематизации для расширения границ применимости аналитических методов	503
 Глава 10. О возможностях прогноза процессов загрязнения в водоносных пластах аналитическими методами	 508

10.1. Прогноз концентрационных полей на участках размещения поверхностных бассейнов промстоков и других локальных (сосредоточенных) источников загрязнения	510
10.1.1. Плановые миграционные модели	510
10.1.2. Профильные миграционные модели.....	515
10.1.2.1. Локальный источник загрязнения в двухслойном пласте.....	516
10.1.2.2. О роли поперечной (профильной) гидродисперсии	522
10.1.2.3. Об учете плотностной конвекции....	527
10.2. Прогноз качества подземных вод при их площадном загрязнении инфильтрацией или нисходящим перетеканием	528
10.2.1. Постановка задач прогноза.....	528
10.2.2. Плановые миграционные модели	531
10.2.2.1. Основные балансовые уравнения для пласта с инфильтрацией и их решения....	531
10.2.2.2. Проявление гетерогенных свойств комплексов трещиновато-пористых пород....	536
10.2.2.3. Роль диффузионных процессов при миграции загрязненных вод через покровные и разделяющие слои.....	538
10.2.3. Профильные двумерные модели.....	538
10.3. Прогноз загрязнения, вызванного подземными источниками некондиционных вод	542
10.3.1. Субвертикальное подтягивание глубоких некондиционных вод к водозаборным скважинам	543

10.3.1.1. Вариант отсутствия относительного водоупора между пресными и солеными водами	543
10.3.1.2. Вариант наличия разделяющего водоупора между пресными и солеными водами	549
10.3.2. Субгоризонтальная миграция от подземного источника некондиционных вод.....	552
10.4. О прогностических возможностях стохастических моделей миграции	555
10.5. Краткая характеристика базовых компьютерных программ	561
10.5.1. Численная модель трехмерной фильтрации подземных вод — программа MODFLOW	561
10.5.2. Численная модель трехмерного массопереноса и дисперсии в подземных водах — программа MT3D	563
10.5.3. Численная модель двумерного массопереноса и дисперсии в подземных водах — программа МОС	564
10.5.4. SUTRA — численная модель фильтрации и массо-теплопереноса в водоносных пластах (с учетом переменной плотности подземных вод и наличия ненасыщенной зоны)	566
10.5.5. Программа HT3D	569
10.5.6. Программа FLOWPATH	571
10.5.7. Программа FLOWNET	572
 Глава 11. Прогнозные оценки роли зоны аэрации в развитии процессов загрязнения подземных вод	 576

11.1. Общая характеристика основных прогнозных ситуаций и методических подходов к их анализу	576
11.1.1. Постановка задач для исследования и их типизация	577
11.1.2. Оценка по предлагаемым участкам разме- щения поверхностных бассейнов промстоков.....	581
11.1.3. Оценки защитных свойств зоны аэрации .	584
11.2. Особенности прогноза миграции загрязнений, вносимых в водоносные пласты с площадной ин- фильтрацией	593
11.3. О прогнозных оценках развития процессов загрязнения в породах зоны аэрации	595
11.4. Численная модель влаго- и массопереноса в зоне аэрации — VS2DT	606

ТОМ 2

Введение	28

ЧАСТЬ 5	Опытно-миграционные опробования в водоносных пластах	33

Глава 12. Анализ эффективности лабораторных экспериментов как альтернативы опытным опробованиям	34

12.1. Общие положения и предпосылки к дифференциации экспериментальных схем	34

12.2. Определение параметров сорбции и ионного обмена	37

12.3. Изучение диффузионных параметров	43

Глава 13. Анализ целесообразных схем и условий постановки опытно-миграционных опробований .	49

13.1. Общие представления об индикаторных экспериментах	49

13.1.1. Задачи и направленность индикаторных опробований (ИО)	49

13.1.2. Сравнительная характеристика основных экспериментальных схем	52

13.2. Взаимоотношение опытно-миграционных опробований с другими видами работ при гидрогеологической разведке	57

13.3. О масштабных эффектах и целесообразных условиях проведения ОМО.....	61

Глава 14. Обоснование расчетных моделей для опытно-миграционных опробований 69

14.1. Исходные предпосылки схематизации и основные аналитические решения	69
14.1.1. Исходные предпосылки к построению расчетных моделей	69
14.1.2. Общая математическая постановка задачи миграции в плоскорадиальном потоке	73
14.1.3. Особенности математического описания миграции индикатора при дуплетном опробовании квазигомогенных пород.....	75
14.1.4. О возможном несоответствии структуры миграционного потока модельным представлениям	81
14.2. Частные решения для квазигомогенных сред....	87
14.2.1. Приближенные решения для плоскорадиальной миграции и их сравнительная характеристика.....	87
14.2.2. Представление решений для дуплетного опробования.....	90
14.2.3. Решение для индикаторных опытов при откачке.....	91
14.2.4. Односкажинный эксперимент.....	93
14.3. Частные решения для макрогетерогенных пород	95

14.3.1. О расчетных схемах для опытов в комплексах стратифицированных пород.....	95
14.3.2. Решение радиальных задач переноса в пласте гетерогенных трещиновато-пористых пород	99
14.3.3. Тепловое воздействие на трещиноватый пласт.....	105
14.3.4. Представление решений для дуплетного опробования.....	109
14.3.5. О расчетных оценках при индикаторных опытах с откачкой.....	112
14.3.6. Решения для односкважинной схемы опробования.....	113
14.4. Анализ гидрохимической инерционности наблюдательных скважин	116
14.5. Гидрохимическая инерционность запускных скважин, используемых в опытах при откачках	121
14.6. Исследование некоторых задач индикаторного опробования на математических моделях	123
14.6.1. Оценка эффективности дуплетного индикаторного опробования водоносных пластов	123
14.6.2. О надежности интерпретации односкважинных трассерных экспериментов	135
 Глава 15. Планирование и проведение опытно-миграционных опробований.....	 144
 15.1. Рекомендации к планированию общей схемы миграционного эксперимента и опытного куста	 145

15.1.1. Предпосылки к выбору опытных участков и схем опробования	145
15.1.2. Предварительное обоснование пространственно-временного масштаба опробования.....	147
15.1.3. Обоснование интервалов опробования и конструкций скважин	150
15.1.4. Стохастическая интерпретация практических рекомендаций.....	154
15.1.5. Об информации, привлекаемой к планированию ОМО.....	157
15.2. Предпосылки и выбору индикатора.....	159
15.3. Расчетное обоснование опытной схемы с выбором контролирующих показателей и дополнительных трассеров	165
15.4. Проведение индикаторных опробований	174
15.4.1. Предварительное опробование скважин опытно-миграционных кустов.....	174
15.4.2. Запуск трассера и наблюдения за его миграцией	178
 Глава 16. Интерпретация индикаторных опробований.....	 181
16.1. Диагностика опытных результатов и выбор расчетной модели.....	181
16.1.1. Комплексы пористых пород.....	181
16.1.2. Комплексы трещиноватых пород	183
16.2. Методика количественной интерпретации и анализа опытных результатов	189
16.2.1. Опыты в квазигомогенных средах	189

16.2.2. Опыты в гетерогенных средах.....	194
16.2.3. Анализ чувствительности индикаторных кривых.....	200
16.2.4. О привлечении математических моделей к планированию и интерпретации ОМО	204
16.3. Примеры интерпретации индикаторных опробований.....	205

ЧАСТЬ 6	Опытно-миграционные наблюдения (ОМН) в водоносных пластах	218

Глава 17. Задачи и условия проведения ОМН.....	218
17.1. Роль и задачи ОМН.....	218
17.2. Типизация условий проведения ОМН	221

Глава 18. Принципы и методы теоретического анализа в связи с интерпретацией опытно-миграционных наблюдений	229

18.1. Миграция трассеров от поверхностных источников загрязнения	230
18.1.1. Профильные модели для гетерогенных систем.....	230
18.1.2. Плано-двумерные квазигомогенные модели преноса (для ореолов рассеяния)	235
18.1.3. Значение и учет структуры фильтрационного поля.....	237

18.1.4. Значение погрешностей наблюдений	239
18.2. Миграция реальных стоков от поверхностных источников загрязнения	242
18.2.1. Общий подход к построению расчетных моделей	242
18.2.2. Простейшие схемы интерпретации данных наблюдений за миграцией стоков	245
18.2.3. Особенности анализа условий миграции разноплотностных жидкостей	249
 Глава 19. Постановка и методика проведения опытно-миграционных наблюдений.....	254
19.1. Общие положения	254
19.2. Принципы размещения пунктов гидрохимического контроля в водоносных пластах	257
19.2.1. Загрязнение от поверхностных источников	258
19.2.2. Загрязнение от подземных бассейнов некондиционных вод	264
19.3. О дополнительных требованиях к оборудованию наблюдательных скважин	267
19.4. Гидрохимическое опробование при наблюдениях и его достоверность	278
19.4.1. Показатели, контролирующие качество подземных вод	278
19.4.2. О требованиях к качеству гидрохимического опробования.....	280

19.5. Изучение миграции минерализованных стоков методами поверхностной геофизики	284

ЧАСТЬ 7	Опытное изучение условий фильтрации индикаторными методами в связи с оценкой процессов загрязнения подземных вод.....	291

Глава 20. Использование индикаторных методов при опытно-фильтрационных опробованиях	291

20.1. Использование индикаторов для детализации фильтрационного процесса при опытных откачках (нагнетаниях)	293

20.1.1. Предварительное опробование индикаторными методами скважин опытно-фильтрационных кустов.....	293

20.1.2. Изучение профиля проницаемости водоносного пласта	296

20.1.3. Изучение раскрытия индивидуальных трещин.....	301

20.1.4. Об эффективности фильтрационного опробования пластов по дуплетной схеме	302

20.1.5. Оценка плановой фильтрационной анизотропии	306

20.1.6. Об использовании естественных трассеров	308

20.2. Использование трассеров при изучении опытными опробованиями вертикальной проницаемости и профильной фильтрационной анизотропии	309

Глава 21. Опытное изучение условий и параметров фильтрации индикаторными методами при проведении режимных наблюдений	318
21.1. Использование глобальных техногенных индикаторов для калибровки гидрогеологических моделей	319
21.1.1. Общие сведения о глобальных индикаторах.....	319
21.1.2. О расчетных моделях	324
21.1.3. Пример интерпретации данных тритиевого опробования подземных вод.....	331
21.1.4. Теоретические основы тритий-гелий (-3) метода датирования возраста подземных вод	333
21.2. Применение индикаторных гидрогеофизических методов для изучения фильтрационных потоков вблизи поверхностных водоемов и водотоков	335
21.2.1. Определение скорости фильтрации резистивиметрией наблюдаемых скважин	335
21.2.2. Гидрогеотермические наблюдения	337
21.3. Оценка условий и параметров фильтрации по данным гидрохимических наблюдений за подтягиванием минерализованных вод из подземных бассейнов	343

ЧАСТЬ 8	Опытное изучение условий переноса загрязнений через зону аэрации	348
Глава 22. Опытное опробование пород зоны аэрации.....		349
22.1. Опытная оценка вертикальной проницаемости покровных отложений и искусственных глинистых экранов		350
22.1.1. Об эффективности опытных наливов в шурфы		351
22.1.2. Лабораторная оценка проницаемости грунтов, экранирующих бассейны промстоков ...		353
22.2. Изучение водопроводящих свойств зоны аэрации опытными опробованиями в скважинах		351
22.2.1. Опробование вблизи поверхности грунтовых вод		358
22.2.2. Опробование зон разреза, удаленных от поверхности грунтовых вод		359
22.3. О целесообразных границах применения опытных опробований для оценки параметров массопереноса пород зоны аэрации		372
Глава 23. Опытные наблюдения для изучения условий переноса загрязнений через зону аэрации		379
23.1. Задачи, состав и проведение наблюдений		379
23.2. Интерпретация результатов наблюдений		386
23.2.1. Общие интерпретационные подходы		386
23.2.2. Простейшие схемы интерпретации на примере лизиметрических наблюдений		389
23.2.3. Интерпретация результатов наблюдений за глобальными трассерами		390

Предисловие

К концу 20-го века экологические направления геологии прочно заняли одно из ведущих мест в многочисленных теоретических и прикладных исследованиях, проводимых в рамках наук о Земле. В особой мере это относится к экологической гидрогеологии, призванной выявлять, рационально использовать и охранять наиболее ценный сырьевой ресурс и компонент геологической среды — подземные воды. Изучаемые ею фундаментальные и прикладные научные проблемы приобрели в последнее время исключительную социальную и экономическую значимость. Достаточно упомянуть здесь защиту качества питьевых водных ресурсов; выявление, оценку и прогноз процессов загрязнения подземных вод как одного из техногенно уязвимых компонентов среды; реабилитацию загрязненных подземных вод, в том числе в районах крупных экологических катастроф; гидрогеоэкологическое обоснование условий безопасной эксплуатации различных инженерных объектов, включая АС, горнодобывающие предприятия, городские свалки, участки наземного и подземного хранения опасных отходов и т.п.

Несмотря на несомненную актуальность, эта важнейшая область геологической науки явно испытывает дефицит фундаментальных монографических исследований, что особенно бросается в глаза при анализе западных публикаций. Отечественной гидрогеологии, в этом смысле, повезло несколько больше, однако и на таком, сравнительно благополучном, фоне предлагаемая читателю работа кажется нам весьма заметным явлением. Насколько мы можем судить, подобный комплекс теоретических, экспериментальных и прикладных проблем экологической гидрогеологии анализируется в едином исследовании впервые в мировой практике. При этом, авторы удачно сочетают богатый личный опыт прикладных научных

проработок для самого широкого спектра практических проблем (полевой гидрогеологии, в частности) с фундаментальным теоретическим анализом — при особом упоре на математическое моделирование. В работе отчетливо прослеживается мультидисциплинарный подход, что нашло свое отражение как в многообразии применяемых методов исследований, так и в привлечении к анализу длинного списка отечественных и зарубежных публикаций разного плана. Авторы часто «выстраивают новое знание из старых фактов». В итоге, внимательный читатель найдет здесь много стимулов для острых дискуссий и дальнейших исследований.

Главная польза монографии, на мой взгляд, вытекает из разрабатываемых в ней принципов и методов решения столь актуальных, столь и трудных проблем экологической гидрогеологии. Теоретический анализ и прогноз, методика полевых экспериментов и наблюдений, а также практические рекомендации по весьма сложным и ответственным объектам, несомненно, находятся на уровне лучших мировых стандартов. Это исследование, безусловно, поможет заинтересованному читателю. Оно демонстрирует также, что и в наше, трудное для российской науки, время она способна успешно решать сложные задачи.

Н.П.Лаверов, академик

Введение

Развитие гидрогеологии как науки ориентировано на современном этапе, прежде всего, на решение проблем охраны от загрязнения подземных вод — одного из важнейших компонентов окружающей среды. Особая экологическая значимость гидрогеологии сделала ее весьма престижной, если угодно — модной специальностью на Западе с соответствующими экономическими последствиями: например, гидрогеологи в США — один из наиболее оплачиваемых инженерных контингентов. И именно это — гидрогеоэкологическое — направление во многом определяет сейчас лицо гидрогеологии, — как ее теоретический и экспериментальный базис, так и многочисленные практические приложения. Среди последних достаточно назвать: оценку и защиту ресурсов пресных питьевых вод, охрану подземной гидросферы в целом от техногенного загрязнения, подземное и наземное хранение опасных отходов, когда подземные воды могут оказаться в роли «главного транспортера» ядовитых или радиоактивных загрязнителей. Будучи неотъемлемой частью обеспечения экологической безопасности населения, решение этих проблем требует громадных финансовых затрат, например, одна только Арсенальная свалка (отходы военного производства) в США потребует для своей очистки около 10 млрд долларов.

Вместе с тем, упомянутые практические приложения определили во многом и направленность фундаментальных исследований в гидрогеологии, и сложность их проблематики — в силу того, что именно здесь мы имеем дело с сопряженными (часто — сильно нелинейными) процессами, когда одновременно приходится рассматривать взаимосвязанные гидрогеомеханические и гидрогеохимические, а очень часто и термомеханические

проблемы в рамках единой исследуемой задачи. Однако соответствующие исследования находят пока отражение лишь в многочисленных статьях и практически не обобщены в сколь-нибудь значимых монографиях.

В этой связи настоящая работа (к изданию подготовлено три тома монографического характера) может рассматриваться как попытка авторов подвести итог первого, наиболее продуктивного с точки зрения формирования концептуальных идей, и, в то же время, достаточно противоречивого периода становления этого направления гидрогеологии.

В данном, первом, томе рассматриваются проблемы теоретического описания и прогноза процессов загрязнения подземной гидросферы. В основе соответствующих разработок лежит теория миграции — массопереноса вещества в подземных водах и породах зоны аэрации. Ее становление связывается с именами В.М.Шестакова, Н.Н.Веригина, Ф.М.Бочевера, Я.Бэра (J.Bear), Г.Дагана (G.Dagan), Л.Гелхара (L.Gelhar), Ш.Ньюмена (Sh.Neuman), Ч.-Ф.Цанга (C.-F.Tsang). В соответствии с простейшими представлениями о горной породе как об однородной пористой среде, теория миграции оперировала сначала весьма идеализированными моделями, которые, тем не менее, позволили дать исходное физико-математическое описание ряда важнейших механизмов миграции — конвективного переноса и диффузионно-дисперсионного рассеяния вещества — «на микроуровне», т.е. в пределах репрезентативного элементарного объема однородной гомогенной среды; так была создана классическая теория дисперсии (точнее, микродисперсии).

Дальнейшие этапы развития гидродинамической теории миграции связываются с выявлением и описанием роли макронеоднородности и гетерогенности горных пород, что позволило перейти к существенно более реальным и практически важным процессам

макродисперсии. Именно гетерогенность обуславливает «взрывной», прямо не экстраполируемый и внешне нелогичный характер загрязнения подземной гидросферы: медленное развитие процесса, обусловленное «буферными» возможностями горных пород, после исчерпания этих возможностей может смениться катастрофически резким нарастанием загрязнения. Отсюда видно, какое важное значение имеет правильное понимание наблюдаемых процессов на уровне теоретически обоснованных (а не только эмпирических) представлений.

Параллельно с гидродинамической теорией миграции осуществлялись многочисленные исследования и выстраивалась теория физико-химических взаимодействий в системе «горные породы — подземные воды/техногенные растворы». Достаточно известны работы в этом направлении С.Р.Крайнова, В.М.Швеца, Ф.И.Тютюновой, В.С.Голубева. Наиболее разработанными здесь являются представления о минеральных, сорбционных и ионообменных равновесных взаимодействиях. В стадии становления находятся исследования, посвященные неравновесным процессам, протекающим при участии микроорганизмов; последние, в частности, играют определяющую роль в самоочищении подземных вод на участках их углеводородного загрязнения.

До поры, до времени эти работы были довольно слабо увязаны с первым — гидродинамическим — направлением, и лишь в последнее время наметился кардинальный сдвиг к их тесному объединению, чему немало способствовало численное моделирование; приоритет здесь принадлежит преимущественно зарубежным специалистам, о чем можно судить по работам Г.Т.Иеха (G.T.Yeh), К.Л.Карнахана (C.L.Carnahan), М.Д.Сигала (M.D.Siegel), И.Рубина (Y.Rubin). По сути дела, во многих отношениях моделирование сыграло роль мощного инструмента исследования сложных миграционных процессов, которые оказа-

лись за пределами возможностей аналитических методов, а подчас, более того, — и натуральных экспериментов.

Благодаря эффективному сочетанию численного моделирования с аналитическими методами, гидрогеология сейчас располагает вполне дееспособной теоретической базой для прогнозов процессов загрязнения подземных вод. Вместе с тем, развитие компьютерного моделирования привело к определенным перекосам во взглядах на его роль: широко распространилась наивная вера в то, что моделирование может вообще устранить пресловутый информационный барьер, «сделать знание из полного незнания». Эта вера нашла свое отражение в многочисленных формализованных работах, где реальное существо изучаемых процессов полностью растворяется в гуще математической символики.

Авторы попытались изложить теоретические основы экологической гидрогеологии, соблюдая деликатный баланс между фундаментальными, физико-механическими (а также, в какой-то мере, гидрогеохимическими) представлениями, с одной стороны, и их математическими эквивалентами, с другой: при этом приходится учитывать, что в современной гидрогеологии затейливый математический орнамент часто является прикрытием для неглубоких или вообще неверных физико-химических интерпретаций; последнее во многом справедливо, в частности, для широкого круга сегодняшних исследований в сфере стохастического моделирования миграционных процессов. И не совсем уж без оснований высказываются опасения, что моделирование может погубить нашу гидрогеологическую профессию, — если не будет соблюден разумный баланс между теоретическими разработками и их информационной базой.

В этой связи очень важно, что развитие фундаментальных представлений о миграции, особенно в нашей стране, во многом опиралось не только на теоретические (в частности, аналитические) методы, но и на их тесное

сочетание с полевыми экспериментальными исследованиями — опробованиями и наблюдениями на опытно-промышленных полигонах. Решая конкретные производственные задачи, эти исследования одновременно приносили уникальный материал для теоретических обобщений, а также во многом способствовали разработке научно-методической базы полевой гидрогеоэкологии, о которой речь пойдет в следующем (втором) томе монографии.

Исходными для настоящей работы послужили длительные исследования фундаментального и прикладного характера, проводившиеся под руководством и при участии авторов в С.-Петербургском горном институте, — сначала кафедрой гидрогеологии, а затем Комплексной Лабораторией гидрогеологии и природосберегающих горных технологий (РАН и Роскомобразования). В этих исследованиях были заняты многие научные сотрудники и инженеры СПГГИ; большую помощь в постановке и реализации исследований оказали также работники многих производственных предприятий, таких как Лебединский, Коршуновский, Ковдорский ГОКи, ПО «Уралкалий», «Апатит», «Маяк», АО «Алмазы Якутии-Саха», «Североалмаз», «Татнефть». Геологическое управление АО «Татнефть» является спонсором настоящего издания.

Не имея возможности перечислить здесь всех представителей упомянутых и других организаций, авторы приносят им свою глубокую признательность.

В составлении отдельных разделов первого тома монографии принимали участие П.К.Коносавский (разд. 10.3), Н.С.Петров (гл. 4), Г.Н.Гензель и Н.Ф.Карачевцев (гл. 8), Ф.Г.Атрощенко (разд. 2.3.3).

Авторы с вниманием и благодарностью примут советы и критические замечания по существу работы.

Гидродинамические основы теории массопереноса в подземных водах и породах зоны аэрации

Физико-математическое описание рассматриваемых здесь процессов базируется на теории миграции вещества, влаги и тепла в горных породах, находящихся в состоянии полного (водоносные комплексы) или частичного (зона аэрации) водонасыщения.

В свое время, при описании массо- и теплопереноса в однородных гомогенных средах широкое распространение получили простейшие модели гидродинамической дисперсии (фильтрационной микродисперсии); упомянем здесь, среди многих, фундаментальные работы Н.Н.Веригина, Ф.М.Бочевера, В.Н.Николаевского, Б.С.Шержукова, Я.Бэра, П.Сафмана, Ж.Фрида, А.Шейдгера. Позднее произошло сближение формализованных математических моделей с физической сущностью процессов в реальных водоносных системах, характеризующихся детерминированной неоднородностью и гетерогенностью; здесь безусловная заслуга принадлежит российским специалистам, в первую очередь, В.М.Шестакову, Ф.М.Бочевру и А.Е.Орадовской, А.А.Рошало. Применительно к стохастически неоднородным средам принципы теоретического описания получили развитие в публикациях М.И.Швидлера, Г.Дагана, Л.Гелхара, Ш.Ньюмена, Ж.Матерона, Ч.Ф.Цанга и др.

В конечном итоге, к настоящему времени сложились основные представления о физических механизмах массопереноса в подземных водах. Согласно им, миграция компонентов осуществляется в рамках их конвективного (с учетом механизма гравитационной дифференциации)

переноса и диффузионно-дисперсионного рассеяния, на которые накладываются физико-химические процессы превращений вещества в подземных растворах и его взаимодействия с горными породами (часть 2). В многофазных системах — в зоне аэрации или при миграции несмешивающихся жидкостей в зоне насыщения — упомянутые физические механизмы существенно определяются также взаимодействием фаз.

Во многом неясными остаются пока механизмы миграции в слабопроницаемых глинистых породах, где круг их значительно шире; ряд авторов придают здесь существенное значение не только конвекции и диффузии, но и осмосу.

1.1. Формы переноса и рассеяния вещества

1.1.1. Конвективный перенос

Конвекция — механический перенос под действием гидравлического градиента — является основной формой переноса компонентов в водоносных пластах зоны интенсивного водообмена. В физически однородных жидкостях такой перенос идет неотделимо от фильтрационного потока со средней его действительной скоростью, определяемой полем скоростей фильтрации ($\bar{v}$) и т. наз. активной пористостью (трещиноватостью) пород — n .

Обычно считается, что эти показатели достаточны для расчета переноса при конвекции в статистически усредненной в пределах минимального репрезентативного объема пористой (трещиноватой) среды [10]: ими определяется поле действительных скоростей фильтрации

$$\bar{u} = \frac{\bar{v}}{n}. \quad (1.1)$$

В таком представлении конвективный перенос в однородных пластах должен характеризоваться резкой границей раздела между вытесняющей и вытесняемой жидкостями (рис. 1.1, а): перемешивания нет, и можно говорить о *поршневом* вытеснении одной жидкости другой.

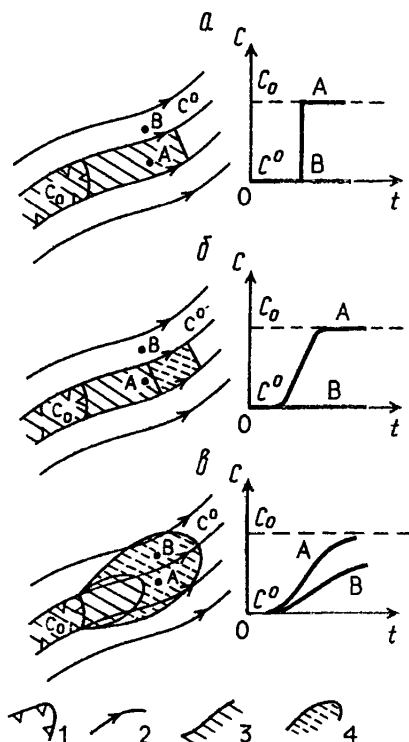


Рис. 1.1. Характерные схемы плановой миграции в неограниченном пласте от фиксированного концентрационного источника и типовые кривые соответствующих временных графиков $c=f(t)$ в расчетных точках A и B;

a - при поршневом вытеснении, б - при одномерной продольной микродисперсии, в - при двумерной микродисперсии (1 - границы концентрационного источника, 2 - линии тока, 3 - поле с постоянной концентрацией $c=c_0$, 4 - зона дисперсии $c^0 \leq c \leq c_0$, c^0 и c_0 - начальная концентрация и концентрация в источнике)

Характерные значения активной пористости для разделяно-зернистых (песчаных) пород обычно укладываются в относительно узкий ($n \approx 0,3+0,4$) диапазон; в коллекторах с трещинной емкостью разброс значений параметра n намного шире, а абсолютные его вели-

чины — гораздо ниже ($0,0005 \pm 0,01$). Отсюда понятно, что массоперенос в трещиноватых породах, при прочих равных условиях, должен протекать намного интенсивнее, чем в пористых.

Следует заметить, что показатель n для реальных пористых сред является довольно условным параметром, так как наряду с проточными (активными) породами всегда существуют застойные, пассивные в фильтрационном отношении зоны, которые, не принимая непосредственного участия в гидравлическом переносе вещества (в направлении средней скорости фильтрации), тем не менее играют заметную роль в формировании общего массового потока: «донасыщаясь» веществом в результате процессов молекулярной диффузии, эти тупиковые зоны увеличивают общую емкость системы (по сравнению с величиной собственно активной пористости), замедляя тем самым скорость конвекции и (1.1). Такого рода обменные процессы требуют времени, поэтому степень вовлечения порового пространства в общий процесс массопереноса, а следовательно, и расчетная емкость системы будут зависеть от скорости фильтрации и длины переноса.

Аналогичное замечание можно сделать и о трещиноватых средах, содержащих системы трещин разных порядков. Более того, на первых этапах миграции в трещиноватых анизотропных средах, расчетное значение активной трещиноватости может сильно зависеть от направления вектора-градиента фильтрационного потока.

Итак, стремление сохранить активную емкость системы как физически определенный параметр следует признать целесообразным лишь для достаточно длительных процессов, когда ее можно оценивать по величине суммарной емкости — общей (связной) пористости-трещиноватости (n^0). Масштабы процесса, допускающие такое приближение, зависят от степени взаимосвязи от-

дельных элементов порового или трещинного пространства, что особенно важно иметь в виду для трещиноватых пород.

Дело в том, что в последнее время различными авторами публикуются все новые доводы в пользу «каналового» механизма фильтрации в таких породах, когда основная масса фильтрующейся жидкости сосредоточена в существенно разобщенных каналах; при достаточно большом естественном напряжении (>10 МПа), площадь их занимает обычно не более 15–20 % от общей поверхности трещин.

Свое теоретическое описание такой режим потока находит, в частности, в рамках двумерной модели трещины со случайным законом распределения ее раскрытия [37] и в более общих моделях параллельных каналов различного (взаимно-коррелированного) раскрытия. Ясно, что каналовый механизм фильтрации снижает демпфирующее действие пористой матрицы и роль сорбции на поверхностях трещин, сокращает время продвижения загрязнений (трассеров) и увеличивает их «пиковые» значения, в первую очередь, в относительно мелкомасштабных процессах. В частности, диффузия в матрицу (а вследствие этого, и внутрипоровая сорбция) сокращается на 1–2 порядка, хотя интенсивность диффузии и не падает во времени подобно обычной трещиновато-блочной среде с ограниченной приемной способностью блоков. Впрочем, в реальности, именно диффузия в матрицу (наряду с конвективно-дисперсионным рассеянием вещества в пересекающие каналы трещины) приводит к подавлению этого механизма миграции с ростом масштаба переноса. Однако происходит это, при прочих равных условиях, существенно позднее и на больших удалениях от источника загрязнения, чем это следует из традиционных моделей трещиноватых сред. Важнейшую роль здесь играет частота пересечения каналов между

собой и с трещинами, а также смоченная поверхность последних.

Отсюда возникает необходимость существенных смещений — в большую сторону — привычных оценок элементарного репрезентативного объема, проводимых на основе характерных расстояний между трещинами: для выполнения условия сплошности среды требуется наличие в выделенном объеме достаточно большого числа пересечений водопроводящих каналов с поперечными трещинами, обеспечивающими гидравлическую связь между каналами; такое взаимодействие, как будет видно из дальнейшего анализа, контролирует также особенности гидродисперсионных эффектов в трещиноватых средах. В целом же, нам представляется, что значимость канального механизма переноса в специальной литературе явно преувеличивается, и его важно учитывать лишь в сравнительно мелкомасштабных процессах, в первую очередь — при индикаторном опробовании и при оценке ситуации в непосредственной близости от источника загрязнения.

К этому нужно добавить, что полевые опытные данные на этот счет часто сильно искажены уже самой (некорректной) постановкой эксперимента, явно способствующей завышению роли «канальных» эффектов. В частности, это относится, например, к известным наблюдениям в подземных выработках рудника Стрипа [36]. Здесь изучалось распределение водопритоков из трещиноватых пород в штрек, для чего в кровле последнего были размещены водоулавливающие пленки. Наблюдения показали, что основная часть водопритоков приходилась на весьма ограниченную (менее 10 % от общего числа) долю трещин-«каналов». При этом, однако, остался за кадром тот очевидный факт, что само наличие измерительной системы-штрека приводит в данном случае к резкому усилению неоднородности упомянутого распределения за счет нулевого гидростатического давления на выходе и доступа воздуха к системе трещин.

Наличие отдельных крупных водопроводящих трещин и каналов приводит к дифференциации наблюдаемой скорости переноса частиц (коллоидов, бактерий и т.п.) в зависимости от размера последних: более крупные частицы, проникая лишь в трещины с достаточно большим раскрытием, перемещаются значительно быстрее идеального трассера, т.е. имеют скорости, существенно превышающие действительную (осредненную по всему репрезентативному объему среды) скорость фильтрации (u). Это обстоятельство, кстати, может быть использовано для количественного выявления на экспериментальном уровне значимости канального механизма миграции в тех или иных условиях, — путем запусков индикаторов, содержащих механическую или биологическую взвесь.

Особенности конвекции во многом контролируются фильтрационной анизотропией пласта, что имеет принципиальное значение для сильно деформированных фильтрационных потоков, образующихся, например, при сосредоточенном водоотборе или при развитии в пласте плотностной конвекции (см. далее). Для комплексов пористых пород главное значение имеет профильная анизотропия проницаемости, обусловленная их литологической и фациальной изменчивостью. В комплексах трещиноватых пород анизотропия обычно связана с наличием нескольких систем субвертикальных трещин (плановая анизотропия), а также с существованием трещин напластования (профильная анизотропия). В относительно мелкомасштабных процессах анизотропия проницаемости в таких породах может сопровождаться зависимостью от направления и расчетной емкости системы [3,17], что следует рассматривать как отражение недостаточной репрезентативности выделенного объема; обычно, эффект этот затухает при выполнении известных условий сплошности среды по проницаемости [10].

Частной разновидностью рассмотренного механизма переноса является *плотностная* («гравитационная»)

конвекция. Она обуславливается появлением в неоднородных — по плотности и вязкости флюидов — потоках дополнительной вертикальной компоненты скорости, которая зачастую оказывает заметное влияние на исходную фильтрационную картину и смещает описание процесса в нелинейную область (разд. 1.2.2). Для определенного класса задач — при доминирующей горизонтальной стратификации подземных вод по плотности — характеристикой гравитационной конвекции может служить условная величина плотностного градиента $\Delta\bar{\rho} = (\rho_o - \rho^o)/\rho^o$ (ρ_o и ρ^o — границы диапазона изменения плотности мигрирующих растворов), которым, в частности, контролируется начальная скорость опускания интрузии соленых вод u_z , имеющая порядок $K_z \Delta\bar{\rho} / n$ ($K_z = K_z^o/\mu$ и K_z^o — коэффициент фильтрации и коэффициент проницаемости вкрест напластования пород, μ — вязкость).

Опускание более тяжелых вод на глубину сопровождается эффектами неустойчивости — образованием отдельных «языков» внедряющегося раствора, опережающих основной фронт внедрения (разд. 1.2.2). В целом, субвертикальная плотностная конвекция является одним из важнейших механизмов смешения и рассеяния вещества, причем она может стимулироваться не только разным составом (минерализацией) вод, но и перепадами их температуры (т.наз. естественная конвекция). В частности, при этом могут образовываться замкнутые конвективные ячейки жидкости с меняющейся плотностью.

При плановом поршневом вытеснении пресной воды минерализованным раствором плотностная конвекция способствует деформации фронта вытеснения (разд. 2.3.3), происходит более быстрое продвижение тяжелой жидкости по подошве пласта и фронт принимает наклонное положение (для легких стоков — картина обратная).

Значимость этого эффекта падает с ростом анизотропии профильной проницаемости системы, так что в сильно анизотропных ($K_x \gg K_z$), сравнительно маломощных пластах даже значительные различия в плотности растворов не приводят к заметной деформации фронта поршневого вытеснения.

1.1.2. Диффузионный перенос*

Молекулярная диффузия является процессом «самопроизвольного» переноса вещества под действием градиента его концентрации. При этом общий поток вещества j_D через единичное расчетное сечение направлен в сторону уменьшения концентрации c и определяется феноменологическим законом Фика [12,14 и др.]:

$$j_D = - D_M \frac{\partial c}{\partial l} \equiv - D_M \nabla c, \quad (1.2)$$

где D_M — коэффициент молекулярной диффузии, характеризующий подвижность водорастворенных компонентов при их миграции в пористой среде под действием разности химических потенциалов**, ∇c — градиент концентрации.

Механическая блокировка диффузионного потока твердым скелетом, удлинение пути диффузии вследствие извилистости поровых каналов, торможение диффундирующих молекул неподвижными стенками пор приводят к тому, что расчетные значения коэффициента D_M в водонасыщенных пористых породах примерно на порядок

* Несмотря на химическую природу этого процесса, его рассмотрение представляется уместным именно в этом разделе — в силу формальных параллелей с дисперсией (см. далее).

** В зарубежной литературе принято пользоваться другим значением этого коэффициента, равным D_M/n^0 , где n^0 — общая связанная пористость (трещиноватость).

ниже величин коэффициента молекулярной диффузии D^0 в свободном растворе: для песчано-глинистых грунтов численные значения D_M характеризуются величинами $N \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{сут}$ и довольно сильно зависят от размеров молекул мигрирующего вещества (см. далее) и степени его ионизации; в свободном растворе для большинства ионов электролитов $D^0 = (1-2) \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/\text{сут}$ [12].

Наиболее заметна роль диффузии при миграции в сильно гетерогенных системах, где она является важнейшим фактором массообмена между элементами с резко различной проницаемостью, прежде всего, трещинами и пористыми блоками. Однако и во многих «скальных» трещиноватых (с практически не фильтрующими блоками) породах существует довольно развитая система пустот, доступных для молекулярной диффузии вещества, особенно — вблизи поверхностей трещин: здесь значения D_M измеряются цифрами порядка $10^{-7}-10^{-9} \text{ м}^2/\text{сут}$, причем большой их разброс во многом объясняется вторичными образованиями на стенках трещин [35].

Например, такой порядок значений приводится в работах [16, 19, 36] для массива гранитоидов (коэффициент фильтрации около 10^{-6} м/сут), где блоковая (матричная) пористость $n_0 = 0,5-2 \%$, причем авторы этих работ считают принципиальным учет диффузионного механизма насыщения блоков при обосновании систем подземного захоронения высокотоксичных радиоактивных отходов.

В работе* приводятся интересные данные по длительному (3,5 года) диффузионному насыщению гранитов в полевых условиях на полигоне «Стрипа»: размер пор — порядка 0,5 микрон, пористость — 0,003, $D_M \approx 3 \cdot 10^{-8} \text{ м}^2/\text{сут}$, $K \approx 10^{-8} \text{ м/сут}$; глубина проникновения диффундирующего раствора в матрицу достигала 2-3 м.

* Типа гранитов, гранито-гнейсов, сильно метаморфизованных сланцев и т.п.

** L. Birgerssán, J. Neretnieks. Diffusion in the Matrix of Granite Rock. — Water Res. Res., 1990, v. 26, № 11, p. p. 2843-2892.

При значительном изменении диапазона концентрации (c) компонентов необходимо считаться с нелинейностью диффузионного процесса, находящей отражение в функциональной зависимости $D_M(c)$: с ростом c величина D_M обычно падает.

Молекулярно-диффузионный перенос особенно важен при малых скоростях фильтрации, в первую очередь — при переносе через слабопроницаемые образования (разделяющие слои, пористые блоки трещиноватых пород). При миграции вещества в гетерогенных пластах, представленных элементами с различной проницаемостью (прослоями и линзами глин в песчаных отложениях, пористыми блоками и трещинами), молекулярная диффузия действует как фактор, направленный на выравнивание концентраций, обуславливая отток вещества из более проницаемых элементов (по которым идет основной конвективный перенос) к менее проницаемым. В результате она способствует образованию на фронте вытеснения одного раствора другим переходной зоны с постепенно меняющейся концентрацией и снижает скорость его перемещения.

1.1.3. Дисперсионный перенос

Механическая дисперсия (гидродисперсия) вещества объясняется двумя эффектами: 1) динамическим — локальной изменчивостью поля скоростей фильтрации и 2) кинематическим — «ветвлением» траекторий движения. Их сочетание внешне проявляется подобно диффузионному процессу, способствуя образованию переходных (по концентрации) зон между вытесняющим и вытесняемым растворами (рис. 1.1, б и в). Считается, что процесс также подчиняется закону Фика (1.2), но коэффициент пропорциональности в последнем является функцией скорости фильтрации.

Рассмотрим сначала *продольную гидродисперсию*, ориентированную по направлению траекторий конвективного потока. В гомогенных однородных средах этот процесс характеризуется коэффициентом:

$$D_L = \delta_L v, \quad (1.3)$$

где δ_L — константа продольной дисперсии (*дисперсивность*), отражающая геометрию порового или трещинного пространства; величина ее коррелирует с размером элементарных составляющих фильтрующей породы [2,9].

Для относительно однородных по гранулометрическому составу пористых пород константа δ_L изменяется от десятых долей до первых сантиметров; однако для неоднородных грубозернистых образований величина δ_L может достигать нескольких десятков сантиметров. В трещиноватых породах, в зависимости от характерных размеров породных блоков, параметр микродисперсии δ_L изменяется в гораздо более широких пределах — от нескольких десятков сантиметров до десятков метров.

Однако отмеченная линейная зависимость $D_L(v)$ не оправдывает себя при описании механического рассеяния вещества в гетерогенных или неоднородных средах, особенно, когда они имеют относительно упорядоченную (в масштабе рассмотрения процесса) структуру (см. далее). Впрочем, даже в хаотически неоднородных средах величина δ_L оказывается постоянной лишь при масштабах рассмотрения, превышающих на порядок и более размер характерного элемента неоднородности: фактически здесь должно выполняться известное требование, предъявляемое к репрезентативному элементарному объему сплошной среды. При меньшем масштабе рассмотрения величина δ_L оказывается существенно зависящей от него: отмечается рост δ_L по мере увеличения

длины (времени) переноса, причем для многих типовых задач сама величина δ_L становится пропорциональной скорости, или $D_L \sim v^2$. В предельном (теоретически возможном) варианте, исключающем обмен веществом между отдельными проводящими элементами среды, подобный режим переноса может наблюдаться неограниченно долго.

Так, из анализа модели потока в параллельных изолированных друг от друга трещинах, имеющих логнормальный закон распределения по раскрытости (b), следует, что параметр δ_L является линейной функцией координаты x (совпадающей с направлением вектора скорости фильтрационного потока) [28]:

$$\delta_L = \frac{1}{2} [\exp(4\sigma_s^2) - 1] x, \quad (1.4)$$

где σ_s — коэффициент вариации параметра b . При малых σ_s ($\sigma_s \ll 1$) $\delta_L \approx 2\sigma_s^2 x$. Если отождествлять характерное расстояние x с величиной $(v/n)_{\text{ср}} t$, где $(v/n)_{\text{ср}}$ — математическое ожидание действительной скорости фильтрации, то расчетная величина δ_L неограниченно растет во времени, будучи прямопропорциональной скорости переноса. Нужно, однако, понимать, что результат этот является прямым следствием выбранной модели трещиноватой среды, исключающей обмен веществом между отдельными трещинами.

Более общими являются пространственные модели, включающие взаимопересекающиеся системы трещин, между которыми происходит обмен веществом [33]. Благодаря этому наступает стабилизация расчетного коэффициента микродисперсии D_L^* (или параметра δ_L), свидетельствующая о выполнении условия физического континуума — репрезентативности рассмотренного объема (сплошной) среды. К сожалению, при мелкомасштабных процессах, особенно в крупноблочных трещиноватых породах и в средах с кана-

* При постоянстве скорости фильтрации.

ловым механизмом фильтрации — массопереноса, подразумеваемый механикой сплошной среды уровень осреднения может вообще не достигаться. Более того, при малом числе пересечений трещин и каналов не происходит полного смешения индивидуальных потоков по ним, что молчаливо предполагается всеми моделями [26].

В анизотропных средах значение δ_L сильно зависит от направленности фильтрационного потока относительно осей анизотропии проницаемости; эффекты рассеяния особенно интенсивны при ориентации оси максимальной проницаемости нормально потоку.

В целом, можно считать установленным, что при больших масштабах переноса в реальных (трехмерных) гомогенных системах продольная гидродисперсия хорошо описывается линейной зависимостью от скорости фильтрации с постоянным параметром δ_L . Применимость такого представления определяется размером репрезентативного объема среды: он должен содержать достаточно большое число (грубо говоря, — десятки) «пересечений», по которым идет обмен веществом между основными водопрводящими элементами среды.

Что же касается моделей с переменной дисперсивностью, то в них нет ни практического, ни теоретического резона (см. подробнее разд. 3.5).

Поперечная механическая дисперсия вещества, идущая вкрест основного направления переноса, приводит к формированию объемных (двух- и трехмерных) ореолов рассеяния (рис. 1.1, в). Принято считать, что ее константа δ_T обычно в 10-20 раз ниже, чем значение δ_L , хотя это более-менее справедливо лишь для гомогенных однородных сред; в неоднородных системах отношение $\frac{\delta_T}{\delta_L}$ сильно зависит от конфигурации потока [34].

В некоторых работах, базирующихся на анализе полевого материала, отмечается анизотропия рассеивающих свойств водоносных толщ в направлениях,

ортогональных направлению конвекции: различия в величинах δ_{T_y} и δ_{T_z} , характеризующих плановую и профильную поперечную гидродисперсию, могут достигать двух порядков (обычно $\delta_{T_y} > \delta_{T_z}$), что, вероятнее всего, является следствием естественной стратификации геологических сред. Не исключено также, что показатели поперечной профильной дисперсии систематически занижаются из-за неприспособленности измерительной системы (наблюдательных скважин) к фиксации различий концентрации на весьма коротких интервалах.

Впрочем, даже теоретические соображения о поперечной дисперсии носят весьма противоречивый характер. Так, вопреки традиционным представлениям, имеются доказательства — на примере стохастически неоднородных сред, что при больших масштабах переноса наступает асимптотический режим поперечной дисперсии, при котором она не зависит от скорости фильтрации ($D_T = \text{const}$), причем поперечное рассеяние перпендикулярно слоистости может идти в этом режиме интенсивнее, чем вдоль нее (подчеркнем, что рассматривались не детерминированно неоднородные среды, а лишь поля с относительно слабыми флуктуациями скоростей фильтрации).

Вместе с тем, уже неоднократно отмечено, что оценки поперечной дисперсии, даваемые стохастической теорией, приводят к сильно заниженным (грубо говоря, на порядок) результатам, — если их сравнивать с данными полевых экспериментов и наблюдений. Некоторые неверные стереотипы по этому поводу сложились и из-за повсеместного изучения стохастических моделей дисперсии в стационарных (неизменных во времени) фильтрационных потоках, часто, к тому же, в двумерной постановке. Между тем, если для продольной дисперсии важна пространственная изменчивость градиента, то для поперечной главное значение имеют временные флуктуации в его направленности. Специфически должна проявляться поперечная дисперсия в породах с «канальвым» механизмом миграции. Обычно соответствующая модель исходит из предпосылки о пересечении каналов и не учитывает возможность резких скачков напоров в реальных каналах с переменным раскрытием. Вероятность

проявления такого эффекта в трехмерном варианте намного выше, чем в двумерном, причем при соответствующей ориентации «каналов» он может способствовать заметному росту поперечной дисперсии.

Как бы то ни было, ясно, что поперечная дисперсия является (наряду с молекулярной диффузией и временными флуктуациями поля скоростей) важнейшим фактором рассеяния вещества, относительная роль которого возрастает (в отличие от продольной дисперсии) с увеличением масштаба переноса, точнее говоря, боковой поверхности мигрирующего ореола. Благодаря такому рассеянию, идет замедление переноса в продольном направлении и сглаживание концентрационных распределений в пределах водоносного комплекса; именно последнее обстоятельство делает допустимым использование при больших масштабах переноса упрощенных асимптотических моделей (в частности, моделей продольной дисперсии, упомянутых выше).

Объединяя все сказанное о продольной и поперечной дисперсии, можно описывать дисперсионное рассеяние в целом расчетным тензором дисперсии. В асимптотическом режиме его главные компоненты определяются упомянутыми выше значениями D_L , D_T и D_{T_z} (при нулевых диагональных компонентах), а главные направления, соответственно, параллельны и перпендикулярны вектору скорости фильтрации.

* До наступления асимптотического режима характеристики этого тензора могут изменяться довольно сложным образом; в частности, первое главное направление отклоняется — при промежуточных масштабах переноса — от направления скорости, угол отклонения постепенно достигает некоторого максимума, а затем асимптотически стремится к нулю. Более того, практическое достижение упомянутой асимптотики может отмечаться для продольного и поперечного рассеяния неодновременно [29].

Ограничиваясь далее подобной упрощенной характеристикой дисперсионного процесса, объединим его параметр $\overline{D}_z$ (векторная величина) с коэффициентом молекулярной диффузии (скалярная величина) в виде *коэффициента микродисперсии* :

$$\overline{D} = D_M + \overline{D}_z, \quad (1.5)$$

где компоненты вектора $\overline{D}_z$ равны D_L , D_{T_y} и D_{T_z} . В неоднородных («деформированных») фильтрационных потоках результирующее значение коэффициента микродисперсии меняется в зависимости от ориентации вектора скорости фильтрации (разд. 1.2.1).

Роль каждого из слагаемых в формуле (1.5) определяется, при прочих равных условиях, скоростью фильтрации и характером горных пород.

Так, для раздельнозернистых пород в первом приближении можно выделить следующие характерные диапазоны продольного дисперсионного рассеяния в зависимости от значений безразмерного комплекса Pe^0 , равного vd_3/D^0 (где d_3 — эффективный диаметр зерен минерального скелета, D^0 — коэффициент молекулярной диффузии в свободной среде) [9, 11, 13]:

- 1) при $0 \leq Pe^0 < 0,3+0,5$ — дисперсионный перенос полностью определяется молекулярной диффузией в поровом пространстве;
- 2) при $Pe^0 > 5+10$ — преобладает гидродинамическая дисперсия, а молекулярная диффузия имеет подчиненное значение;
- 3) в переходной зоне при $0,5 < Pe^0 < 5$ вклады молекулярной диффузии и гидродисперсии примерно сопоставимы.

Строго говоря, численные значения коэффициента D зависят — вслед за коэффициентом D_M — от химической природы мигрирующего вещества, что подтверждают лабораторные эксперименты [18].

* В зарубежных публикациях используется значение $\overline{D}/n$.

Так, на графике (рис. 1.2) отражены результаты определения соотношения D_L/n в зависимости от действительной скорости фильтрации $u = v/n$. Как видно, при относительно больших u (> 1 см/ч) коэффициенты продольной дисперсии D_L , найденные для тритиевой воды ($^3\text{H}_2\text{O}$) и двух органических водорастворимых соединений — пентафлюоробензона (PFBA) и феноксиацетатной кислоты (2,4-D), практически совпадают. При низких u (< 1 см/ч), когда велика роль молекулярной диффузии, значения D_L для $^3\text{H}_2\text{O}$ намного превышают соответствующие значения для органических веществ. По мнению авторов работы [18], это обстоятельство должно учитываться при миграционных прогнозах органического загрязнения подземных вод, для которых недопустимо использование значений D_L , найденных из индикаторных экспериментов с хорошо подвижными ионами. Можно предположить, что такого рода ошибки будут наиболее существенными в средах с двойной пористостью, где интенсивность диффузии из трещин в пористую матрицу определяет во многом характер процесса загрязнения подземных вод в целом.

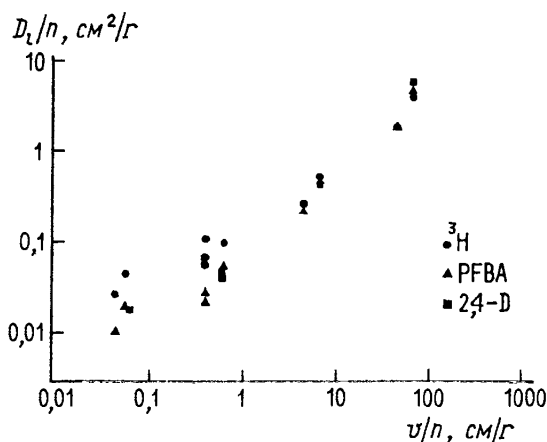


Рис. 1.2. Зависимость коэффициента продольной дисперсии от скорости потока для различных мигрантов

Количественный вклад диффузионно-дисперсионной составляющей в общий массовый поток вещества,

переносимого фильтрующейся жидкостью, определяется градиентным законом вида (1.2) при замене D_M на D .

Суперпозиция двух составляющих массового потока — конвективной и дисперсионной — дает в однонаправленных процессах полный массовый поток вещества через элементарную площадку:

$$j = j^v + j^D = (cv - D\nabla c).$$
 (1.6)

Если конвективно-дисперсионный перенос осуществляется в средах, однородных по емкостным и фильтрационным свойствам, в которых внутривыводный обмен протекает на одном элементарном микроуровне, то в целом такой процесс в дальнейшем будем называть *микродисперсией* в фильтрационном потоке [14,30].

1.1.4. Осмос и наведенные им процессы

Осмотические явления. Предпосылка о миграции однофазного флюида как единого целого может заметно нарушаться в тонкопористых слабопроницаемых средах. Если структура пористой среды такова, что подвижность растворенного вещества существенно меньше, чем растворителя, то исходное соотношение между объемами пор и заполняющего их флюида нарушается с соответствующим изменением исходного распределения гидростатического давления. При этом, наряду с диффузией, включаются два дополнительных механизма переноса. Во-первых, под влиянием градиента химического потенциала (вызывающего, как мы знаем, диффузионный перенос растворенного вещества) возникает осмотическое течение — объемный поток всей массы флюида*; интенсивность его (на единичное поперечное сечение) выражается в виде [20]:

* Т.е. процесс имеет конвективный характер.

$$v_{осм} = -L_{vs} \frac{RT}{cM} \nabla c, \quad (1.7)$$

где c и M — концентрация растворенного вещества (кг/м³) и его молекулярный вес (кг/моль), R — универсальная газовая постоянная (8,314 Дж/К·моль), T — температура (К), L_{vs} — феноменологический коэффициент (кгм²/Дж·с).

Соответственно, осмотический поток вещества равен

$$J_{осм} = c v_{осм} = -L_{vs} \frac{RT}{M} \nabla c. \quad (1.8)$$

Во-вторых, наведенный осмосом градиент гидростатического давления (∇P) вызывает встречное движение растворителя — ультрафильтрацию.

Результирующий поток вещества для изотермических условий записывается в следующем симметричном виде [20]:

$$J_s = - [c L_{vv}^{(1)} + (1 - c \bar{V}) L_{sv}^{(2)}] \nabla P - [c L_{vs}^{(3)} + (1 - c \bar{V}) L_{ss}^{(4)}] \frac{RT}{cM} \nabla c, \quad (1.9)$$

где первое слагаемое отражает конвекцию, второе — ультрафильтрацию, третье — химический осмос, четвертое — химическую диффузию (здесь $\bar{V}$ — относительный парциальный (удельный) объем вещества — м³/кг, $1 - c \bar{V}$ — концентрация растворителя, L_{ij} — соответствующие эмпирические константы, причем $L_{ij} = L_{ji}$).

Например, для типичных условий лабораторных миграционных экспериментов предшествующее равенство дает:

$$J_s = c (v_{конв} + v_{осм}) - (1 - c \bar{V}) \left[L_{sv} \nabla P + L_{ss} \frac{RT}{cM} \nabla c \right], \quad (1.9,a)$$

где $v_{\text{конв}}$ и $v_{\text{осм}}$ — противоположно направленные объемные* конвективный и осмотический потоки. При отсутствии потока флюида в опытных условиях — за счет задания компенсационного перепада давлений в камерах, сумма $v_{\text{конв}}$ и $v_{\text{осм}}$ равна нулю, т.е. заданный конвективный поток равен и противоположен по направлению осмотическому потоку:

$$L_{vv} \nabla P = -L_{vs} \frac{RT}{cM} \nabla c,$$

Тогда поток вещества определяется разнонаправленными процессами диффузии и ультрафильтрации:

$$J_s = (1 - c\bar{V}) \frac{L_{ss} L_{vv} - L_{sv}^2}{L_{sv}} \nabla P, \quad (1.10)$$

а градиент давления ∇P отвечает перепаду давлений, наведенному осмосом (т. наз. осмотическому давлению).

Другая, на наш взгляд, более наглядная интерпретация осмотических процессов связана напрямую с представлениями о различной диффузионной подвижности растворенного вещества и растворителя, характеризуемой парциальными коэффициентами D_1 и D_2 . В этом случае** балансовое квазистационарное уравнение для суммарного массового потока флюида f^ϕ , рассматриваемого как движение раствора со скоростью $v_{\text{осм}}$, можно представить в виде [12]:

$$f^\phi = v_{\text{осм}}^\phi \rho = -D_1 \nabla c_1 - D_2 \nabla c_2, \quad (1.11)$$

где ∇c_2 — градиент концентрации растворителя, ρ — текущая плотность раствора, $c_1 \equiv c$. Отметим, что величина $v_{\text{осм}}^\phi$, называемая иногда скоростью осмотической фильтрации, суммарно отражает эффек-

* Т.е. захватывающие весь объем флюида.

** Считаем, что перенос определяется только заданным перепадом концентрации вещества на границах области.

ты, наведенные осмосом, т.е. не совпадает с $v_{осм}$. Такая, в общем-то крайне феноменологическая, постановка вполне увязывается с практикой лабораторных экспериментов*.

Представим c_1 и c_2 как функции плотности ρ в виде [12]:

$$c_1 = (\rho - \rho^0)/\lambda, \quad c_2 = \rho - c_1, \quad (1.12)$$

справедливым для широкого диапазона изменения концентраций ($\rho^0 \approx 998 \text{ кг/м}^3$ — плотность воды при $c_1 \rightarrow 0$; $\lambda \approx 0,7$ — эмпирическая константа). Тогда из (1.11) находим:

$$v_{осм}^{\phi} = \frac{(1 - \lambda) D_2 - D_1}{\lambda \rho} \nabla \rho = \frac{(1 - \lambda) D_2 - D_1}{\rho} \nabla c_1. \quad (1.13)$$

В тонкопористых слабопроницаемых породах, представляющих первостепенный интерес с позиций возникновения осмоса, $D_1 \ll D_2$, т.е. осмотическая фильтрация идет в направлении увеличения плотности (концентрации вещества).

С другой стороны, из соотношений (1.11)-(1.13) можно найти выражение для эффективного коэффициента диффузии:

$$D_{\rho} = D_1 + \frac{(1 - \lambda) D_2 - D_1}{\lambda} \frac{\Delta \rho}{\rho} \quad (1.14)$$

($\Delta \rho = \rho - \rho^0$), при котором результирующий массовый поток растворенных компонент J_1^D может быть формально представлен в

виде диффузионной закономерности (1.2): $J_1^D = -D_{\rho} \frac{\partial c_1}{\partial l}$. Второй член в выражении (1.14) отражает дополнительное рассеяние растворенного вещества при осмотической фильтрации, направленное на выравнивание плотности раствора. Отсюда видно, что в тонкопористых породах, обладающих свойствами полупроницаемых мембран ($D_1 \ll D_2$),

* В гидравлически закрытой диффузионной ячейке (разд. 12.3) наличие осмотической фильтрации может контролироваться по изменению гидростатического давления на границах ячейки.

$$D\rho \approx \frac{(1-\lambda)}{\lambda} \frac{\Delta\rho}{\rho} D_2 = (1-\lambda) \frac{c_1}{\rho} D_2, \quad (1.15)$$

т.е. в этом варианте осмос внешне проявляется как диффузия, идущая, однако, с заметно (как минимум, на порядок, а чаще — на несколько порядков) меньшей интенсивностью; при этом последняя примерно пропорциональна концентрации вещества, т.е. процесс существенно нелинеен.

В свете рассмотренных закономерностей ясно, что экспериментально определяемый на образцах глинистых пород коэффициент молекулярной диффузии, строго говоря, не соответствует парциальному коэффициенту D_1 . Во многих опытных ситуациях осмос внешне проявляется подобно диффузии вещества и способен, в связи с этим, давать завышение расчетной величины D_1 , особенно при высоких опытных концентрациях. Включение же осмотических процессов в эффективный параметр диффузии отнюдь не всегда допустимо и может приводить к качественно неверным представлениям из-за недоучета некоторых эффектов, «наведенных» осмосом, а также специфики взаимодействия диффузии и осмоса на резко нестационарных стадиях переноса.

Модельные оценки [21], основанные на численном решении нестационарных уравнений вида

$$\beta \frac{\partial P}{\partial t} = -\nabla J_v, \quad (1.16)$$

$$n \frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla J_s,$$

(β — коэффициент, характеризующий сжимаемость породы) для условий осесимметричной миграции при постоянном солевом потоке на входной границе пласта, показывают, что:

1) осмос ведет к увеличению (до нескольких порядков) градиента давления вблизи границы, — по сравнению со случаем $L_{vs} = L_{sv} = 0$;

2) осмос и наведенная им ультрафильтрация, которая становится доминирующим процессом, направлены на уменьшение величины массового потока вещества от границы, хотя абсолютные значения концентрации вблизи этой границы возрастают.

Полученные результаты имеют важное значение в свете оценки защищенности подземных вод на участках захоронения высокоактивных отходов.

Рассмотрим два характерных примера.

В первом примере предполагается наличие двух водоносных пластов с равными исходными напорами: верхнего, в зоне активного водообмена — с пресной водой и нижнего, в зоне замедленного водообмена — с соленой, разделенных глинистым пластом мощностью m_p ; через последний идет осмотическая фильтрация воды из верхнего слоя в нижний, а диффузия солей через глины практически отсутствует ($D_1 \approx 0$). В результате поступления растворителя в нижний пласт начинают действовать два фактора, направленных на стабилизацию процесса: постепенное уменьшение концентрации солей в нижнем пласте и увеличение в нем гидростатического напора ΔH ; последний фактор вызывает появление встречной фильтрации раствора из нижнего пласта в верхний со скоростью V_ϕ , и при $|v_\phi| = |v_{ос.м}^\phi|$ процесс стабилизируется. Полагая $|v_\phi| = K_p \Delta H / m_p$, из формулы (1.13) получим предельный перепад напоров, обусловленный осмосом:

$$\Delta H_{\max} \approx \frac{(1 - \lambda) D_2}{\lambda K_p} \cdot \frac{\Delta \rho_{\max}}{\rho} = \frac{D \rho_{\max}}{K_p}, \quad (1.17)$$

где $\Delta \rho_{\max}$ — перепад плотностей растворов в пластах; K_p — коэффициент фильтрации пород разделяющего слоя. Значения $\Delta H_{\max}$ согласно (1.17) невелики, но они резко возрастают (примерно на величину $m_p I_0$), если учесть начальный градиент фильтрации I_0 глинистых пород. По крайней мере, некоторые авторы объясняют именно осмосом наличие больших перепадов напоров между смежными водоносными пластами, разделенными слабопроницаемыми глинами. Заметим также, что рассмотренный здесь механизм может реализоваться, очевидно, и в лабораторных опытах с диффузионной ячейкой (разд. 12.3).

Во втором примере рассматривается пласт трещиновато-пористых пород с пресными водами, в который внедряются соленые воды. Появление последних в трещинах вызывает осмотическое отфильтрование пресной воды из тонкопористых блоков, в результате чего гидростатическое давление в них уменьшается, в сами блоки

сжимаются. Так как давление воды в трещинах остается неизменным или даже увеличивается (за счет притока воды из блоков), возникает фильтрация из трещин в блоки. Процесс стабилизируется, когда перепад напоров между трещинами и блоками будет отвечать зависимости (1.17). При больших начальных градиентах блоковой матрицы перепад напоров $\Delta H_{\max}$ может, очевидно, измеряться вполне ощутимыми величинами; поэтому конечное сжатие пористых блоков и отвечающий ему объем поступившей из блоков пресной воды* заметно повлияют на характер миграции растворов в трещинах. Сходный механизм может реализоваться и в лабораторных опытах, ориентированных на диффузионное насыщение образцов из окружающего их раствора. С возможностью осмотического сжатия следует, очевидно, считаться и при оценке экранирующих свойств глинистых пород в подошве рассолонакопителей. В отличие от рассмотренного примера, сжатие пород, идущее здесь при весьма низких обжимающих нагрузках, может вызывать образование трещин в глинистых экранях.

1.1.5. Основные представления о миграции многофазных жидкостей

До сих пор мы рассматривали ситуации, в которых мигрирующий раствор представлял собой однофазную систему, а жидкости разного состава были смешивающимися. Между тем, в практике нередки случаи, когда природная и загрязняющая жидкости не смешиваются друг с другом, например, при загрязнении нефтепродуктами, которые лишь в малой степени способны растворяться в подземных водах и образуют отдельную от них фазу. Еще сложнее поведение таких загрязнителей в зоне аэрации, где исходно уже существуют две подвижные фазы — жидкая и газообразная (гл. 4). В таких ситу-

* Эти величины легко определяются по известным значениям коэффициента сжимаемости блоковой матрицы и эффективного давления $p_3 = \rho_0 g \Delta H_{\max}$ (где g — ускорение свободного падения).

ациях приходится рассматривать миграцию многофазных жидкостей.

Основной их физической особенностью является наличие разных систем давлений (p_i) в различных фазах и соответствующего поверхностного натяжения — капиллярного давления ($p_{\text{кап } i}$) на границах раздела фаз, а свойства и поведение мигрантов решающим образом зависят от степени насыщенности среды ($\bar{S}_i$) по каждой фазе. Определяющими физическими соотношениями при этом являются:

1) опытные зависимости капиллярного давления от насыщенности:

$$p_{\text{кап}} = p_{\text{нс}}^{\Gamma} - p_{\text{с}}^{\Gamma} = p_{\text{кап}}(\bar{S}_{\text{с}}), \quad (1.18)$$

где индексы «с» и «нс» относятся к смачивающей и несмачивающей фазам, а p^{Γ} — давления на границе раздела фаз;

2) закон Дарси, записанный через фазовые проницаемости (K_i), вязкости (μ_i) и давления (p_i) для каждой фазы*;

3) опытные зависимости фазовых проницаемостей ($\bar{K}_i$) от относительных насыщенностей ($\bar{S}_i$):

$$\bar{K}_i = \bar{K}_i(\bar{S}_i). \quad (1.19)$$

Простейшая, в какой-то мере — предельная модификация подобной системы в двухфазном варианте рассматривается нами в гл. 4 применительно к зоне аэрации, где смачивающая фаза представлена водой, а несмачивающая — главным образом, воздухом; поведением последнего при этом в расчетной модели пренебрегают, однако для понимания основных физических концепций и их математического описания это об-

* Показателями скорости фильтрации служат коэффициенты подвижности $\bar{K}_i/\mu_i$.

стоятельство не имеет принципиального значения. Более того, для рассмотрения поведения системы двух несмешивающихся жидкостей, например, сейчас широко используются феноменологические зависимости $K(\bar{S})$ и $p_{\text{кап}}(\bar{S})$, полученные для влагопереноса в зоне аэрации. По этим причинам мы не будем здесь пока останавливаться на математической формулировке проблемы миграции многофазных систем, полагая, что ее принципиальные позиции будет легче всего усвоить именно на примере влагопереноса в зоне аэрации (гл. 4). Пока же мы продолжим анализ этой проблемы по линии «более тонких» физических аспектов, которые связаны, прежде всего, с масштабными эффектами, влияющими на описание процесса даже в условиях однородных гомогенных сред.

В самом деле, до сих пор мы привычно полагали, что, проводя осреднение свойств среды в пределах ее минимального репрезентативного объема, осуществляем вполне корректный переход к описанию поведения среды на микроуровне — в рамках предпосылок сплошной среды. Однако в рассматриваемой нами сейчас двухфазной (скажем так, для простоты) системе несмешивающихся жидкостей концептуальная физическая модель включает составляющие на двух масштабных уровнях [25]:

1) масштаб пор, на котором действуют капиллярные эффекты и проявляются механизмы вытеснения одной жидкостью другой, и

2) масштаб репрезентативного минимального объема, которому отвечают распределение насыщенностей и значения фазовых проницаемостей, определяемые опытным путем для различных насыщенностей.

Таким образом, для привычного нам представления всех основных составляющих процесса в рамках моделей сплошной среды необходимо разрабатывать специальные процедуры для «перемасштабирования» капиллярных эффектов с уровня пор до уровня репрезентативного объема. Работы в этом направлении ведутся в последние годы (см., например, [25,32]): предложены решения для некоторых идеализированных сред, причем стали яснее и многие сложности подобного подхода. Поэтому на практике упомянутая проблема несоответствия масштабов чаще всего вообще иг-

норируется. Тем самым молчаливо предполагается, что в пределах минимального репрезентативного объема изменения насыщенности в зависимости от капиллярного давления происходят весьма быстро (условно говоря, мгновенно) в сравнении с миграцией флюидов — перемещением границы раздела. При этом, однако, могут быть утеряны важные детали миграции многофазных систем, прежде всего, связанные с неустойчивостью границы раздела: при вытеснении смачивающей жидкости посредством несмачивающей образуются «языки» последней, быстро проникающие на большие расстояния даже в малых количествах. И, наоборот, вытеснение малых объемов несмачивающей жидкости посредством смачивающей практически недостижимо.

В трещиноватых породах, при доминировании капиллярных сил над вязкостными, несмачивающая фаза может течь в плоскости трещин только по непрерывным траекториям, обходящим участки малых раскрытий трещин, блокированные смачивающей фазой. Для этого необходима крупномасштабная корреляция между основными водопроводящими («большими») трещинами. Аналогично, пути для смачивающей фазы есть только тогда, когда она может обойти «большие» трещины, что требует крупномасштабной корреляции между «малыми» трещинами. В частности, при логонормальном распределении раскрытий трещин минимальная насыщенность жидкой фазой (т.е. та, при которой она еще может двигаться) обычно много меньше, чем для несмачивающей фазы.

По изложенным причинам, часть трещинного пространства, не связанная напрямую с источником компонентов несмачивающей фазы, может оставаться для них совершенно недоступной, если раскрытие всех трещин $b < 2\sigma / p_{\text{кап}}$. В этом варианте «канальная» модель миграции (разд. 1.1.1) вообще неприменима, так как «канал» может оказываться полностью занятым одной фазой и «заперт» для другой [32].

В трещиновато-пористых породах проникновение загрязняющей несмачивающей фазы из трещин в пористые блоки, изначально заполненные смачивающей фазой, может идти весьма интенсивно. Например, в работе [27] приводятся данные о загрязнении летучими органическими соединениями пористой матрицы меловых пород на глубину 50 м от поверхности даже на участках восходящей фильтрации — под влиянием плотностного градиента. После очистки трещин от загрязнителя обратная диффу-

зия окажется крайне медленной и, очевидно, не полностью обратимой.

Благодаря возможности для несмачивающей жидкости обходной фильтрации по матрице — мимо трещин, перекрытых смачивающей фазой, относительная проницаемость $K_{нс}$ оказывается в трещиновато-пористой породе существенно выше, чем фазовая проницаемость одного лишь трещинного пространства; наоборот, в чисто трещиноватых породах отсутствие такой возможности приводит к тому, что при промежуточных насыщенностях сумма относительных фазовых проницаемостей оказывается меньше единицы [32].

В макронеоднородных пластах эти эффекты могут резко усиливаться, тем более что влияние неоднородности для несмешивающихся жидкостей вообще проявляется намного сильнее, чем для однофазных флюидов. Так, в слоистых пластах распределение насыщенности очень чувствительно к вариациям послойной проницаемости: различия в десятки процентов достаточны для резко избирательной миграции даже в случаях миллиметровых прослоев [8]. В частности, из-за неаддитивности осреднения капиллярных свойств среды на микро- и макроуровне, введение макропараметров будет резко завышать возможности извлечения из пласта несмачивающей фазы, например, нефтяного загрязнения.

Наконец, дополнительные осложнения возникают в системах с фазовыми переходами (например, жидкая вода — пар): возникают неустойчивости, циклические вариации давления и скорости в трещинах даже при неизменных граничных условиях; объясняется это тем, что несмачивающая фаза (пар) не может поддерживать давление, достаточное для ее непрерывного потока, и жидкая фаза временно перекрывает самые узкие каналы, заставляя давление пара увеличиваться — до прорыва «узкого места». Вместе с тем, перемещение паровой фазы возможно и путем фазового перехода: пар конденсируется на входе в «водяную пробку», а вода испаряется на выходе из нее [31].

1.2. Базовые уравнения и краевые условия для математического описания миграционных процессов

1.2.1. Общее уравнение массопереноса и его основные дифференциальные представления

Конвективно-дисперсионный перенос при фильтрации *однородной* (по плотности и вязкости) *жидкости* описывается уравнением [1,7,15]:

$$n \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla J + W_s = 0, \quad (1.20)$$

где функция $J = J(c)$ отвечает массовому потоку (статистически осредненному в пределах минимальных репрезентативных объемов пористой или трещиноватой среды); W_s — объемная интенсивность поглощения (выделения) вещества, обусловленная проявлением внутренней гетерогенности (двойной пористости, регулярной слоистости и т.п.) пород или физико-химическими взаимодействиями и трансформациями.

Вид функционала ∇J зависит от мерности процесса. В общем трехмерном случае, при рассмотрении миграции в прямоугольной декартовой системе координат, выражение для ∇J имеет вид [15]:

$$\nabla J = \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i c) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right), \quad (1.21)$$

где D_{ij} — компоненты тензора коэффициента микродисперсии (i, j — индексы «матричного представления»), зависящие от рассеивающих свойств среды (констант δ_L , δ_T и коэффициента D_M), направленности и значений составляющих скорости фильтрации v_i ;

$$\begin{aligned} D_{xx} &= \delta_L \frac{v_x^2}{|v|} + \delta_{T_y} \frac{v_y^2}{|v|} + \delta_{T_z} \frac{v_z^2}{|v|} + D_M, \\ D_{yy} &= \delta_L \frac{v_y^2}{|v|} + \delta_{T_y} \frac{v_x^2}{|v|} + \delta_{T_z} \frac{v_z^2}{|v|} + D_M, \\ D_{zz} &= \delta_L \frac{v_z^2}{|v|} + \delta_{T_y} \frac{v_x^2}{|v|} + \delta_{T_z} \frac{v_y^2}{|v|} + D_M, \end{aligned} \quad (1.22)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\delta_L - \delta_{T_y}) \frac{v_x v_y}{|v|},$$

$$D_{xz} = D_{zx} = (\delta_L - \delta_{T_z}) \frac{v_x v_z}{|v|},$$

$$D_{yz} = D_{zy} = (\delta_L - \delta_{T_z}) \frac{v_y v_z}{|v|},$$

$|v| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$ — модуль скорости фильтрации.

Аналогично можно записать уравнение теплового баланса:

$$n C_f^o \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla J^T + W^T = 0, \quad (1.23)$$

$$\nabla J^T = \frac{\partial}{\partial x_i} (C_f^o v_i T) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\lambda_{nij} + E_{ij}) \frac{\partial T}{\partial x_j} \right], \quad (1.24)$$

где T — температура фильтрующей воды с объемной теплоемкостью C_f^o ; λ_{nij} — коэффициент эффективной теплопроводности пласта, контролирующей кондуктивный перенос тепла; E_{ij} — коэффициент «конвективной термодисперсивности», обусловленный локальными флуктуациями скорости v (следует сразу же заметить, что, в отличие от процессов массопереноса, роль таких флуктуаций в дисперсии фронтов, по сравнению с вкладом кондуктивной составляющей, как правило, невелика — см. также разд. 2.2); W^T — объемная интенсивность теплообмена между водой и минеральной фазой горной породы (минеральным скелетом в пористых образованиях и блоками в

трещиноватых средах). Пренебрегая кинетикой такого теплообмена, т.е. полагая, что выравнивание температуры воды T и скелета T_s (блоков T_b)^{*} происходит очень быстро ($\partial T / \partial t \approx \partial T_s / \partial t$), выражение для изменения теплосодержания минеральной фазы можно представить в виде:

$$W^T = (1 - n) C_s^o \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (1.25)$$

C_s^o — объемная теплоемкость скелета (блоков). Следовательно, основное уравнение для переноса тепла имеет вид:

$$C_{II}^o \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla J^T = 0, \quad (1.26)$$

где C_{II}^o — объемная теплоемкость пласта, равная $C_f^o n + C_s^o (1 - n)$.

Приведем частные представления линейного дифференциального оператора ∇I , ограничившись случаями одно- и двумерных массовых потоков с постоянной плотностью-вязкостью; эти уравнения сохраняют свою общую форму и для случая теплопереноса.

Для *одномерного* плоскопараллельного (линейного) массопереноса в направлении оси x со скоростью v при значении коэффициента дисперсии D_L справедливо соотношение:

$$\nabla J = \frac{\partial}{\partial x} \left(v c - D_L \frac{\partial c}{\partial x} \right), \quad (1.27)$$

а для *плоскорадиального* в направлении оси r -

$$\nabla J = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \left(\pm v_r c - D_r \frac{\partial c}{\partial r} \right) \right], \quad (1.28)$$

* Как будет видно из дальнейшего анализа (разд. 3.2.3), для трещиноватых сред это достаточно сильное допущение.

где v_r и D_r — соответственно, радиальная скорость фильтрации и коэффициент микродисперсии (знак «+» отвечает случаю, когда направления v_r и r совпадают).

К двумерным уравнениям сводятся задачи массопереноса, требующие своего рассмотрения в профильной или плановой постановке.

Форма соответствующих дифференциальных выражений упрощается, если сделать предположение о совпадении осей декартовых координат с главными направлениями тензора профильной (или плановой) дисперсии. Так, в случае профильного массового потока (в плоскости $x \div z$)

$$\nabla J = v_x \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + v_z \frac{\partial c}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right), \quad (1.29)$$

а для планового (в плоскости $x \div y$) —

$$\begin{aligned} \nabla J = & \frac{1}{m} \left[v_x m \frac{\partial c}{\partial x} + c m \frac{\partial v_x}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} m \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \right. \\ & \left. + v_y m \frac{\partial c}{\partial y} + c m \frac{\partial v_y}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yy} m \frac{\partial c}{\partial y} \right) \right] \end{aligned} \quad (1.30)$$

где $m = m(x, y)$. Последнее уравнение дано в форме, удобной для математического моделирования. Если фильтрация имеет одномерный характер [$v_y(v_z) = 0$], то $D_{xx} \equiv D_L$, $D_{yy} \equiv D_{T_y}$, $D_{zz} \equiv D_{T_z}$.

Наконец, в системе криволинейных координат φ и ψ [$\varphi(x, y)$ — потенциал скорости фильтрации, $\psi(x, y)$ — функция тока] двумерный оператор ∇J имеет вид:

$$\nabla J = v^2 \frac{\partial c}{\partial \varphi} - v^2 \left[\frac{\partial}{\partial \varphi} \left(D \frac{\partial c}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial}{\partial \psi} \left(D' \frac{\partial c}{\partial \psi} \right) \right], \quad (1.31)$$

где $c = c(\varphi, \psi)$, $v = v(\varphi, \psi)$, D и D' — коэффициент продольной (в направлении оси φ) и поперечной (в направлении оси ψ) микродисперсии.

1.2.2. Уравнения миграционного потока переменной плотности

Исходная система уравнений* складывается из [5,15]:

1) уравнения неразрывности фильтрационного потока

$$\frac{\partial (n\rho)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{v}_i^* \rho) = 0 \quad (1.32)$$

и 2) уравнения массопереноса

$$\frac{\partial (n\rho\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{v}_i^* \rho\alpha) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial \rho\alpha}{\partial x_j} \right) = 0, \quad (1.33)$$

где $\bar{v}^*$ — вектор скорости потока переменной плотности, компонентами которого являются:

$$v_x^* = -\frac{k_x^o}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x}, \quad v_y^* = -\frac{k_y^o}{\mu} \frac{\partial P}{\partial y}, \quad (1.34)$$

$$v_z^* = -\frac{k_z^o}{\mu} \left(\frac{\partial P}{\partial z} - \rho g \right),$$

P — давление, ρ — плотность флюида (раствора), $\rho\alpha$ — массовая плотность растворенного вещества, k^o — проницаемость породы, μ — коэффициент динамической вязкости.

Уравнение (1.33) можно преобразовать, введя новую характеристику процесса — безразмерную зависимость

* Для упрощения математической записи, из нее исключены члены, ответственные за описание внутренних источников/стоков.

переменную $\bar{c} = \rho\alpha/\rho$ (массовая доля — относительная концентрация — растворенного вещества в жидкой фазе). Тогда, имея в виду, что $\partial \rho\alpha/\partial x_j \approx \rho \partial \bar{c}/\partial x_j$, перепишем уравнение (1.33) в форме:

$$\frac{\partial (n \rho \bar{c})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{v}_i^* \rho \bar{c}) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \rho \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j} \right) = 0. \quad (1.35)$$

Именно такая математическая формализация миграционного процесса, включающая в анализ уравнения (1.32), (1.34) и (1.35), чаще всего используется для поиска численных решений краевых задач [22,23]. Для этого разработаны и программно реализованы эффективные алгоритмы (разд. 10.5.3 и 10.5.5).

Вместе с тем, заслуживают внимания возможности упрощения исходной математической постановки задачи. Так, в ряде работ, посвященных математическому описанию миграции растворов переменной плотности, вводились некоторые априорные предпосылки о пространственном распределении плотности, позволившие использовать функции приведенного напора или потенциала в качестве энергетических характеристик фильтрационных потоков. Таким образом, в частности, была решена задача о взаимном (поршневом) вытеснении разноплотностных жидкостей, а также задача о внедрении интрузии морских вод в прибрежные горизонты. Во многих случаях, однако, подобные допущения ограничивают круг исследуемых проблем и более универсальным представляется подход, базирующийся на балансовых предпосылках.

Так, следуя основным идеям работ [5,6], введем функцию расчетного напора

$$H = \frac{P}{\rho^0 g} + Z \quad (1.36)$$

(ρ^0 — произвольно выбранная расчетная плотность жидкости) и примем линейный закон изменения плотности жидкости с увеличением концентрации содержащихся в ней солей (вещества) —

$$\rho = \rho_0 + \lambda (c - c_0) \quad (1.37)$$

(ρ_0 — плотность раствора при $c = c_0$); если концентрация и плотность измеряются в одних единицах (г/л), то $\lambda \approx 0,7$ (разд. 1.1.4). В этом случае уравнение фильтрации (1.32) в несжимаемой среде ($n = \text{const}$), с учетом связи коэффициента проницаемости и коэффициента фильтрации ($k^0 = k \mu / (\rho g)$), преобразуется к виду:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial H}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial H}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial H}{\partial z} \right) = \\ = n \bar{\lambda} \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} [k_z (\bar{\rho} - 1)] , \end{aligned} \quad (1.38)$$

где $\bar{\rho} = \rho / \rho^0$ — относительная плотность; $\bar{\lambda} = \lambda / \rho^0$ (размерная величина). Учитывая, что $\bar{\rho} = 1 + \bar{\lambda} c$ (т.е. при $c=0, \rho = \rho^0$), окончательно имеем:

$$-\frac{\partial v_x}{\partial x} - \frac{\partial v_y}{\partial y} - \frac{\partial v_z}{\partial z} = \bar{\lambda} \frac{\partial}{\partial z} (k_z c) + n \bar{\lambda} \frac{\partial c}{\partial t}, \quad (1.39)$$

где $v_{x,y,z}$ — скорости фильтрации жидкости расчетной плотности, связанные со скоростями потока переменной плотности * соотношениями:

$$v_x = v_x^* = -k_x \frac{\partial H}{\partial x}; \quad v_y = v_y^* = -k_y \frac{\partial H}{\partial y}; \quad v_z = v_z^* - \bar{\lambda} k_z c. \quad (1.40)$$

Как видно, уравнение фильтрации для потока переменной плотности, представленное в виде (1.32), отличается от уравнения условно эквивалентного пресного потока функционалом в правой части уравнения (1.39); последний можно рассматривать в качестве дополнительного нестационарного источника — стока [6].

Данные соотношения и рекомендуется [6] использовать для последующего преобразования уравнений массопереноса. В частности, в случае поршневого вытеснения ($D=0$) из (1.35) при $c = \bar{c} \rho$ следует:

$$-\frac{\partial}{\partial x}(v_x c) - \frac{\partial}{\partial y}(v_y c) - \frac{\partial}{\partial z}[(v_z + \bar{\lambda} k_z) c] = n \frac{\partial c}{\partial t}. \quad (1.41)$$

Как хорошо видно из представленных уравнений, решения миграционной и фильтрационной задач оказываются взаимообусловленными, сопряженными. Если принимать во внимание и эффекты рассеяния, то такое сопряжение обусловлено не только рассмотренной здесь взаимосвязью массовой силы в уравнении фильтрации и конвективного члена в уравнении переноса, но и влиянием плотностного фактора на коэффициент дисперсии (через скорость фильтрации).

Вместе с тем, исследования показывают [6], что «эволюция структуры потока переменной плотности связана с возникновением и развитием конвекционных ячеек (вихрей)», которые не могут быть описаны в рамках подобных упрощенных моделей; имеющее при этом место конвективное перемешивание значительно превышает масштабы микродисперсии. Для отражения неустойчивости границы раздела разноплотностных жидкостей используются вероятностные модели (разд. 3.3), учитывающие случайные отклонения скорости частиц жидкости и концентрации от их усредненных значений.

1.2.3. Краевые условия

В качестве *начального условия* обычно используется однородное распределение концентрации во всей области:

$$c|_{t=0} = c^0 = \text{const.}$$

Вопрос о *граничных условиях* намного сложнее, поэтому ограничимся пока краткой математической формулировкой лишь самых распространенных из них применительно к задачам одномерного переноса. Наиболее простое условие на *входной границе* (при $x=0$)

отвечает заданной во времени функции концентрации (условие I рода) и предполагает, что формирование массового потока на границе происходит только в результате конвекции:

$$c|_{x=0} = c_0(t). \quad (1.43)$$

При соизмеримости конвекции и дисперсии реальному режиму массопереноса более соответствует условие III рода, учитывающее диффузионную (дисперсионную) составляющую массового потока:

$$\left| \nu c - D \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x \rightarrow 0} = \nu c_0(t). \quad (1.44)$$

Распространенным вариантом условия (1.43) является задание постоянной граничной концентрации

$$c_0(t) = c_0 = \text{const} \quad (x \rightarrow 0). \quad (1.45)$$

При поддержании постоянной концентрации лишь в течение фиксированного промежутка времени $t = t_{\Pi}$ («пакетный» сигнал) граничным условиям I и III рода отвечают выражения (1.43) и (1.44), где

$$c_0(t) = \begin{cases} c_0 & \text{при } 0 < t \leq t_{\Pi} \\ c^0 & \text{при } t > t_{\Pi} \end{cases}. \quad (1.46)$$

При импульсном входном сигнале, который в математической постановке описывается дельта-функцией $\delta(t)$, граничным условиям I (1.43) и III (1.44) рода отвечают условия:

$$c|_{x \rightarrow 0} = \frac{q_m n}{\nu} \delta(t) + c^0; \quad (1.47)$$

$$\left| c - \frac{D}{\nu} \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x \rightarrow 0} = \frac{q_m n}{\nu} \delta(t) + c^0, \quad (1.47, a)$$

где q_m — мощность источника, равная M/ω (M — масса вводимого вещества, ω — площадь поперечного сечения, через которое вещество поступает в фильтрационный поток).

На выходной границе (при $x = L$) обычно считается допустимым использование условия II рода

$$\frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x \rightarrow L} = 0, \quad (1.48)$$

которое отвечает нулевому дисперсионно-диффузионному потоку; тем самым предполагается, что вывод вещества за пределы области осуществляется только конвекцией (скорость его движения совпадает со скоростью движения частиц воды); с точки зрения физики процесса, исключение диффузионной составляющей достаточно оправдано: градиент концентрации, имея значительную величину на границе $x = 0$ (особенно в начальный период массопереноса), существенно уменьшается в результате процессов рассеяния и теряет свое определяющее значение при подходе концентрационного фронта к другой границе ($x = L$). Иногда можно вообще пренебречь влиянием процессов на выходной границе — при решении задачи для полугораниченной области, в которой

$$c \Big|_{x \rightarrow \infty} = c^0. \quad (1.49)$$

Следует отметить, что приведенная математическая формализация молчаливо предполагала использование значений концентраций c_f , отвечающих расходу миграционного потока через то или иное поперечное сечение (т. наз. «потоковая» концентрация); она связана со значениями локальной объемной концентрации (c_r) соотношением [24]:

$$v c_f - D \frac{\partial c_f}{\partial l} = v c_r. \quad (1.50)$$

Различия между значениями c_f и c_r могут быть заметными при малых скоростях фильтрации (разд. 12.1).

В заключение осталось заметить, что задание краевых условий в проблемах миграции разноплотностных жидкостей требует соответствующего определения функций давления и плотности [3].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ К ГЛАВЕ 1

1. Бочеввер Ф.М., Лапшин Н.Н., Орадовская А.Е. Защита подземных вод от загрязнения. — М.: Недра, 1979, 254 с.
2. Веригин Н.Н., Васильев С.В., Саркисян В.С., Шуржуков Б.С. Гидродинамические и физико-химические свойства горных пород. — М.: Недра, 1977, 271 с.
3. Гензель Г.Н., Карачевцев Н.Ф., Коносовский П.К., Кравчук С.В., Мироненко В.А., Румынин В.Г. Решение задач охраны подземных вод на численных моделях/ Под общей редакцией Мироненко В.А. — М.: Недра, 1992, 240 с.
4. Голубев В.С. Динамика геохимических процессов. — М.: Недра, 1981, 208 с.
5. Куваев А.А. Численный анализ плотностной конвекции в потоке загрязненных подземных вод. — Водные ресурсы, 1992, №6, с.25-36.
6. Куваев А.А. Проблемы моделирования миграции рассолов в потоках подземных вод. Газовая промышленность. Серия: Охрана человека и окружающей среды в газовой промышленности. Обзорная информация, М., 1995, 40 с.
7. Лукнер Л., Шестаков В.М. Моделирование миграции подземных вод. — М.: Недра, 1986.
8. Мироненко В.А., Петров Н.С. Загрязнение подземных вод углеводородами. — Геоэкология, №1, 1995, с.3-27.
9. Мироненко В.А., Румынин В.Г., Учаев В.К. Охрана подземных вод в горнодобывающих районах (опыт

гидрогеологических исследований). — Л.: Недра, 1980, 320 с.

10. Мироненко В.А., Шестаков В.М. Теория и методы интерпретации опытно-фильтрационных работ. — М.: Недра, 1978, 326 с.

11. Орадовская А.Е. Миграция вещества и тепла в подземных водах. В кн.: Гидрогеологические исследования за рубежом. — М.: Недра, 1982, с.33-74.

12. Рошаль А.А. Методы определения миграционных параметров. Обзор ВИЭМС, сер. «Гидрогеология и инженерная геология», 1980, 62 с.

13. Фрид Ж. Загрязнение подземных вод. — М.: Недра, 1981, 304 с.

14. Шестаков В.М. Динамика подземных вод. — М.: изд. МГУ, 1979, 368 с.

15. Bear J. Dynamics of fluids in porous media. Amer. Els. N.Y., 1972, 764 p.

16. Carlyly S.G. Resent progress of the NEA Stripa Project on in situ experiments in granit disposal of radioactive waste. — Coupled processes associated with nuclear waste repositories. — Academic Press, Inc., 1987, p.155-168.

17. Carrera J. An overview of Uncertainties in Modelling Groundwater Solute Transport. — Journal of Contaminant Hydrology, v.13, №1/46 1993, p.23-48.

18. Hu Q., Brusseau M.L. The effect of solute size on diffusive-dispersive transport in porous media. — Journ. of Hydrology, 1994, v.158, p.305-307.

19. Intraval-Progress Report №4, 1989 (an International Project to Study Validation of Geosphere Transport Models). Gotab. — Stockholm, 1990, 80 p.

20. Jakobsen J.S., Carnahan C.L. Coupled transport processes in semipermeable media. Analytical solutions of the linearized governing equations. — Report of Lawrence Berkeley Laboratory, LBL — 24725, UC — 403, 1990, 22 p.

21. Jakobsen J.S., Carnahan C.L. Coupled transport processes in semipermeable media. II: Numeical method and results. — Report of Lawrence Berkeley Laboratory, LBL — 25619, UC — 403, 1990, 36 p.
22. Kipp Kenneth L., Jr. HST3D: A Computer code for Simulation of Heat and Solute Transport in Three-Dimensional Ground-Water Flow Systems. U.S. Geological Survey, Water-Resources Investigations Report 86-4095, Denver, Colorado, 1987.
23. Konikow L.F., Bredehoeft I.D. MOCDece: A computer model of solute transport in grouns water. Techniques of Water-Resources Investigation of the United State Geological Survey, 1989, 60 p.
24. Kreft A., Zuber A. On the physical meaning of the dispersion equation and its solution for different initial and boundary conditions. — Chem. Eng. Sci., 1978, v.33, p.1471-1480.
25. Kueper B.H., Frind E.O. Two-phase flow in heterogeneous porous media. — Water Res. Res., 1990, v.26, №6, p.1049-1070.
26. Kupper J.A., Schwartz F.W., Steffer P.M. A comparison of fracture mixing midels. — Journ. of Contaminant Hydrology, 1995, v.18, №1, p.33-58.
27. Lawrence A.R., Hilton P.J., Barron R.G., Thowas W.M. A method for determing volatile organic solvents in chalk pore water. — Journal of Contaminant Hydrology, 1990, v.6, №4, p.377-386.
28. Moreno L., Neretnicks I., Eriksen T. Analysis of some laboratory tracer runs in nature fissures. — Water Res. Res., 1985, v.21, №7, p.951-958.
29. Neuman S.P., Zhang Y.K. A quasi-linear theory of Non-Fickian and Fickian subsurface dispersion. — Water Res. Res., 1990, v.26, №5, p.887-902.

30. Ogata A. Theory of dispersion in granular medium. Fluid Movement in Earth Materials. Geological Survey Professional Paper 411-I, 1970, 34 p.
31. Persoff P., Pruess K. Two-phase flow visualisation and relative permeability measurements in natural rough-walled rock fractures. — Water Res. Res., 1995, v.31, №5, p.1175-1186.
32. Pruess K., Tsang Y.W. On two-phase relative permeability and capillary pressure of rough-walled rock fractures. — Water Res. Res., 1990, v.26, №9, p.1915-1926.
33. Rasmusen A. Analysis of hydrodynamic dispersion in discrete fracture network using the method of moments. — Water Res. Res., 1985, v.21, №11, p.1677-1683.
34. Rehfeldt K.R., Gelhar L.W. Stochastic analysis of dispersion in unsteady flow in heterogeneous aquifers. — Water Res. Res., 1992, v.28, №8, p.2085-2099.
35. Scientific Basis for Nuclear Waste Management. — In: Materials research society. Pittsburg, 1986, 853 p.
36. Tsang C.-F., Tsang Y.W., Hale F.V. Tracer transport in fractures: Analysis of field data based on variable-aperture channel model. — Water Res. Res., 1991, v.27, №12, p.3095-3106.
37. Tsang Y.W., Tsang C.-F. Flow channeling in a single fracture as a two-dimensional strongly heterogeneous permeable medium. — Water Res. Res., 1989, v.25, №9, p.2076-2080.

В сравнительно однородных породах, гомогенных (квазигомогенных) по фильтрационным свойствам, миграция описывается в рамках моделей *микродисперсии*: предполагается, что все механизмы процесса идут на одном микроуровне, отвечающем репрезентативному элементу гомогенной пористой или трещиноватой среды. Понятно, что для трещиноватых пород это предполагает:

1) пренебрежимо малое влияние пористости породной матрицы ,

2) рассмотрение объемов массива, удовлетворяющих условию сплошности среды,

3) синхронность заполнения веществом трещин разного порядка в пределах физической точки репрезентативного минимального объема среды.

В частности, необходимо понимать, что для крупноблочных трещиноватых пород или пород с каналовым механизмом миграции (разд. 1.1.1) последние два условия выполнимы лишь для больших пространственно-временных масштабов, до достижения которых такие породы должны рассматриваться как гетерогенная среда.

Как правило, массоперенос можно рассматривать на фоне стационарного (квазистационарного) фильтрационного поля, в котором зафиксированы траектории конвективного движения. Справедливость данной предпосылки требует дополнительного обоснования лишь для частных задач миграции в резко нестационарных фильтрационных потоках (см. разд. 2.1). Если поперечное — по отношению к

* Для теплопереноса матричная теплопроводность делает любую трещиноватую породу гетерогенной.

этим траекториям — рассеяние вещества не принимается во внимание, то решение миграционных задач часто производится в рамках одномерных построений, в простейшем варианте — в рамках предпосылки о поршневом вытеснении. Базисом для них служат траектории частиц, рассчитываемые из решений фильтрационных задач. При этом область, охватываемая миграционным потоком, может иметь произвольную конфигурацию и являться неоднородной. К рассмотрению пространственных (двух- и трехмерных) миграционных задач вынуждает, прежде всего, необходимость отражения в моделях поперечной дисперсии; соответствующие модели будут рассмотрены в следующем разделе данной главы.

2.1. Расчетная схема поршневого вытеснения

Для потоков с постоянной плотностью-вязкостью мигрирующих растворов основные характеристики — пространственное положение l_0 или временная координата t_0 — фронта поршневого вытеснения определяются кинематическим равенством

$$v_i dt = ndl, \quad (2.1)$$

интегрирование которого — аналитически или численно — проводится вдоль линий тока с заданным (найденным из решения фильтрационной задачи) распределением скорости фильтрации $v_i = v_i(l)$. Основываясь на уравнении (2.1), нетрудно получить соотношения для пространственной и временной координат фронта вытеснения при двух типовых формах одномерных фильтрационных потоков:

- при плоскопараллельной фильтрации (в направлении оси x) с постоянной скоростью v :

$$x_0(t) = vt/n, \quad t_0(x) = xn/v \quad (2.2)$$

- при квазистационарном осесимметричном движении со скоростью $v_r = Q/(2\pi m r)$ (r — радиальная координата, Q — дебит источника, расположенного в начале координат, m — мощность пласта):

$$r_o(t) = \sqrt{\frac{Q t}{\pi m n}}, \quad t_o(r) = \frac{\pi m n r^2}{Q}. \quad (2.3)$$

Последние равенства следуют из элементарного балансового уравнения

$$\pi r_o^2 m n = Q t_o. \quad (2.4)$$

Балансовый подход распространим и на случай анализа миграции в осесимметричном нестационарном фильтрационном потоке. Для этого достаточно дополнить уравнение (2.4) членом, учитывающим динамику емкостных запасов пласта:

$$\pi r_o^2 m n = Q t_o - \int_{r_c}^{r_o} 2\pi r \mu^* \Delta H(r, t) dr, \quad (2.5)$$

где $\Delta H(r, t)$ — повышение потенциметрической поверхности подземных вод, μ^* — упругая емкость пласта. Интегрирование уравнения дает трансцендентную формулу [10]

$$\pi r_o^2 m n = Q t_o [-u_o W(u_o) + e^{-u_o}], \quad (2.6)$$

где $W(u_o)$ — «функция скважины» [6], $u_o = r_o^2/(4a^* t_o)$ ($a^* = T/\mu^*$ — коэффициент пьезопроводности, T — проводимость пласта).

В соответствии с этим решением, безразмерное расстояние $\bar{r}_o = \pi r_o^2 m n / (Q t_o)$ может рассматриваться в качестве функции безразмерного коэффициента $\alpha = \pi a^* m n / Q$ — рис. 2.1. Кривая на рис. 2.1 хорошо аппроксимируется формулой:

$$\bar{r}_o = \frac{\pi r_o^2 m n}{Q t_o} = 1 - e^{-\sqrt{\alpha}}, \quad (2.7)$$

или

$$\pi r_o^2 m \frac{n}{1 - e^{-\sqrt{\alpha}}} = Q t_o, \quad (2.7, a)$$

т.е. упругость пласта влияет на массоперенос инертного компонента как фактор задержки. Отсюда легко получается критерий пренебрежимой значимости нестационарности фильтрационного процесса для задачи радиального массопереноса:

$$\frac{a^* m n}{Q} > 1 \div 2. \quad (2.8)$$

Невыполнение этого критерия означает, что изменение упругих запасов пласта заметно смещает выводы, получаемые исходя из упрощенных оценок (2.2), (2.3). Реально это может случиться при опытах в трещиноватых пластах (низкие значения n), когда их запасы формируются за счет гравитационной воды из перекрывающих пористых образований (т.е. система в целом характеризуется низкими значениями коэффициента a^*).

Подчеркнем, что все вышеприведенные рассуждения о роли нестационарности фильтрационного поля касались *продольного* конвективного переноса по доминирующим во времени направлениям траекторий этого поля. Между тем, даже сравнительно слабые флуктуации последнего могут вносить весьма существенный вклад в поперечное рассеяние вещества по направлениям, суббортгональным упомянутым траекториям: интенсивность временных отклонений поперечного

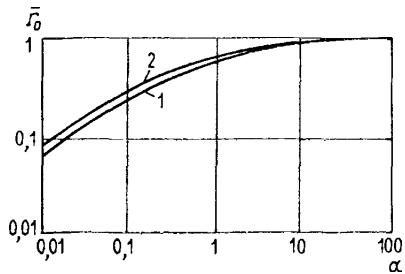


Рис. 2.1. График функции $\bar{r}_0 = f(\alpha)$ (решение 2.6 - кривая 1) и его аппроксимация зависимостью (2.7) - кривая 2

градиента фильтрации от нулевых его значений, отвечающих исходной стационарной картине, должна здесь сопоставляться по своим последствиям с ролью диффузионно-дисперсионного рассеяния (разд. 2.3.2).

2.2. Квазиодномерная расчетная схема продольной микродисперсии

Данной расчетной схеме, описывающей распределение концентрации вдоль линий тока (поперечным обменом вещества между которыми по-прежнему пренебрегаем), отвечает нестационарная модель (1.20) при

$$\nabla J = v_l \left[\frac{\partial c}{\partial l} - (\delta_L + D_M/v_l) \frac{\partial^2 c}{\partial l^2} \right]; \quad (2.9)$$

выражение (2.9) является обобщающим для одномерных операторов (1.27) и (1.28) при линейной зависимости между коэффициентом продольной гидродисперсии и скоростью фильтрации v_l ($l \equiv x$ или $l \equiv r$ — для плоскопараллельного или осесимметричного потока).

Для фундаментальной задачи — случая постоянной концентрации на входной границе потока, характеризующегося неизменной скоростью v в направлении оси x , и однородных начальных условий (разд. 1.2.3) — распределение концентрации описывается решением [9,17]:

$$\bar{c} = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc}(\xi) + e^{Pe} \operatorname{erfc}(\xi') \right], \quad (2.10)$$

где

* Для субвертикального градиента в грунтовых потоках источником таких флуктуаций могут служить колебания инфильтрационного питания.

$$\xi = \frac{x - vt/n}{\sqrt{4D_L t / n}}, \quad \xi' = \frac{x + vt/n}{\sqrt{4D_L t / n}}, \quad Pe = \frac{vx}{D_L}. \quad (2.10, a)$$

График решения (2.10) представлен на рис. 2.2.

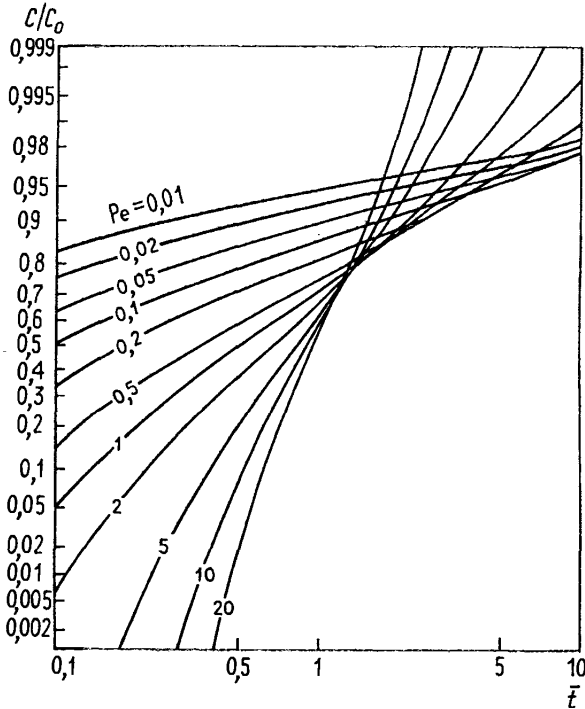


Рис. 2.2. График функции $\bar{c} = f(\xi)$ при различных значениях параметра $Pe = vx / D$ ($\xi = vt / (nx)$).

В решении (2.10) можно пренебречь вторым членом, так как вносимая этим погрешность не превышает 5 % при $Pe > 50$; в результате получим:

$$\bar{c} = 0,5 \operatorname{erfc}(\xi). \quad (2.11)$$

В частности, в соответствии с решением (2.11) текущая координата x_0 фронта переноса (изолиния с концентрацией $\bar{c} = 0,5$) определяется действительной скоростью фильтрации (u) — см. формулу (2.2).

В то же время, на основании формулы (2.11) получаем уравнение движения для любой изолинии с концентрацией $\bar{c}$ вблизи фронта переноса:

$$x_{\bar{c}} = \frac{v t}{n} \pm 2 |\xi| \sqrt{(D t)/n}, \quad (2.12)$$

где функция $\xi = \operatorname{erfc}(2\bar{c})$ (график зависимости $\bar{c}$ от ξ представлен на рис. 2.3); знак «минус» — для концентрации $\bar{c} > 0,5$, знак «плюс» — для концентрации $\bar{c} < 0,5$.

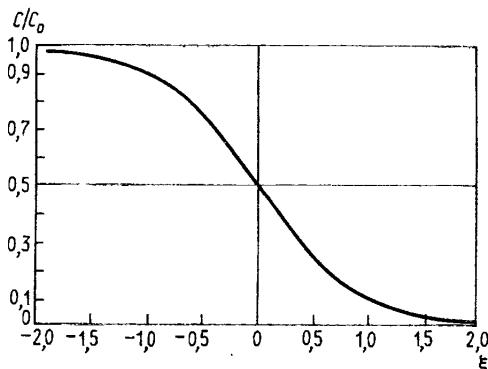


Рис. 2.3. График функции $\bar{c} = f(\xi)$ — решение (2.11)

Заметим, что решение (2.10) получено для граничного условия I рода на входной границе потока, пренебрегающего диффузионной (дисперсионной) компонентой массопереноса. Поэтому для описания миграции в относительно слабопроницаемых породах может потребоваться привлечение другого решения краевой задачи [5], полученного с учетом более строгого граничного условия III рода (1.44).

Далее остановимся на некоторых обобщенных решениях, которые могут использоваться и для описания конвективной дисперсии в потоках с переменной скоростью. При этом будем базироваться на квазиодномерном уравнении массопереноса без молекулярной диффузии вида:

$$n \frac{\partial c}{\partial t} + v_l \frac{\partial c}{\partial l} = \delta_L v_l \frac{\partial^2 c}{\partial l^2}, \quad (2.13)$$

где l и $v_l = f(l)$ — текущая длина переноса и скорость фильтрации вдоль фиксированной траектории.

Приближенное решение этого уравнения для однородных начальных и граничных условий имеет форму (2.11), где для аргумента ξ существуют два основных представления:

$$\xi = \frac{l - l_0}{\sqrt{2} \sigma_l^2} \quad \text{или} \quad \xi = \frac{t_0 - t}{\sqrt{2} \sigma_t^2}; \quad (2.14)$$

здесь l_0 и t_0 — пространственная и временная координаты фронта поршневого вытеснения; σ_l^2 и σ_t^2 — показатели статистической дисперсии концентрационного распределения, коррелирующие с размером переходной зоны:

$$\sigma_l^2 = 2 \delta_L u_t^2 \int_0^{l_0} \frac{dl}{u_t^2}, \quad \sigma_t^2 = 2 \delta_L \int_0^{t_0} \frac{dt}{u_t}, \quad (2.14, a)$$

($u_t = vt/n$ — скорость меченной частицы на фронте вытеснения в момент t , $u_l = v_l/n$ — действительная скорость движения частицы, имеющей текущую координату l ; молекулярной диффузией в выражениях для σ_l^2 , σ_t^2 пренебрегаем.

Отсюда приходим к зависимостям для двух основных форм одномерных миграционных потоков:

— для плоскопараллельного (с постоянной скоростью фильтрации v)

$$\sigma_l^2 = \frac{2x_0^2}{Pe_0}, \quad \sigma_t^2 = \frac{2t_0^2}{Pe}; \quad (2.14, б)$$

$$- \text{ для осесимметричного } \left(v_r = \frac{Q}{2\pi m r} \right) \\ \sigma_l^2 = \frac{2r_o^2}{3Pe_o}, \quad \sigma_t^2 = \frac{8t_o^2}{3Pe} \quad (2.14, \text{в})$$

($Pe_o = l_o/\sigma_L$, $Pe = l/\delta_L$, $l \equiv x, r$). Интересно отметить, что представление σ_l^2 в форме (2.14, в) сводит решение плоскорадиальной задачи (1.20)-(1.28) к приближенному решению, полученному ранее операционным методом Б.С.Шержуковым и Г.М.Коммунаром с соавторами, а представление σ_t^2 — к решению П.Раймонди с соавторами (см. также разд. 14.2.1).

Анализу уравнения (2.13) была также посвящена работа [20], авторы которой отталкивались от следующей его трансформации:

$$\frac{\partial c}{\partial \omega} = \delta_L \frac{\partial^2 c}{\partial \eta^2} \quad (2.15)$$

где

$$\omega(t) = n^2 \int_0^{\bar{l}} \frac{dl}{v_l^2}, \quad \eta = \tau(l) - t \quad (2.15, \text{а})$$

$$\tau(l) = n \int_0^{\bar{l}} \frac{dl}{v_l}; \quad (2.15, \text{б})$$

последнее выражение определяет время миграции фронта до точки l ; $\bar{l}$ — расчетное положение фронта, определенное из условия $\tau(\bar{l}) = t$.

Решение уравнения (2.13) на неограниченном отрезке дается функцией (2.11), аргумент которой определяется следующим образом:

$$\xi = \frac{\eta}{\sqrt{4\delta_L \omega(t)}}. \quad (2.16)$$

Отсюда также могут быть получены приближенные выражения для описания концентрационных фронтов в случае известной структуры фильтрационного потока.

Для характеристики процесса в целом следует оценить линейный размер зоны Δl_n гидродинамического смешения растворов или период Δt_n ее временного прослеживания в фиксированной точке пласта. Для этого проще всего воспользоваться следующими приближенными формулами:

$$\Delta l_n \approx \sqrt{10} \sigma_l^2, \quad \Delta t_n \approx \sqrt{10} \sigma_t^2. \quad (2.17)$$

Отсюда по величине отношений $\varepsilon_l = \Delta l_n / l_0$ или $\varepsilon_t = \Delta t_n / t_0$ оценивается значимость продольной гидродисперсии при пространственном и временном прослеживании концентрационного распределения (при условии $v_1 \delta_L > D_M$).

Найдем условия, при которых размеры переходной зоны пренебрежимо малы по сравнению с общим продвижением фронта переноса, или, иначе говоря, когда дисперсией можно пренебречь по сравнению с конвективным переносом. Полагая $\Delta l_n / l_0 < 0,1-0,15$, получим, что этим условиям отвечает безразмерный параметр

$$Pe_o = \frac{v l_0}{D_L} > 1000. \quad (2.18)$$

Наоборот, при малых значениях Pe_o , ориентировочно при

$$Pe_o = \frac{v l_0}{D_L} < 1-5, \quad (2.19)$$

конвективный перенос играет подчиненную роль по сравнению с диффузией. Критериальный параметр Pe_o именуется числом Пекле; в нем под l_0 понимается характерная длина переноса. Обратим внимание, что представление этого критерия в виде vL/D_L (где L — конечная длина переноса в рамках конкретной задачи) допустимо лишь для достаточно больших моментов времени, т.е. после того, как на границе $x = L$ зафик-

сирована относительная концентрация $\bar{c} = 0,5$ (для условий рассмотренного выше фундаментального решения).

Теперь можно оценить масштабы фильтрационной микродисперсии в различных условиях.

1. В малопротяженных областях, характерных для лабораторных и полевых индикаторных опытов с песчаными грунтами, ширина переходной зоны обычно соизмерима с размерами самой области фильтрации. В прогнозных же оценках для однородных песчаных пластов величина Δ_n пренебрежимо мала по сравнению с областью фильтрации, а положение фронта вытеснения вполне определяется конвективной составляющей. Поэтому для таких пластов в прогнозных оценках целесообразно переходить к более простой расчетной схеме поршневого вытеснения, и, следовательно, параметры *продольной* дисперсии для прогнозов не столь важны. Исключение составляют случаи кратковременного поступления в пласт ограниченных объемов высокотоксичного загрязнения.

2. Наоборот, для трещиноватых пород (здесь пока имеются в виду трещиноватые породы с пренебрежимо малой пористостью блоков) характерно значительное рассеяние вещества в результате гидродисперсии, а размеры переходной зоны как в полевых опытах, так и в прогнозных оценках соизмеримы с масштабом самой области переноса. Следовательно, схема поршневого вытеснения в этом случае будет описывать процесс неполно и для надежного прогноза необходим, в частности, параметр дисперсивности δ .

3. При малых скоростях фильтрации, свойственных слабопроницаемым отложениям, массоперенос протекает главным образом в диффузионной или конвективно-диффузионной форме. Это делает ненужным определение параметра δ_L , но требует обязательной оценки коэффициента молекулярной диффузии D_M , которым и

определяются размеры переходных зон, как правило, весьма значимых в подобных породах: нередко они занимают большую часть области миграции.

В рамках микродисперсионной модели могут рассматриваться и процессы теплопереноса в гомогенных пористых породах: предпосылка о весьма быстром выравнивании температуры между фильтрующей жидкостью и минеральным скелетом (см. разд. 1.2.1) приводит к общему уравнению теплопереноса (1.26), которое для одномерного случая может быть записано в виде, подобном уравнению гидродисперсии:

$$n_T \frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial x} - D^T \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0, \quad (2.20)$$

где n_T — коэффициент тепловой емкости пласта, равный C_H^0/C_f^0 ; D^T — коэффициент термодисперсии (аналог коэффициента механической дисперсии), равный $\lambda_f/C_f^0 = a_T n_T$; a_T — коэффициент температуропроводности пласта, равный λ_H/C_H^0 . Как и для фильтрационной дисперсии, принципиально доказана зависимость коэффициента термодисперсии от скорости фильтрации, которая, однако, ощутимо проявляется лишь при достаточно больших (порядка метров в сутки) величинах последней.

Таким образом, между процессами массо- и теплопереноса в подземных водах существуют формальная и физическая аналогия. Вместе с тем она не распространяется на абсолютные величины и характерные соотношения отдельных физических параметров; в частности, коэффициент n_T для пористых нецементированных пород меняется в узких (0,65–0,8) пределах, а значения коэффициентов D^T и a_T обычно укладываются в диапазон 0,02–0,1 м²/сут. Это делает эффекты теплового рассеяния весьма значимыми и в тех случаях, когда гидродисперсией массового потока можно пренебречь. Целенаправленное использование

резких различий в интенсивности обменных процессов при массо- и теплопереносе позволяет в ряде случаев расширить возможности опытного изучения водоносных систем.

В целом, уже на примере рассмотренной расчетной схемы видно, что понимание значимости отдельных составляющих массо- и теплопереноса является важнейшим аспектом схематизации природных условий, направленной на упрощение математической модели процесса и определяющей круг необходимых расчетных параметров. Зачастую миграционные параметры, хорошо отражающие протекание процессов в одних условиях, второстепенны для других; более того, миграционные параметры, полученные по результатам опытных работ, могут отличаться от параметров, удовлетворительно описывающих массоперенос в региональных масштабах. Это связано с тем, что математическая модель переноса определяется не только комплексом водоносных пород и условиями на границах водоносных пластов, но и масштабом рассматриваемой области.

В частности, даже гомогенные (применительно к макроскопическому описанию) породы проявляют гетерогенные свойства на микроуровне — в масштабе, соизмеримом с размерами пор (см. разд. 1.1.1).

Гетерогенность здесь обусловлена наличием обособленных в фильтрационном отношении зон — активных (проточных) и пассивных (застойных), причем включение последних в общий процесс переноса зависит от массообмена на контакте областей с различной концентрацией под действием молекулярной диффузии и поперечной дисперсии. Поэтому изменение объемного содержания вещества в системе контролируется уже не только активной пористостью, как это предполагается в традиционной схеме микродисперсии, но зависит также от степени вовлечения пассивных зон в процесс массопереноса. В пределе эффективная емкость близка к суммарной пористости. Критерием наступления такого асимп-

тотического режима служит условие $\alpha' L / m \bar{n}^2 > 50$ (где $\bar{n}$ — относительное содержание пассивных зон; α' — значение параметра массообмена).

Анализ характерных числовых значений параметров [5,8] показывает, что в экспериментальных условиях последнее требование часто может оказаться невыполненным, и тогда вполне ощутимо проявляется неинвариантность параметров расчетной пористости и дисперсии: их значения, определенные в рамках схемы микродисперсии, оказываются предопределенными продолжительностью и масштабом опыта. Между тем, в долговременных прогнозах должны использоваться параметры, отражающие емкость пористых пород с учетом застойных зон — в противовес «активной» пористости и соответствующим ей эффективным сорбционным параметрам (разд. 12.1). В то же время напрашивается вывод о том, что опыты при форсированных режимах отнюдь не способствуют повышению точности определения такого рода параметров и более представительные результаты получаются в рамках статических балансовых оценок.

Из общих соображений можно предположить, что микрогетерогенность трещинного пространства, сама по себе, не вызывает столь ощутимых расхождений между опытными результатами и расчетными миграционными параметрами, используемыми в прогнозных оценках. Несоответствие расчетной схемы микродисперсии реальной ситуации здесь чаще всего может быть вызвано несоблюдением условия континуума, когда опытным воздействием охватывается незначительное число породных блоков.

2.3. Пространственные модели миграции в гомогенных водоносных породах

В предыдущем разделе мы показали, что сложная пространственная форма фильтрационного потока вовсе не обязательно диктует практическую необходимость анализа миграционных процессов в двух- или трехмерной постановке. Такая необходимость возникает, прежде всего, в двух важных типовых ситуациях:

1) при существенном проявлении диффузионно-дисперсионного рассеяния вещества вкрест основного направления конвективного переноса и

2) при заметном влиянии плотностной конвекции, исключающей возможность построения фильтрационного поля независимо от миграционной картины (существенно нелинейный процесс).

2.3.1. Поперечная микродисперсия в одномерном фильтрационном потоке

Простейшая задача о поперечной микродисперсии отвечает условиям поступления вещества из внешнего источника в естественный, примерно одномерный, фильтрационный поток: считается, что последний не претерпевает при этом заметного деформирования под действием источника из-за его относительно слабой гидродинамической активности.

В математическом отношении, базой для построения соответствующих расчетных зависимостей является дифференциальное уравнение (1.20); в частности, для двумерных миграционных потоков оператор ∇^2 определяется по формулам (1.29) или (1.30) — для плановых и профильных потоков, соответственно. Основные решения сформулированной задачи [2,7,13,18,19] подразделяются в зависимости от геометрической формы источника вещества и характера входного кон-

центрационного сигнала. Из них следует, что максимальное развитие процессы поперечной дисперсии получают при локальном поступлении вещества в водоносный горизонт, когда размер концентрационного источника много меньше поперечных размеров потенциальной области переноса, а гидродинамическая активность источника невелика.

Для анализа роли отдельных составляющих массопереноса при заметном развитии в пласте поперечной гидродисперсии можно обратиться к расчетным зависимостям, полученным для постоянно действующего точечного источника вещества с *пренебрежимой гидродинамической активностью* в плоско-параллельном фильтрационном потоке.

Для *плановых двумерных* миграционных потоков имеем решение [15]:

$$c = \frac{P_m \exp(x/B)}{4\pi \sqrt{D_x D_{T_y}}} W(u, R/B), \quad (2.21)$$

где $B = 2D_x/v$; $u = \frac{R^2 n}{4D_x t}$; $R = \sqrt{x^2 + \frac{D_x}{D_{T_y}} y^2}$ (ось x

направлена от источника вниз по потоку, имеющему постоянную скорость v , ось y ортогональна направлению вектора скорости фильтрации), $P_m = q_0 c_0$, q_0 — удельный расход инжектируемого раствора (объемный расход на единицу мощности потока), $m^2/\text{сут}$; c_0 — концентрация инжектируемого вещества, $г/м^3$; $W(u, R/B)$ — «функция источника», которая для значений $R/B > 1 \div 10$, представляющих основной практический интерес, имеет вид:

$$W(u, R/B) \approx \sqrt{\frac{\pi B}{2R}} \exp\left(-\frac{R}{B}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{2u - R/B}{2\sqrt{u}}\right). \quad (2.21, a)$$

Соответствующее решение для импульсного сигнала имеет вид:

$$c = \frac{M'}{4\pi t \sqrt{D_x D_{T_y}}} \exp(x/B) \exp \left[- \left(u + \frac{R^2}{4u B^2} \right) \right], \quad (2.22)$$

где M' — масса инъецированного вещества на единицу мощности потока, г/м.

Трехмерная микродисперсия от точечного источника описывается уравнением [15]:

$$c = \frac{P_M}{8\pi R \sqrt{D_{T_y} D_{T_z}}} \left[\exp \left(\frac{x-R}{B} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{2u-R/B}{2\sqrt{u}} \right) + \right. \\ \left. + \exp \left(\frac{x+R}{B} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{2u+R/B}{2\sqrt{u}} \right) \right], \quad (2.23)$$

где $R = \sqrt{x^2 + \frac{D_x}{D_{T_y}} y^2 + \frac{D_x}{D_{T_z}} z^2}$, $P_M = Q_0 c_0$ (Q_0 — объемный расход инъецируемого раствора, c_0 — его концентрация); при $\frac{v^2 t}{D_x n} > 50 \div 80$ вторым слагаемым здесь можно пренебречь.

При том же условии для плоского источника конечных размеров $a \times b$, располагающегося ортогонально потоку [19]:

$$c = \frac{abV c_0 x}{8\pi R^2 \sqrt{D_{T_y} D_{T_z}}} \exp \left(\frac{x-R}{B} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{2u-R/B}{2\sqrt{u}} \right). \quad (2.24)$$

Нетрудно увидеть, что при больших x формула (2.24) для концентрационного источника конечных размеров переходит в решение для точечного источника (2.23), —

если учесть, что $abv = Q_0$, а $R \rightarrow x$ (для точек, отстоящих не слишком далеко от оси x).

Все приведенные решения для двухмерной и трехмерной микродисперсии имеют стационарные асимптотики для неограниченно больших значений времени.

Например, при $t \rightarrow \infty$ решение (2.21) примет вид:

$$c = \frac{P_m}{2\pi \sqrt{D_x} D_{T_y}} \exp(x/B) K_0(R/B). \quad (2.25)$$

или при $R/B > 1$

$$c = \frac{P_m}{2\sqrt{\pi} D_{T_y} R v} \exp\left(\frac{x-R}{B}\right). \quad (2.25, a)$$

Так как при существенном развитии поперечного рассеяния вещества ролью продольной гидродисперсии можно пренебречь, что имеет смысл развитие этого решения на случай $D_x \rightarrow 0$:

$$c = \frac{P_m}{2\sqrt{\pi} D_{T_y} x v} \exp\left(-\frac{y^2}{4D_{T_y} x/v}\right). \quad (2.25, б)$$

В целом, решения для точечного источника дают сравнительно приемлемые результаты лишь на достаточно больших удалениях от него, где структура фильтрационного потока вновь близка к линейной.

Определенный практический интерес представляет и решение стационарной задачи двумерного переноса для линейного источника, расположенного в плане ортогонально направлению потока:

$$c = \frac{c_0}{2} \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{y-b_0}{2\sqrt{D_{T_y} x/v}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{y+b_0}{2\sqrt{D_{T_y} x/v}}\right) \right], \quad (2.26)$$

где b_0 — половина длины источника (начало координатных осей $x=0$, $y=0$ совпадает с его геометрическим центром).

Решение (2.26) имеет асимптотическое представление:

$$c = \frac{c_0 b_0}{\sqrt{\pi D_{Ty} x / v}} \exp \left(-\frac{y^2}{4 D_{Ty} x / v} \right), \quad (2.26, a)$$

подобное расчетной зависимости (2.25, б) для точечного источника интенсивностью $P_m = 2b_0 C_0 v$. Условие применимости асимптотики (2.26, а) имеет вид:

$$\frac{b_0^2 v}{x D_{Ty}} < 1 \div 2, \text{ или } b_0 < \sqrt{\delta_{Ty} x}. \quad (2.26, б)$$

Имеются аналитические решения и для источников других типов, причем все они дают довольно близкие результаты, не зависящие (при одинаковом значении P_m) от формы источника уже на сравнительно небольших удалениях от него.

К аналогичным предельным выражениям (при $t \rightarrow \infty$), не зависящим от времени, сводятся и решения для трехмерного массопереноса.

В частности, из решения (2.23) вытекает формула:

$$c = \frac{P_m}{4\pi R \sqrt{D_{Ty} D_{Tz}}} \exp \left(\frac{x - R}{B} \right). \quad (2.27)$$

При $D_x \rightarrow 0$ она преобразуется к виду:

$$c = \frac{P_m}{4\pi x \sqrt{D_T D_{Tz}}} \exp \left(-\frac{y^2}{4 D_{Ty} x / v} - \frac{z^2}{4 D_{Tz} x / v} \right). \quad (2.27, a)$$

Если положить $D_{Ty} = D_{Tz} = D'$, то получаем

$$c = \frac{P_m}{4\pi x D'} \exp \left(-\frac{y^2 + z^2}{4 D' x / v} \right). \quad (2.27, б)$$

Анализируя характер асимптотического распределения концентрации для центральных осей ореолов ($y = 0, z = 0$), замечаем, что для двумерного рассеяния $c \sim \frac{1}{\sqrt{x}}$, а для трехмерного — $c \sim \frac{1}{x}$, т.е. с увеличением мерности миграционного потока пространственный градиент концентрации переносимых компонентов возрастает; иными словами, при трехмерном рассеянии должна наблюдаться максимальная степень локализации ореола вблизи источника [2].

Таким образом, при длительной миграции, за счет поперечной дисперсии возможно образование квазистационарных объемных ореолов рассеяния, концентрация в пределах которых остается практически неизменной в каждой точке ореола; при этом временные изменения концентрации имеют место лишь в краевых зонах ореола, куда вещество проходит «транзитом» через квазистационарную зону. Время наступления квазистационарного режима переноса определяется сопоставлением приведенных выше решений в общем и асимптотическом вариантах.

Так, для точечного источника в условиях двумерного рассеяния

$$\varepsilon \approx \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{2u - R/B}{2\sqrt{u}} \right), \quad (2.28)$$

где ε — отклонение текущей концентрации c от предельного значения c_∞ , равное $1 - c/c_\infty$. В случае точечного источника оценку времени наступления квазистационарного режима в некоторой фиксированной точке (когда концентрация в ней отличается от предельного значения не более чем на 1 %) можно провести по графику (рис. 2.4). Как видно, быстрее всего стабилизируются значения концентрации вблизи источника вещества, причем время наступления стационарного режима сокращается с увеличением мерности массового потока.

В рассмотренном предельном варианте, когда на фоне интенсивного развития поперечного рассеяния собственно продольной дисперсией можно вообще пренебречь, приведенные выше решения дают неизменные во времени значения концентрации для всей области, оставшейся за фронтом поршневого вытеснения. Поэтому они могут быть представлены в эквивалентной форме, например,

$$c = c[y, t_0]_{t = x n / v}, \quad (2.29)$$

допускающей нахождение концентрации на фронте поршневого вытеснения в любой расчетный момент времени $t = t_0$.

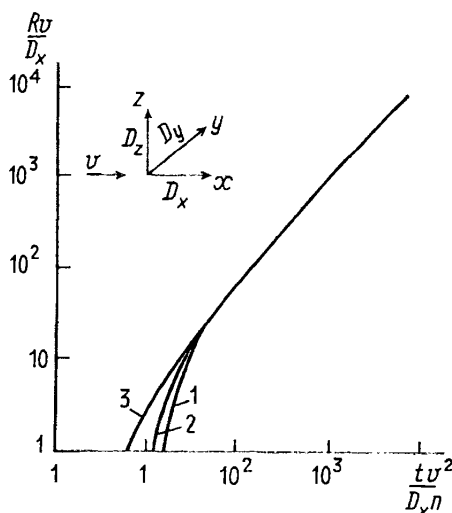


Рис. 2.4. График к оценке времени, необходимого для достижения квазистационарного режима массопереноса:

1-3 - схемы рассеяния (1 - одномерная, 2 - двумерная, 3 - трехмерная)

Воспользуемся этой особенностью решений для того, чтобы оконтурить круг условий, в которых расчетные модели не позволяют

пренебречь процессами поперечной дисперсии. Так, из решения для линейного источника (2.26) следует, что на оси ореола ($y = 0$)

$$\bar{c} = 1 - \operatorname{erfc} \frac{b_o}{2 \sqrt{D_{Ty}} x/v}. \quad (2.30)$$

Считая поперечные дисперсионные эффекты значимыми, если они приводят к падению концентрации на фронте более, чем на 10 %, получаем критерий

$$x > \frac{b_o^2 v}{5,3 D_{Ty}} \approx \frac{0,2 b_o^2}{\delta_{Ty}}. \quad (2.31)$$

Например, в трещиноватых породах при размере источника загрязнения порядка 10–20 м роль поперечной дисперсии будет ощутима уже на расстоянии от него порядка десятков—первых сотен метров. Для пористых пород соответствующие оценки заметно мягче, однако для источников малых размеров или для непродолжительного поступления из них вещества вывод о роли поперечной дисперсии сохраняет свой смысл. Напомним также, что в трехмерном варианте сделанные оценки станут более жесткими.

До сих пор нами рассматривались неограниченные в плане и в разрезе пласты. Влияние кровли и подошвы пласта легко учитывается методом суперпозиции [18].

Так, для точечного источника, расположенного в средней плоскости пласта (рис. 2.5, а), получаем общее решение в форме:

$$c' = c(x, y, z, t) + \sum_{k=1}^{\infty} [c(x, y, z - km, t) + c(x, y, z + km, t)], \quad (2.32)$$

* Предполагается, что коэффициент диффузии, характеризующий миграцию через породы кровли и подошвы пласта, пренебрежимо мал в сравнении с показателем поперечной (профильной) гидродисперсии в пласте; процессами перетекания через разделяющие толщи также пренебрегаем.

где $c(x, y, z, t)$ — функция концентрации, задаваемая формулой (2.23). Отсюда, например, приходим к расчетной зависимости, описывающей соответствующее стационарное поле:

$$c' = \frac{P_M}{4\pi \sqrt{D_{T_y} D_{T_z}}} \left\{ \frac{1}{R} \exp \left(\frac{x-R}{B} \right) + \right. \quad (2.32, a) \\ \left. + \sum_1^{\infty} \left[\frac{1}{R'_k} \exp \left(\frac{x-R'_k}{B} \right) + \frac{1}{R''_k} \exp \left(\frac{x-R''_k}{B} \right) \right] \right\},$$

где

$$R'_k = \sqrt{x^2 + \frac{D_x}{D_{T_y}} y^2 + \frac{D_x}{D_{T_z}} (z - km)^2}, \\ R''_k = \sqrt{x^2 + \frac{D_x}{D_{T_y}} y^2 + \frac{D_x}{D_{T_z}} (z + km)^2}.$$

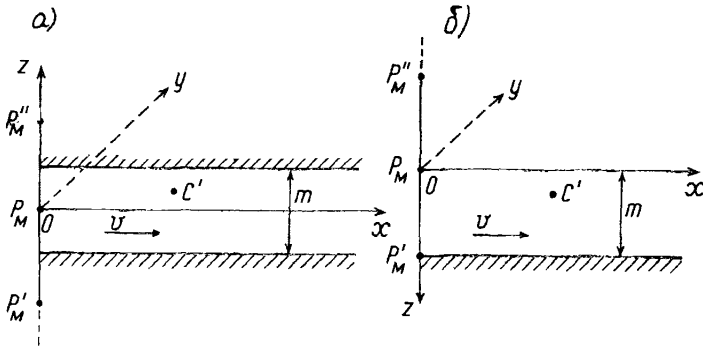


Рис. 2.5. К выводу расчетных зависимостей миграции от точечного источника в ограниченных (по мощности) пластах:

а - пласт с непроницаемой кровлей и подошвой, б - безнапорный пласт

На осевой линии ореола x при $D_x = 0$:

$$c' = \frac{P_M}{4\pi x \sqrt{D_{T_y} D_{T_z}}} \left[1 + 2 \sum_1^{\infty} e^{-(\xi_k)^2} \right], \quad (2.32, б)$$

где $\xi = \sqrt{\frac{m^2 v}{4D_{T_z} x}}$. При $\xi > 2$, или

$$\frac{x D_{T_z}}{m^2 v} < 0,05 \quad (2.33)$$

вторым членом в решении (2.32, б) можно пренебречь с погрешностью не более 4 %, и тогда результат совпадает с соответствующим решением для неограниченного пласта (см. формулу (2.27, а) при $z = y = 0$). Таким образом, выполнение критерия (2.33) позволяет не учитывать влияние кровли и подошвы пласта.

Другое приближение формулы (2.32, б) может быть получено при малых значениях ξ . Для этого рассмотрим представление суммы ряда в (2.32, б) в форме:

$$\sum_1^{\infty} e^{-(\xi k)^2} = -\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{\pi}}{\xi} \left(\frac{1}{2} + \sum_1^{\infty} e^{-(\pi k/\xi)^2} \right). \quad (2.34)$$

При $\xi < 1,5$, или

$$\frac{x D_{T_z}}{m^2 v} > 0,1 \quad (2.35)$$

с тем же порядком погрешности в 4-5 %, формула (2.32, б) переходит в выражение:

$$c' = \frac{P_M/m}{2 \sqrt{\pi x D_{T_y} v}}, \quad (2.36)$$

совпадающее с решением задачи двумерного рассеяния (2.25, б) в плоскости x - y , где мощность источника $P_M = Q_0 c_0 / m$. Иными словами, при удовлетворении критерия (2.35) объемную задачу миграции допустимо уже рассматривать в плоской (в данном случае — плановой) постановке, тем самым понижая мерность исходной модели.

Заметим, что порядок представленных здесь оценок (2.33) и (2.35) сохраняется и для других расчетных точек, не слишком удаленных от центральной оси ореола. Эти оценки справедливы и для источника на поверхности безнапорного потока грунтовых вод (рис. 2.5, б), если заменить m на $2m$.

Осталось заметить, что влияние плановой границы разгрузки, как и в профильных задачах, может быть учтено суперпозицией соответствующих решений для неограниченных пластов [4].

Наиболее чувствительной к характеру граничных условий является расчетная область, включающая периферийные зоны концентрационного ореола (максимально удаленные от его центральной оси), ибо здесь время достижения стационарного распределения вещества сравнительно велико, и, следовательно, вынос вещества из пласта в большей степени зависит от задаваемых на его границе условий. Наоборот, для центральной оси ореола, где быстрее всего наступает квазистационарный режим за фронтом вытеснения, различия в характере граничных условий сказываются в меньшей степени.

В целом, чувствительность процесса, описываемого моделями объемного рассеяния, к изменению граничных условий заметно выше, чем при одномерном переносе.

2.3.2. Особенности пространственного рассеяния в условиях неоднородного фильтрационного поля

Все приведенные выше решения и оценки были получены для идеализированной картины одномерного фильтрационного поля и могут претерпеть кардинальные изменения при нарушении плоскопараллельного характера течения жидкости. В частности, такого рода деформации могут быть вызваны гидродинамическим влиянием самого концентрационного источника, наличием вертикальной составляющей скорости фильтрации в профиле безнапорного потока, а также плотностной конвекцией.

Для оценки влияния первого фактора, воспользуемся решением [16] соответствующего уравнения плановой миграции для точечного

источника, удельная интенсивность истечения раствора из которого $q_0 = Q/m$. При поршневом движении вещества по линиям тока, обмен веществом между которыми происходит за счет поперечной дисперсии (показатель ее интенсивности $-D_T$), это решение имеет форму:

$$c = \frac{c_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{\Psi - \Psi_0}{2 \sqrt{D_T} \varphi} \right) \operatorname{erfc} - \left(\frac{\Psi + \Psi_0}{2 \sqrt{D_T} \varphi} \right) \right], \quad (2.37)$$

где $\Psi_0 = q_0/2$, а значения переменных Ψ (функция тока) и φ (потенциальная функция) связаны с текущими прямоугольными координатами x и y соотношениями:

$$\Psi = \frac{q_0}{2\pi} \arccos \left(\frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right) + v y, \quad (2.37, a)$$

$$\varphi = \frac{q_0}{2\pi} \left[1 + \ln \left(2\pi v \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{q} \right) \right] + v x.$$

Решение (2.37) дает результаты, идентичные с оценками по формуле (2.26) для линейного источника, «пассивного» в гидродинамическом отношении, — если сделать замену:

$$b_0 \rightarrow \frac{q_0}{2v}, \quad x \rightarrow x + \frac{q_0}{2\pi v} \left(1 + \ln \frac{2\pi v \sqrt{x^2 + y^2}}{q_0} \right), \quad (2.38)$$

$$y \rightarrow y + \frac{q_0}{2\pi v} \arccos \left(\frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right).$$

Очевидно, первая трансформация отражает суммарное расширение лент тока вблизи источника за счет его прямого влияния на режим фильтрационного массопереноса. Во втором и третьем преобразованиях координат учитывается удлинение среднего пути переноса за счет деформации сетки движения вблизи гидродинамически активного источника. Если ограничиться в дальнейшем оценками для точек, лежащих в области $|y| < (0,2+0,3)x$, то достаточно использовать лишь второе преобразование (при $\sqrt{x^2 + y^2} \approx x$).

Отсюда можно получить критерий, оконтуривающий область возможного использования ранее приведенных решений для пассивного точечного источника при описании стационарных миграционных потоков от реальных источников с заметной гидродинамической активностью. Например, задаваясь погрешностью в определении концентрации не более 10-15 %, получаем следующее критериальное условие:

$$\frac{q_0^2}{D_T v_x} < 4. \quad (2.39)$$

Последним неравенством можно пользоваться, если $x > (2 \div 3) (2b_0 + q_0/v)$, т.е. когда расстояние до расчетных точек x в несколько раз превышает величину поперечного конвективного разноса вещества вблизи источника.

Перейдем к аналогичным оценкам для профильной структуры ореола рассеяния. Воспользуемся следующим приближением [18]: если компоненты v_x и v_y скорости фильтрации слабо меняются в направлениях соответствующих пространственных осей, так что соотношения между ними остаются постоянными во всей области фильтрации, то роль вертикальной конвекции может быть учтена введением подвижной координаты* $z' = z - z_0$, где $z_0 = \frac{v_z}{v_x} x$. Тогда из решения (2.27) при $D_x = 0$ получаем:

$$c = \frac{P_M}{4\pi x \sqrt{D_{T_y} D_{T_z}}} \exp \left[-\frac{y^2}{4D_{T_y} x/v_x} - \frac{(z - z_0)^2}{4D_{T_z} x/v_x} \right]. \quad (2.40)$$

Основываясь на решении (2.40), можно, в частности, оценить влияние вертикальной компоненты скорости фильтрации v_z в профильных безнапорных потоках, где вблизи уровня грунтовых вод

* Считается, кроме того, что главные оси тензора дисперсии совпадают с ox и oz .

$$v_z = k_z I^2 \quad (2.41)$$

(I — средний гидравлический градиент потока). Рассчитаем, на каком расстоянии от источника, расположенного вблизи поверхности грунтовых вод, произойдет уменьшение концентрации — за счет конвективного погружения ореола вглубь пласта, — более, чем на 10-20 % (по сравнению со значениями, рассчитанными при $v_z = 0$). Полагая $y = 0$ и $z = 0$, из (2.40) получаем, что этому условию удовлетворяет критерий:

$$\frac{z_o^2}{4D_{T_z} x/v_x} = \frac{v_z^2 x}{4D_{T_z} v_x} > 0,12-0,25, \quad (2.42)$$

или

$$x > (0,5-1,0) \left(\frac{k_x}{k_z I} \right)^2 \delta_{T_z}. \quad (2.42,a)$$

Отсюда видно, что в трещиноватых средах с высокими показателями рассеяния вещества (скажем, при $\delta_{T_z} > 0,1$ м) вкладом вертикальной конвекции в формирование объемных концентрационных ореолов можно пренебречь — в сравнении с поперечной дисперсией. И, наоборот, в средах, отличающихся низкими показателями дисперсии ($\delta_{T_z} < 0,01$ м), обычно именно вертикальная конвекция определяет профильное рассеяние вещества в безнапорных фильтрационных потоках.

Важным в практическом смысле вариантом такого профильного рассеяния является случай поверхностного площадного (или атмосферного) источника, из которого вещество поступает в пласт с инфильтрационными водами. Соответствующий класс задач будет рассмотрен специально в разд. 10.2.2. Пока же отметим возможность очень сильного конвективного (в меньшей степени — дисперсионного) рассеяния вещества в подобных услови-

ях, особенно при преобладании инфильтрационного расхода по площади источника над расходом транзитного потока. В следующем разделе мы еще вернемся к этому вопросу применительно к макроеднородным пластам.

Гораздо сильнее, в целом, проявляется профильная конвективная составляющая миграционного потока, введенная процессами плотностной дифференциации растворов в пласте, когда в нем происходит совместное движение жидкостей, заметно различающихся содержанием химических компонентов.

2.3.3. Анализ и математическое описание массопереноса в условиях плотностной конвекции

В первом приближении, этот процесс может рассматриваться в рамках моделей поршневого вытеснения. Так, известно, что при взаимном субгоризонтальном вытеснении жидкостей, имеющих различную плотность (рис. 2.6), фронт принимает наклонное положение, характеризующее углом α ($\operatorname{tg} \alpha = \Delta x_p / m$, где Δx_p — длина проекции контакта на горизонтальную плоскость). При этом средняя точка контакта движется со скоростью, примерно отвечающей действительной скорости фильтрации, а ее пространственное положение может быть найдено по формуле (2.2) — для плоскопараллельного движения.

Основываясь на точном решении соответствующей миграционной задачи [14], можно показать [1], что в общем случае функция $\alpha = \alpha(t)$ довольно сложным образом зависит от времени и характеристик среды. Вместе с тем, она имеет два важных асимптотических представления:

1) для малых моментов времени (начальная стадия внедрения раствора в пласт) —

$$\operatorname{tg} \alpha \approx \frac{3}{2} \kappa k_x \Delta \bar{\rho} t / m n, \quad (2.43)$$

что указывает на сильную зависимость процесса от фильтрационной анизотропии среды ($\kappa = \sqrt{k_z/k_x}$);

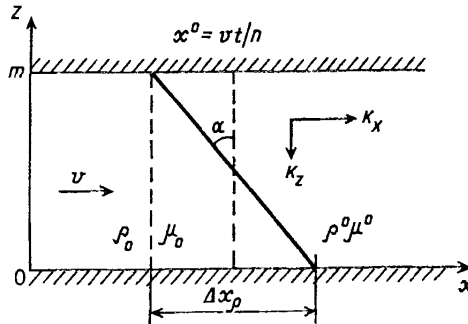


Рис. 2.6. Схема к оценке влияния различия в физических свойствах жидкостей на положение их контакта при взаимном вытеснении

2) для весьма больших моментов времени —

$$\operatorname{tg} \alpha \approx 2 \sqrt{k_x} \Delta \bar{\rho} t / m n, \quad (2.44)$$

что свидетельствует о малой чувствительности процесса к анизотропии фильтрационных свойств пород для длительных прогнозных оценок; последняя формула вполне отвечает результату, к которому пришли ранее в своих работах Ф.М.Бочеввер, Н.Н.Веригин, В.М.Шестаков.

Для осесимметричного фильтрационного потока, при вытеснении пресной воды минерализованным раствором, нагнетаемым в пласт через скважину (с расходом Q), длина «языка» минерализованных вод составляет (при $\Delta \bar{\rho} < 0,1 Q/(k m^2)$) [3]:

$$\Delta r_\rho \approx \frac{2 k m \Delta \bar{\rho}}{A n} \sqrt{t} \approx \Delta x_\rho / \sqrt{1 + Q/(2\pi k m^2 \Delta \bar{\rho})}, \quad (2.45)$$

$$A = \sqrt{Q/(\pi m n)} + 2 k m \Delta \bar{\rho} / n,$$

т.е. уменьшается в сравнении с линейным потоком.

В целом, расчеты по представленным формулам показывают, что при $\Delta\bar{\rho} = 0,01$ (что отвечает разности в минерализации приблизительно 20 г/л) размеры наклонной границы в хорошо проницаемых песчаных толщах могут измеряться — для масштабов прогнозных оценок — сотнями метров, а иногда и километрами.

Важную роль подобные эффекты плотностной конвекции играют в наклонно залегающих пластах [13]: скорость фильтрации

$$v = k [I_e + (\rho/\rho_o - 1) \sin\alpha] \quad (2.46)$$

(где α — угол наклона пласта) может при этом увеличиваться в несколько раз по сравнению с естественной*.

Благодаря преимущественному распространению тяжелых стоков вдоль подошвы пласта в направлении естественного потока, а легких — вдоль кровли в противоположном направлении, при закачке стоков образуются конвективные ячейки (не учитываемые, кстати, аналитическими решениями), которые способствуют гораздо более интенсивному разносу загрязнений. В частности, легкие стоки, двигаясь вверх по потоку вдоль кровли пласта, т.е. в зоне, которая считается обычно безопасной, могут достигнуть «окна» или другого нарушения сплошности в верхнем водоупоре и проникнуть в вышележащие горизонты. По мере дисперсионного рассеяния, разность плотностей вблизи фронта загрязнения сглаживается, и движение, обусловленное уклоном пласта, постепенно замедляется. Модель, учитывающая все эти об-

* Соответственно, мерой значимости этих эффектов может служить отношение
$$\bar{\Gamma}_\alpha = \frac{\Delta\bar{\rho} \cdot \sin \alpha}{I_e}.$$

стоятельства, особенно необходима на длительных стадиях переноса [13].

Пока мы ограничились примерами задач о поршневом вытеснении двух жидкостей с разной плотностью. На самом деле, особенности их миграции во многом определяются комбинированным действием двух механизмов — плотностной конвекции и поперечной гидродисперсии. Для облегчения исходного анализа, рассмотрим эти процессы как взаимно независимые, считая, к тому же, что *источник* вод повышенной плотности *гидродинамически пассивен*, т.е. не меняет исходной постоянной скорости одномерной фильтрации (v_x).

В такой постановке приближенные аналитические решения могут быть получены при предположении, что скорости (v_x и v_z) горизонтальной (обусловленной гидравлическим градиентом) и вертикальной (обусловленной разностью в плотности инфильтрующегося раствора и естественных вод) фильтрации являются постоянными:

$$v_x \approx k_x I, \quad v_z \approx k_z \Delta \bar{\rho}. \quad (2.47)$$

При $\Delta \bar{\rho} > 0$ плотностная конвекция ограничивает рассеяние вещества вверх (вплоть до практически полного прекращения поперечного дисперсионного переноса) и, наоборот, способствует его оттоку вниз.

Подобно критерию (2.42) может быть получена следующая оценка допустимости пренебрежения плотностной конвекцией в профильном перераспределении вещества (т.е. в деформации ореола) на фоне поперечной гидродисперсии [4]:

$$\Delta \bar{\rho} < (0,7 - 1,0) \frac{k_x I}{k_z} \sqrt{\delta_{T_z} / x}. \quad (2.48)$$

На самом деле, однако, плотностной градиент зависит от дисперсии: физически ясно, что если граница раздела

двух жидкостей претерпевает размыв, то роль процессов гравитационной дифференциации должна заметно сглаживаться, поскольку в зоне смещения растворов происходит уменьшение действующего плотностного градиента: это подтверждено и физическими экспериментами, и некоторыми частными решениями соответствующих краевых задач.

Так, в работе [11] рассмотрена задача о переходной зоне между вторгающимися морскими и пресными водами; изменение плотности в ее пределах описывается зависимостью:

$$\rho = \rho_c + (\rho_c - \rho_{np}) f(\eta), \quad (2.49)$$

где $\eta = \frac{y}{2\sqrt{\delta_{Tz}} x}$, δ_{Tz} — поперечная дисперсивность, ось x направлена вдоль границы раздела, а ось y — перпендикулярно ей (начало координат — в нижней точке границы раздела); функция $f(\eta)$ равна

$$f(\eta) = \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\eta}^{\infty} e^{-\xi^2/2} d\xi \right]^{1/2}. \quad (2.49,a)$$

Отсюда, в частности, следует, что мощность переходной зоны растет по направлению к морю.

Процессы, определяемые совместным действием дисперсии и гравитационной дифференциации разновесомых жидкостей, оказываются особенно сложными в более общем случае — при поступлении в водоносный пласт растворов с повышенной плотностью из гидродинамически активных источников, ограниченных (в плане и в разрезе) размеров: в этих условиях вблизи источника формируется интрузия плотных высокоминерализованных растворов, обтекаемых естественным (региональным) потоком подземных вод; одновременно резко усиливается влияние дисперсионных эффектов. Такая ситуация является, например, достаточно типичной

для условий техногенного загрязнения водоносных горизонтов из поверхностных бассейнов, содержащих протстоки с высокой минерализацией ($M > 50-100$ г/л). Сложность анализа подобных задач, помимо их трехмерности, усугубляется необходимостью совместного решения уравнений фильтрации и массопереноса (разд. 1.2.2). Поэтому качественные закономерности процесса удобно рассмотреть, опираясь на данные физического моделирования, причем сразу же следует отметить, что полученные результаты хорошо согласуются с данными наблюдений за загрязнением подземных вод на реальных объектах.

Опыты проводились* в лотке, заполненном разнозернистым песком, где сначала задавался одномерный фильтрационный поток пресной воды с расходом 0,83 л/час. Раствор поваренной соли (исходная минерализация 230 г/л, плотность 1,16 г/л) подавался с расходом 0,9 л/час в бассейн диаметром 0,1 м, устроенный в рабочей камере лотка на расстоянии 1,47 м от нижнего бьефа. По всему объему рабочей камеры располагались гирлянды резистивметров, с помощью которых фиксировались пространственные и временные изменения в минерализации воды. По результатам наблюдений были построены эпюры распределения концентрации соли в вертикальной плоскости продольного осевого сечения и в плановых проекциях (рис. 2.7).

Как следует из приведенных данных, картина миграции в целом носит объемный (трехмерный) характер, причем на процесс массопереноса сильное влияние оказывают, с одной стороны, гравитационные силы, возникающие вследствие различий в плотностях инфильтрующей жидкости и потока-носителя, а с другой — эффекты дисперсионного размыва интрузии мигрирующих растворов и дальнейшего рассеяния компонентов, снесенных с ее боковой поверхности потоком подземных вод.

Наиболее существенно гравитация сказывается на первых этапах развития миграционного процесса: наблюдается крутое

* Экспериментальная часть этого исследования выполнена Ф.Г.Атрощенко.

погружение интрузии соленых вод, которая довольно быстро достигает нижней границы пласта; при этом практически вся интрузия представлена неразбавленными растворами, имеющими минерализацию, близкую к исходной. Влияние естественного потока здесь мало ощутимо. На более поздних этапах миграции гравитация предопределяет также повышенные скорости продвижения «языка» рассолов по подошве пласта.

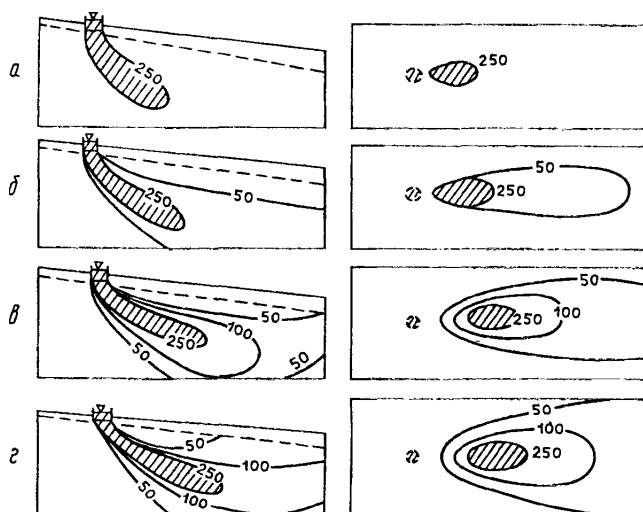


Рис. 2.7. Результаты физического моделирования миграции тяжелых стоков в песчаном лотке;
а, б, в, г - профильные (по оси ореола) и плановые (в средней плоскости лотка) сечения на расчетные моменты времени $t=3, 3, 11, 22, 1$ и $27-48$ ч; изолинии минерализации - в г/л

Дальнейшая инфильтрация из бассейна приводит к росту размеров ореола соленых вод, причем в его строении уже отчетливо выделяются две зоны: внутренняя (ядро), представленная неразбавленными рассолами, и внешняя — зона гидродисперсионного размыва боковых границ ядра, в пределах которой содержание компонентов меняется от исходных до фоновых значений. Ядро интрузии по-прежнему обтекается пресными пласто-

выми водами, причем скорость его горизонтального перемещения, как легко убедиться из простейших расчетов, заметно уступает скорости транзитного потока. Такое соотношение в скоростях приводит к тому, что пластовая жидкость, омывая тело концентрированных рассолов с боковых сторон, сносит часть вещества, которая идет на формирование зоны рассеяния компонентов; особенности развития процесса определяются не только энергетическими характеристиками потока, но и балансом масс солевых растворов, идущих из бассейна на питание интрузии (M_0) и сносимых с ее поверхности (M_n).

Обратим внимание на то, что интенсивность поперечного рассеяния при развитии процессов плотностной конвекции заметно превышает аналогичную характеристику пространственной микродисперсии физически инертного трассера. Это объясняется тем, что внедрение более тяжелой жидкости и плановая деформация линий тока фильтрационного потока, омывающего интрузию, приводят к возникновению ортогонального (по отношению к направлению основного переноса) компонента скорости фильтрации, который и вызывает дополнительное конвективное перемещение солей в направлении периферийных зон ореола.

Конечные этапы модельного процесса характеризуются устойчивым пространственно-временным положением ореола — наблюдается квазистационарное, а затем и стационарное (вследствие ограниченной длины модели) распределение концентрации солей, которое достигается, очевидно, в результате выравнивания массовых потоков M_0 и M_n . Полученный результат имеет важное значение для понимания реальных процессов миграции разноплотностных жидкостей, он принципиально невозможен при традиционном двумерном рассмотрении и требует весьма сложного количественного анализа на численных трехмерных моделях (разд. 10.5.5).

Однако даже такой, усложненный, анализ не учитывает возможного изменения формы контакта и, в какой-то степени, интенсивности переноса за счет опережающего внедрения отдельных «языков» вытесняющей жидкости. Эффект этот, отражающий неустойчивость (в данном контексте — на микроуровне) формы контакта двух жидкостей, зависит от соотношения их плотностей и, особен-

но, вязкостей: наиболее сильно он выражен при внедрении менее вязкой жидкости, в частности — пресной воды в соленую.

Соответственно, и рассеивающие эффекты обусловлены свойствами не только фильтрующей среды, но и раствора, в первую очередь, его плотностью и вязкостью. Так, при закачке пресной воды в соленую показатели дисперсии оказываются — для тех же водосодержащих пород — в несколько раз выше, чем в противоположном варианте. При субвертикальном внедрении тяжелых растворов с пониженной вязкостью образование их «языков», далеко опережающих основной фронт миграции, приобретает особенно большое значение, так что формальное описание миграции уравнениями диффузионного типа будет давать очень высокие величины коэффициента микродисперсии. При внедрении подобных несмешивающихся жидкостей, последние, занимая наиболее проводящие пути, продвигаются в виде «языков», далеко опережающих основной фронт вытеснения. В свою очередь, поперечная дисперсия постепенно подавляет эти «языки», способствуя выравниванию фронта.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ К ГЛАВЕ 2

1. Гензель Г.Н., Карачевцев Н.Ф., Коносавский П.К., Кравчук С.В., Мироненко В.А., Румынин В.Г. Решение задач охраны подземных вод на численных моделях. Под общей редакцией Мироненко В.А. — М.: Недра, 1992, 240 с.
2. Грабовников В.А., Рубейкин В.З., Самсонова Л.М., Самсонов Б.Г. Формирование и строение ореолов рассеяния вещества в подземных водах. — М.: Недра, 1977, 137 с.
3. Делюков А.А., Филиппов Ю.Ф., Лапин Б.В. Расчет положения контакта при вытеснении минерализованных вод пресными. — В кн.: Опыт и перспективы использова-

ния математического моделирования. — Белгород, 1980, с.7-8.

4. МIRONENKO В.А., РУМЫНИН В.Г. Опытнo-миграционные работы в водоносных пластах. — М.: Недра, 1986, 240 с.

5. МIRONENKO В.А., РУМЫНИН В.Г., УЧАЕВ В.К. Охрана подземных вод в горнодобывающих районах (опыт гидрогеологических исследований). — Л.: Недра, 1980, 320 с.

6. МIRONENKO В.А., ШЕСТАКОВ В.М. Теория и методы интерпретации опытнo-фильтрационных работ. — М.: Недра, 1978, 326 с.

7. Орадовская А.Е. Миграция вещества и тепла в подземных водах. — В кн.: Гидрогеологические исследования за рубежом. — М.: Недра, 1982, с.33-74.

8. Рошаль А.А. Методы определения миграционных параметров. Обзор ВИЭМС, сер. «Гидрогеология и инженерная геология», 1980, 62 с.

9. Bear J. Dynamics of fluids in porous media. Amer. Els. N.Y., 1972, 764 p.

10. Bear J., Jacobs M. On the movement of water bodies injected into aquifer. — Journ. of Hydrology, 1965, v.3, p.37-57.

11. Calibration and Reliability of Groundwater Modelling. Model CARE 90, IAHS Publication, №195.

12. Domenico P.A. An analytical model for multi-dimensional transport of a decaying contaminant species. — Journ. of Hydrology, 1987, v.96, p.p.47-58.

13. Dorgarten H.W., Tsang C.F. Modelling the density-driven movement of liquid wastes in deep sloping aquifers. — Ground water, 1991, v.29, №5, p.p.655-663.

14. Hellstrom G., Tsang C.F., Claesson J. Combined forced convection and buoyancy flow at a two-fluid interface in a porous medium: analytical studies. — Water Res. Res., 1988, v.24, №4, p.p.507-515.

15. Hunt B.B. Dispersive sources in uniform groundwater flow. — Journ. Hydraul. Div., 1971, v.97, HY 1, p.p.75-85.
16. Lenau C.W. Dispersion from recharge well. — Journ. Eng. Mech. Div., 1972, v.98, EM 2, p.p.331-343.
17. Ogata A. Theory of dispersion in granular medium. Fluid Movement in Earth Materials. Geological Survey Professional Paper 411-I, 1970, 34 p.
18. Prakash A. Groundwater contamination due to vanishing and finite-size continuous sources. — Journ. of Hydraul. Div., 1982, v.108, №4, p.p.572-582.
19. Sagar B. Dispersion in three dimensions: approximate analytical solutions. — Journ. of Hydraulic Div., 1982, v.108, №1, p.p.47-62.
20. Welty C., Gelhar L.W. Evaluation of longitudinal dispersivity from nonuniform flow tracer tests. — Journal of Hydrology, 1994, v. 153, p.p. 71-102.

До сих пор процессы переноса вещества рассматривались на микроуровне, точнее, для условий, когда среда считается гомогенной по емкости и проницаемости, а процессы массопереноса фильтрующимся потоком (так же, как и физико-химические реакции) — протекающими только на одном уровне, не зависящем от масштаба их изучения. Реальные водоносные системы часто неоднородны и гетерогенны, т.е. подразделяются на подсистемы с резко различающимися фильтрационными свойствами и уровнями процессов массообмена*. Адекватное физико-математическое описание процессов миграции подземных вод в таких условиях требует обращения к расчетным моделям макродисперсии, отражающим реальную неоднородность и гетерогенность водоносных комплексов.

Здесь полезно обратить внимание на неэквивалентность, в общем случае, терминов «гетерогенность» и «неоднородность», в частности — применительно к рассматриваемым проблемам [8]. Первый из них соотносится с резко различными уровнями протекания изучаемого *процесса* в физической «точке», — в пределах репрезентативного элементарного объема среды; второй же говорит о пространственной изменчивости *свойств среды* в макрообъеме, превосходящем

* Границы подсистем по указанным характеристикам не всегда совпадают.

репрезентативный*. Поэтому возможны различные варианты сочетания этих двух понятий применительно к проводящим и емкостным свойствам при изучении процессов миграции:

1) гомогенные однородные среды, которые и были, по сути дела, рассмотрены нами в предыдущем разделе (примеры такой среды — однородный песчаный пласт, равномерно трещиноватый гнейс с практически нулевой пористостью);

2) гетерогенные однородные среды — трещиновато-пористые породы с относительно равномерной трещиноватостью (скажем, однородный равномерно-трещиноватый известняк, в котором проницаемость и емкость связаны с двумя разными системами — трещин и пористых блоков);

3) гомогенные неоднородные среды, в которых на макроуровне выделяются элементы неоднородности, характеризующиеся существенно различающимися проводящими и/или емкостными свойствами, но внутри каждого такого элемента процесс идет гомогенно (например, стратифицированные пористые среды, в которых отдельные слои рассматриваются как самостоятельные макроэлементы детерминированной среды);

4) гетерогенные неоднородные среды, например, комплексы макронеоднородных трещиновато-пористых пород или комплексы чередующихся песчано-глинистых пород, в которых мелкие элементы неоднородности (линзы, прослои и т.п.) рассматриваются как микроэлементы репрезентативного элементарного объема среды, входящие в состав отдельных ее макроэлементов (иерархически построенная стохастическая среда).

* Существование неоднородности в пределах репрезентативного элементарного объема уже принято во внимание осреднением свойств среды по этому объему.

Ввиду отсутствия четкого подразделения двух упомянутых терминов, особенно в зарубежных публикациях (где оба они чаще всего объединяются понятием *heterogeneity*), мы будем настаивать на нем лишь в необходимых случаях. В частности, в контексте данного раздела, неоднородность нередко молчаливо отождествляется с гетерогенностью, ибо и та, и другая находят свое отражение в крупномасштабных эффектах рассеяния (макродисперсия).

Гетерогенность и неоднородность — всеобщие свойства водоносных систем. Для комплексов пористых (песчано-глинистых) пород их проявление обусловлено, преимущественно, фациальной изменчивостью, слоистостью и, соответственно, вариациями гидравлической проницаемости по профилю пласта; для существенно трещиноватых коллекторов — разнородными механизмами массопереноса по трещинам и пористым блокам, а также наличием трещин и каналов разного порядка. В такого рода системах перемещение фронта вытеснения по более проницаемым слоям (трещинам) существенно замедляется благодаря поперечной гидродисперсии и молекулярной диффузии из них в менее проницаемые слои (в пористые блоки). При этом вблизи фронта переноса возникает, как и в случае микродисперсии, переходная зона, размеры которой предопределяются, однако, уже не столько собственно диффузионно-дисперсионными эффектами в проницаемых слоях (трещинах), сколько обменом веществом со слабопроницаемыми слоями (блоками). Таким образом, имеют место эффекты рассеяния, внешне сходные с результатами действия микродисперсии, но вызванные, однако, принципиально иной причиной — макроструктурой среды, гетерогенной ее проницаемостью и емкостью. По аналогии, эффекты такого рода могут быть названы *макродисперсией*.

Таким образом, по превалирующим механизмам макродисперсионного рассеяния можно выделить две группы геологических сред:

1) гетерогенные комплексы пористых или трещиноватых пород, дисперсия вещества в которых обусловлена, в первую очередь, пространственными вариациями и/или гетерогенностью гидравлической проницаемости; сюда включаются: а) идеализированные упорядоченно-стратифицированные системы (проницаемость меняется только в разрезе, оставаясь более-менее постоянной для каждого элементарного слоя), б) неупорядоченно-неоднородные системы, где проницаемость является функцией всех трех пространственных координат;

2) гетерогенные комплексы пород с двойной емкостью — трещиновато-пористые среды, дисперсия в которых является следствием резких различий емкости и проницаемости трещин и пористой матрицы (пористых блоков); здесь также могут иметь место два подтипа: а) трещиновато-пористые породы, однородные в фильтрационном отношении, б) трещиновато-пористые породы, в которых дополнительное рассеяние вещества обуславливается макроизменчивостью проницаемости.

Принципиальным отличием второй группы пород от первой является сильная гетерогенность не только по проницаемости, но и по емкости, которая при больших масштабах переноса может оказывать на него доминирующее влияние, подавляя роль изменчивости проводящих свойств. С другой стороны, в обеих группах можно было бы дополнительно выделить подгруппу трещиноватых или трещиновато-пористых пород с гетерогенной (двойной или тройной) проницаемостью, обусловленной наличием относительно редких проводящих каналов или трещин на фоне трещиноватости второго порядка; однако, как будет показано, для сравнительно крупномасштабных процессов это чаще

всего лишено практического смысла, а в противном случае такие породы не могут быть определены необходимой информацией и представляют интерес лишь для модельного изучения масштабных эффектов (см. далее разд. 8.1).

Широкий спектр возможных масштабных уровней протекания миграционных процессов в гетерогенных средах обычно не укладывается в пределы единой расчетной модели. Поэтому гетерогенность пород целесообразно учитывать в рамках совокупности «взаимоперекрывающихся» расчетных схем, увязанных с характерными пространственно-временными масштабами изучения миграционного процесса. Построение подобных моделей макродисперсии опирается на детерминированные или стохастические представления о структуре водоносных пластов. При этом стохастические модели следует рассматривать, скорее всего, как инструмент для исследования возможной степени неопределенности наших представлений о природе миграционных процессов, нежели как базу для прогнозов конкретных ситуаций: информационное обеспечение стохастических моделей практически всегда не отвечает необходимым в этом смысле требованиям.

3.1. Модели миграции в упорядоченно стратифицированных пластах

Специфика процессов профильной миграции в стратифицированных пластах определяется флуктуацией поля горизонтальных скоростей фильтрации по мощности потока, создающей предпосылки для возникновения концентрационных градиентов в направлениях, ортогональных поверхностям контактирующих слоев (которые пока будем считать однородными). При этом молекулярная диффузия, поперечная гидродисперсия и

вертикальная конвекция являются факторами, направленными на выравнивание концентрации между элементами с различной гидравлической проницаемостью. Благодаря этим процессам скорость (интенсивность) массопереноса в менее проницаемых слоях возрастает, а в более проницаемых — падает.

В общем случае при построении расчетной модели миграции трассера в стратифицированном пласте в качестве исходного рассматривается уравнение

$$n \frac{\partial c}{\partial t} + v_x \frac{\partial c}{\partial x} + v_z \frac{\partial c}{\partial z} - D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - D_{T_z} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} = 0, \quad (3.1)$$

где все параметры являются функциями только вертикальной координаты z , причем они могут быть заданы либо строго однозначно, либо статистически; соответственно, здесь возможны два подхода: первый основан на детерминированных представлениях о свойствах среды, а второй учитывает стохастический характер природных объектов.

3.1.1. Двухслойные системы

Простейшим примером детерминированной стратифицированной системы служит двухслойный пласт (рис. 3.1, а). В разумно упрощенной математической модели такого пласта основными механизмами миграции являются: 1) конвективный перенос вещества, показателем интенсивности которого служат послойные действительные скорости фильтрации v_{x_1}/n_1 и v_{x_2}/n_2 (индексы 1 и 2 относятся соответственно к более и менее проницаемым слоям), и 2) поперечная дисперсия (диффузия) в менее проницаемом слое, характеризующаяся постоянным коэффициентом $D_{T_{z_2}}$. Вертикальным концентрационным градиентом в более проницаемом слое,

конвективным межслоевым обменом и продольной дисперсией в обоих слоях пока пренебрегаем.

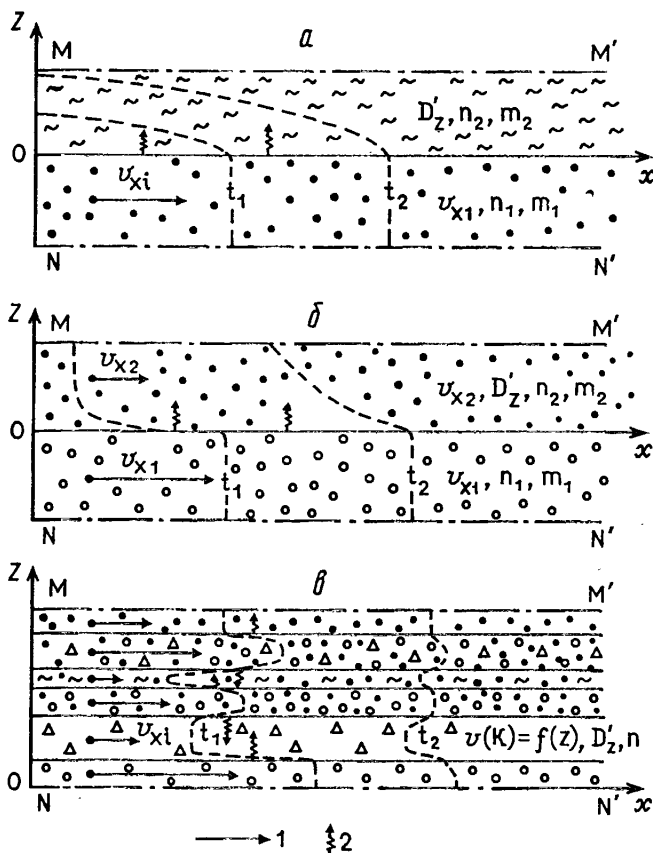


Рис. 3.1. Схематизация условий профильной миграции подземных вод в характерных стратифицированных системах:

а - двухслойный пласт с резкими различиями в проницаемостях отдельных слоев; б - то же с сопоставимыми значениями проницаемостей отдельных слоев, в - многослойный пласт со случайным распределением проницаемости слоев в разрезе (1 и 2 - направления конвективного и поперечного диффузионно-дисперсного потоков; М-М' и N-N' - границы расчетного элемента)

Сделанные допущения позволяют представить общее уравнение с переменными коэффициентами (3.1) в виде системы двух взаимосвязанных уравнений с постоянными коэффициентами:

1) уравнение баланса вещества в слое 1

$$n_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} + v_{x_1} \frac{\partial c_1}{\partial x} + W_s = 0; \quad (3.2)$$

2) уравнение конвективного переноса, осложненного поперечной дисперсией, в слое 2

$$n_2 \frac{\partial c_2}{\partial t} + v_{x_2} \frac{\partial c_2}{\partial x} - D_{T_{z_2}} \frac{\partial^2 c_2}{\partial z^2} = 0, \quad (3.3)$$

где W_s — удельная (на единицу мощности) интенсивность массообмена:

$$W_s = - \frac{D_{T_{z_2}}}{m_1} \frac{\partial c_2}{\partial z} \Big|_{z=0}. \quad (3.4)$$

Уравнения (3.2)-(3.4) дополняются краевыми условиями:

$$\begin{aligned} c_1 \Big|_{t=0} = c_2 \Big|_{t=0}, \quad c_1 \Big|_{x=0} = c_2 \Big|_{x=0} = c_0, \\ c_1 \Big|_{z=0} = c_2 \Big|_{z=0}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial c_1}{\partial z} \Big|_{z=-m_1-0} = \frac{\partial c_2}{\partial z} \Big|_{z=m_2} = 0,$$

где m_1 и m_2 — мощности слоев.

Очевидно, что самые ранние этапы миграции в двух-слойном пласте характеризуются независимым — *послойным* переносом, когда взаимодействие слоев практически не отражается на интенсивности продвижения контактирующих растворов в каждом из них. Поэтому координаты фронтов могут рассчитываться по схеме поршневого вытеснения, а размер

формирующейся зоны относительного смещения фронтов Δx_n^* растет пропорционально текущему времени процесса и разности послойных действительных скоростей фильтрации:

$$\Delta x_n^* = \left(\frac{v_{x_1}}{n_1} - \frac{v_{x_2}}{n_2} \right) t. \quad (3.6)$$

Для наименее благоприятного случая $v_{x_1}/n_1 \gg v_{x_2}/n_2$ условие применимости схемы послойного переноса будет выполняться, если [6]

$$t < t_n \approx 0,05 \frac{m_1^2 n_1^2}{D_{Tz_2} n_2}. \quad (3.7)$$

Отсюда, в частности, получаем, что для разреза, представленного чередованием слоев песчано-глинистых пород мощностью порядка 1 м, время t_n измеряется обычно сотнями суток; для тонкослоистого разреза (мощность отдельных слоев не превышает первых десятков сантиметров) время t_n составляет от нескольких до десятков суток.

В дальнейшем, рассматривая миграцию в двухслойном пласте на временных этапах, не укладывающихся в критерий (3.7), ограничимся случаями, допускающими предельные (асимптотические) решения.

В случае двухслойного пласта с резко различными значениями проницаемостей пород отдельных слоев,

$$\bar{c} = \operatorname{erfc} \left\{ \frac{z + D_M x / (m_1 v_{x_1})}{2 [D_M (t - x n_1 / v_{x_1}) / n_2]^{1/2}} \right\}. \quad (3.8)$$

Частный вариант этого решения, записанного относительно концентрации вещества в хорошо проницаемом

слое ($\bar{c} \equiv \bar{c}_1$, при $z = 0$), известен как формула Ловерье [25]. При выводе ее использована физическая предпосылка *неограниченной емкости* слабопроницаемого слоя, предполагающая, что влияние молекулярно-диффузионного переноса в нем за рассматриваемый период не достигает его внешней границы. Исходя из решения соответствующей диффузионной задачи, можно считать, что это допущение заведомо справедливо при условии:

$$D_m t_p / (m_2^2 n_2) < 0,3-0,5, \quad (3.9)$$

где время t_p отсчитывается от времени t_0 прихода фронта поршневого вытеснения в расчетную точку $x = v_{x1} t_0 / n_1$ ($t_p = t - t_0$).

Для больших значений времени используется расчетная *схема сосредоточенной емкости*. Она предполагает, что вся емкость слабопроницаемого слоя сосредоточена в его средней плоскости (здесь концентрация отвечает среднему значению c_2), а интенсивность обмена между слоями W_s (3.4) *определяется квазистационарным режимом*:

$$W_s = \frac{\alpha_c}{m_1} (c_1 - c_2); \quad m_2 n_2 \frac{\partial c_2}{\partial t} = \alpha_c (c_1 - c_2), \quad (3.10)$$

где α_c — коэффициент межслоевого массообмена; второе уравнение (3.10) соответствует условию баланса вещества в слабопроницаемом слое. Общее решение задачи (3.2), (3.10) относительно концентрации вещества в хорошо проницаемом слое c_1 дается формулой [11]

$$\bar{c}_1 = J(\eta, \tau) = 1 - e^{-\tau} \int_0^{\eta} e^{-\lambda} I_0(2\sqrt{\tau\lambda}) d\lambda \quad (3.11)$$

при аргументах:

$$\eta = \frac{\alpha_c x}{m_1 v_{x_1}}; \quad \tau = \frac{\alpha_c}{m_2 n_2} \left(t - \frac{x n_1}{v_{x_1}} \right). \quad (3.11, a)$$

Выражение для коэффициента межслоевого массообмена имеет вид:

$$\alpha_c \approx \frac{2D_M}{m_2}. \quad (3.12)$$

Анализ показывает, что применительно к фундаментальной задаче схема сосредоточенной емкости дает относительно надежные результаты при выполнении условий:

$$\frac{\alpha_c t_p}{m_2 n_2} > 0,5+1,0; \quad x < \frac{x_{01}}{1 + m_2 n_2 / (m_1 n_1)}, \quad (3.13)$$

где x_{01} — координата фронта поршневого вытеснения в более проницаемом слое ($x_{01} = v_{x_1} t / n_1$). Второму условию в (3.13) удовлетворяют концентрационные точки, характеризующие заднюю половину индикаторной волны ($\bar{c} > 0,5$).

На весьма длительных этапах миграции, когда

$$\frac{\alpha_c t_p}{m_2 n_2} > 10, \quad (3.14)$$

что отвечает предельному — *асимптотическому* — режиму переноса, справедливы решения для диффузионного уравнения типа

$$n^* \frac{\partial c}{\partial t} + v^* \frac{\partial c}{\partial x} = D_L^* \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (3.15)$$

с эффективными параметрами скорости фильтрации и пористости

$$v^* = \frac{v_{x_1} m_1}{m_1 + m_2}; \quad n^* = \frac{n_1 m_1 + n_2 m_2}{m_1 + m_2}; \quad (3.15, a)$$

при этом эффекты рассеяния характеризуются коэффициентом макродисперсии

$$D_L^* = \delta_L^* v^*, \quad (3.16)$$

где δ_L^* — константа макродисперсии; при условии $D_{T_{z_1}} \gg D_{T_{z_2}}$ она определяется выражением [4, 7]:

$$\delta_L^* = \frac{2m_1 v_{x_1}}{3 \alpha_c [1 + m_1 n_1 / (m_2 n_2)]^2}; \quad (3.16, a)$$

при $D_{T_{z_1}} \approx D_{T_{z_2}} \approx D_M$ значение δ_L^* возрастает в $(1 + m_1/m_2)$ раз. Для слоев с близкими характеристиками n_1 и m_1 константа $\delta_L^* \approx (0,02 \div 0,04) m^2 v_{x_1} / D_M$, т.е. реально может измеряться значениями, достигающими 10^3 - 10^4 м. Заметим, что при таком представлении в уравнении (3.15) под $c = c^*$ следует понимать значение концентрации, средневзвешенное по мощности пласта. Обратим внимание также на квадратичную зависимость коэффициента макродисперсии от скорости фильтрации — $D_L^* \sim v_{x_1}^2$ (в отличие от коэффициента микродисперсии D_L).

Численные оценки показывают, что для значений $\bar{c} > 0,5$ асимптотическая схема дает вполне приемлемые результаты и при менее жестком временном критерии $\alpha_c t_p / m_2 n_2 > 3 \div 5$, не слишком сильно отличающемся от условия применимости [см. первый критерий в формуле (3.13)] схемы сосредоточенной емкости. Таким образом, последняя служит переходным расчетным приближением между двумя крайними асимптотически-

ми режимами, удовлетворяющими несравненно более широкому кругу практических задач.

В целях иллюстрации характера и масштаба проявления макродисперсионных эффектов на рис. 3.2 приведены кривые распределения концентрации [6] для частного случая: $m_1 = 0,1$ м, $m_2 = 0,2$ м, $n_1 = n_2 = 0,5$, $D_{T_{z_2}} = D_M = 5 \cdot 10^{-5}$ м²/сут, $v_{x_1} = 0,05$ м/сут.

Расчетные моменты времени выбирались таким образом, чтобы они удовлетворяли различным критериальным оценкам применимости рассмотренных выше расчетных схем. Сравнение графиков показывает, что анализируемые расчетные схемы удовлетворительно описывают процесс миграции в двухслойном пласте только в рамках рекомендуемых для них критериев.

В случае двухслойного пласта с близкими значениями проницаемостей отдельных слоев (см. рис. 3.1, б) ограничимся анализом приближенного решения [6] для достаточно длительных этапов миграции, характеризующихся квазистационарным режимом массообмена между слоями. Согласно ему, приходим к приближенной зависимости для относительного смещения фронтов (т.е. границ зон полного насыщения веществом по взаимодействующим слоям):

$$\Delta x^* \approx \left(\frac{v_{x_1}}{n_1} - \frac{v_{x_2}}{n_2} \right) \left(1 - e^{-t/\tau_c} \right) \tau_c, \quad (3.17)$$

$$\tau_c = \frac{m_2 n_2}{\alpha_c [1 + m_2 n_2 / (m_1 n_1)]}, \quad (3.17, a)$$

где τ_c — характерное время релаксации двухслойной системы (отвечает периоду полного охвата пласта процессами поперечного дисперсионного перемешивания). Анализ зависимости (3.17) показывает, что величина относительного смещения фронтов пропорциональна разности между послойными действительными скоростями фильтрации и

растет во времени, стремясь, вместе с тем, при $t > (2+3)\tau_c$ к своему предельному значению

$$\Delta x^* \approx \left(\frac{v_{x1}}{n_1} - \frac{v_{x2}}{n_2} \right) \tau_c; \quad (3.18)$$

при этом увеличение общего размера переходной зоны в дальнейшем происходит в основном в результате кинетических межслоевых обменных процессов на переднем фронте вытеснения.

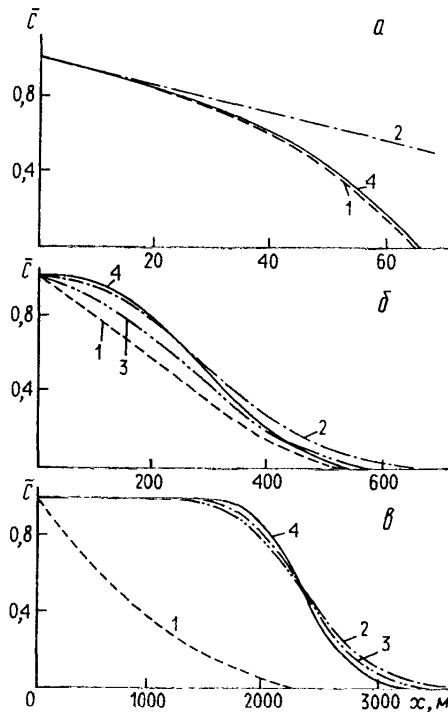


Рис. 3.2. Результаты численного сравнения различных расчетных схем массопереноса в двухслойном пласте.

Графики отвечают моментам времени: а - 70, б - 800, в - 7000 сут. 1-3 - расчетные схемы; 1 - неограниченной емкости, 2 - сосредоточенной емкости, 3 - предельного асимптотического режима, 4 - точное решение

3.1.2. Многослойные водоносные пласты

Для водоносных толщ большой мощности существенное значение имеет внутренняя гетерогенность, роль которой в формировании дисперсионных фронтов может быть оценена в рамках модели с заданным законом профильных распределений проницаемости.

Анализ решений задач переноса в стратифицированных водоносных пластах [1,6], проницаемость (k) которых является функцией вертикальной координаты $k = k(z)$ (рис. 3.1, в), показал, что в общем случае характер миграционного процесса сильно зависит от масштаба области и временных диапазонов его рассмотрения. При этом выделяются два предельных режима переноса — послойного (для малых моментов времени) и асимптотического, когда пласт ведет себя подобно однородному (для больших моментов времени). Если вернуться к терминологии начала этой главы, то на ранних этапах мы имеем дело с моделью неоднородной среды, образованной гомогенными породами, а на последних этапах — с квазиоднородной гетерогенной средой.

В режиме послойного переноса, когда влияние процессов поперечной дисперсии минимально, миграция в двухслойном пласте (рис. 3.3, а) характеризуется независимым продвижением концентрационных фронтов в каждом из слоев, так что размер зоны относительного смещения этих фронтов пропорционален разности действительных скоростей фильтрации. При плановом изменении функции $k(z)$ (рис. 3.3, б-д) процесс может описываться одномерным уравнением конвективной диффузии с коэффициентом D_x , растущим во времени:

$$D_x = A_n v^2 t / n, \quad (3.19)$$

где численное значение коэффициента пропорциональности A_n зависит от вида функции $k(z)$ — см. табл. 3.1, составленную по материалам статей Д.Рона-

ута с соавторами, О.Гевена и Ф.Мальца с соавторами, А.А.Рошалья и Г.М.Коммунара.

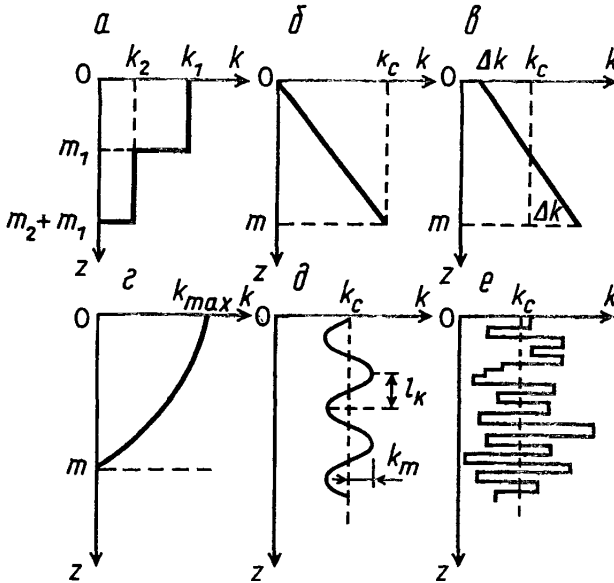


Рис. 3.3. Типовые модели стратифицированных сред, характеризующихся детерминированной (а-д) и стохастической (е) изменчивостью параметра $k=f(z)$

В асимптотическом режиме, на этапах интенсивного межслоевого обмена, процесс описывается постоянным коэффициентом макродисперсии:

$$D \equiv D_L^* = \delta_L^* v, \quad (3.20)$$

где выражения для константы δ_L^* зависят не только от вида функции $k(z)$, но и от константы δ_{T_z} , контролирующей интенсивность межслоевого обмена (табл. 3.1).

Таблица 3.1

Индекс схемы (см. рис. 3.3)	$k = k(z)$	A_n	δ_L^*	τ
а	$k = k_1 (z < m_1)$ $k = k_2 (m_1 < z < m)$		$\frac{m_3^2}{3\delta_T}$	$\frac{m_2^2 n}{D_T}$
б	$k = 2k_c \bar{z}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{m_3^2}{24\delta_T}$	$\frac{m^2 n}{D_T}$
в	$k = k_c + \Delta k (2\bar{z} - 1)$	$\frac{e^2}{3} \left(e = \frac{\Delta k}{k_c} \right)$	$\frac{e^2 m_3^2}{30\delta_T}$	$\frac{m^2 n}{D_T}$
г	$k = k_{\max} (1 - \bar{z}^2)$	$\frac{1}{5}$	$\frac{2m_3^2}{105\delta_T}$	$\frac{m^2 n}{D_T}$
д	$k = k_c \left[1 + W_m \sin \frac{2\pi z}{l_m} \right]$	$\sim \frac{W_m^2}{10}$	$\frac{W_m^2 l_m^2}{8\pi^2 \delta_T}$	$\frac{l_m^2 n}{D_L}$

Примечание. $\delta_T = \frac{D_T}{v}$; $\bar{z} = \frac{z}{m}$; $m_3 = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \sqrt{\left(\frac{m_1}{k_1} + \frac{m_2}{k_2} \right) / T (k_1 - k_2)}$; $T = k_1 m_1 + k_2 m_2$;

$$W_m = \frac{k_m}{k_c}$$

Для описания всего диапазона изменения расчетного показателя дисперсии ($\delta_x = D_x/\nu$) в зависимости от пространственного масштаба L рассмотрения процесса рекомендуется приближенная формула:

$$\delta_x \approx 2A_n h_o \left[1 - \frac{h_o}{x} \left(1 - e^{-x/h_o} \right) \right], \quad (3.21)$$

где $h_o = h^2/20\delta_T$; $h = m$ (или $h = l_m$).

В целом, однако, при переходе к многослойным пористым толщам детерминированные модели оказываются малоэффективными: во-первых, затруднены любые аналитические оценки (за исключением асимптотических), а во-вторых, реально не могут быть получены вертикальные распределения необходимых параметров (прежде всего фильтрационных). Поэтому здесь заслуживают внимания стохастические модели миграционного процесса. Рассматривая миграционные параметры как случайные функции вертикальной координаты z , авторы работ [1,10,22,26] получили стохастическое представление двумерного уравнения переноса (3.1) при $V_z = 0$ и $D_x = 0$, что позволило исследовать процессы дисперсии в стратифицированной системе (см. рис. 3.3, в) с относительно небольшими вариациями послойной проницаемости (при одинаковой пористости n).

В частности, было показано, что уравнение (3.1) может быть сведено к эквивалентной модели с переменным коэффициентом дисперсии [10]:

$$D_x = \frac{2\nu_x^2 W_k^2 \tau}{t} \left[1 - \frac{\tau}{t} \left(1 - e^{-t/\tau} \right) \right], \quad (3.22)$$

где τ — характерное время процесса, равное $h^2 n / D_{T_z}$; h — характерный масштаб ковариационной функции проницаемости вкост наслоения, равный $(l_z^2/6)^{1/2}$ и имеющий порядок средней

мощности прослоев; W_k — коэффициент профильной вариации проницаемости, равный σ_k/k_c ; σ_k^2 — статистическая дисперсия коэффициента фильтрации; k_c и v_x — средние значения коэффициента и скорости фильтрации. Отсюда видно, что в общем случае расчетные значения показателя дисперсии сильно зависят от масштаба области рассмотрения. Как и в предыдущих случаях, можно выделить два характерных предельных режима.

В режиме послойного переноса ($t \ll \tau$) эффективное значение D_x определяется выражением (3.21), где

$$A_n = W_k^2, \quad (3.23)$$

т.е. дисперсивность процесса, пропорциональная квадрату скорости фильтрации v_x и статистическому показателю W_k^2 , возрастает со временем.

Фундаментальное решение в стратифицированном пласте принимает вид [10]:

$$\bar{c} = \operatorname{erfc} \left(\frac{x - v_x t/n}{\sqrt{2} v_x W_k t/n} \right) / [2 - \operatorname{erfc} (1/\sqrt{2} W_k)], \quad (3.24)$$

где концентрация усреднена по мощности пласта.

Из анализа решения (3.24), в частности, следует, что расчетный фронт поршневого вытеснения ($x_0 = v_x t^0/n$) отстает от изолинии концентрации $\bar{c}=0,5$. Так как обычно по времени фиксации этой концентрации $t_{0,5}$ в рамках гомогенной модели рассчитывается активная пористость пород, то недостаточный учет реальной гетерогенности пласта в расчетной схеме приводит к занижению определяемого параметра n . С практической точки зрения эту погрешность следует считать значимой ($\epsilon_n > 15-20\%$) при $W_k > 1$. Вообще говоря, отмеченная асимметрия решения (3.24) отражает его систематическое отклонение от фундаментального решения микродисперсии в форме (2.11). Однако при относитель-

но небольших ($< 0,5$) значениях W_k это отклонение не превышает 5 %, что позволяет аппроксимировать решение (3.24) формулой (2.11) для эквивалентного однородного пласта с эффективным (усредненным во времени) параметром дисперсии

$$D_{x_{cp}} = W_k^2 v_x^2 t / (2n) \quad (3.25)$$

или

$$D_{x_{cp}} \approx \delta_{x_{cp}} v_x (\delta_{x_{cp}} = W_k^2 L/2) \quad (3.25,a)$$

(L — расстояние до точки наблюдения).

Таким образом, масштабы дисперсии в статистически стратифицированных средах намного превосходят гидродисперсионное рассеяние в однородных породах, причем эффективный коэффициент D_x растет с увеличением области переноса (примерная линейность этой зависимости соблюдается до тех пор, пока пренебрежимо мала роль процессов поперечного обмена). При этом длина переходной зоны растет пропорционально времени, а ее относительный размер ($\Delta \bar{x}_n = \Delta x_n / x^0$), в отличие от случая однородного пласта, остается неизменным: он зависит лишь от статистических параметров среды, а его численные значения могут иметь порядок единицы, т.е. переходная зона занимает тогда практически всю область переноса. Характерные числа Пекле (Pe) в этом варианте определяются коэффициентом вариации профильной проницаемости ($Pe \approx 2/W_k^2$) и даже для умеренно неоднородных пластов имеют порядок единиц.

Зависимость (3.25) справедлива для временного диапазона порядка $t < t_n \approx 0,3\tau$. При $t > t^* \approx 3\tau$ процесс описывается другой асимптотикой, которая характеризуется постоянным коэффициентом макродисперсии D_L^* (3.20), где

$$\delta_L^* = \frac{W_k^2 l_z^2}{3 \delta_{T_z}} \quad (3.26)$$

(δ_{T_z} — константа поперечной гидродисперсии).

Время наступления такого асимптотического режима, например, для песчаных толщ с характерной мощностью отдельных прослоев порядка 1 м достаточно велико (тысячи и десятки тысяч суток).

Отметим одну характерную особенность: если при резких различиях проницаемостей слоев (см. разд. 3.1.1) асимптотический коэффициент макродисперсии был пропорционален квадрату скорости фильтрации, то в данном случае он линейно зависит от первой степени скорости.

3.1.3. О значимости вертикальной конвекции в водоносных и разделяющих пластах

Интенсивность межслоевого обмена определяется не только молекулярной диффузией или поперечной дисперсией: на практике подчас более значим конвективный обмен, когда на диффузию накладываются, например: 1) процессы перетекания через разделяющие слои; 2) вертикальная конвекция в пределах самого фильтрующего пласта; 3) вертикальная плотностная конвекция.

Перетекание через разделяющий слой изменяет интенсивность, а зачастую и направленность миграции в нем; увеличивает или уменьшает расход фильтрационного потока в проницаемом слое, а следовательно, и скорость горизонтальной конвекции; способствует разбавлению фильтрующихся растворов за счет поступления в основной пласт дополнительного количества воды иного состава.

Исходя из соответствующих решений для линейного потока (см. [6], а также разд. 10.2.2.3), можно показать, что при $v_{z_2} x / (v_{x_1} m_1) > 10$ (в случае разнонаправленных процессов в разделяющем слое) и при $v_{z_2} x / (v_{x_1} m_1) > 1$ (в случае совпадения направлений перетекания и диффузии) диффузионный обмен имеет подчиненное значение. В этом случае особенности миграции в двуслойной системе определяются, в зависимости от направления перетекания, либо процессами гидравлического смешения вод различного состава (переходная зона между вытесняющим и вытесняемым растворами имеет значительную протяженность), либо замедлением скорости движения концентрационного фронта за счет потери части растворенного вещества вместе с растворителем (переходная зона при этом выражена довольно слабо). Таким образом, при наличии перепада напоров между водоносными пластами решения для чисто диффузионных схем межслоевого обмена оправданы лишь для областей малой протяженности. Этот вывод особенно значим для условий плоскорадиальных потоков (разд. 10.3).

Вертикальная конвекция в водоносных пластах. Обычно в водоносных пластах доминирует горизонтальная фильтрация, и соответствующие задачи гидрогеодинамики принято решать в плановой постановке. Однако на характер массопереноса влияет также вертикальная конвекция различной природы.

Так, роль вертикальной составляющей скорости фильтрации v_z при регулярном (квазистационарном) режиме массообмена в двуслойной толще может быть приближенно учтена с помощью коэффициента межслоевого обмена (см. разд. 3.1.1):

* Индексы 1 и 2 относятся к водоносному и разделяющему слоям.

$$\alpha_c \approx \frac{2D_{T_{z_2}}}{m_2} \pm v_{z_2}. \quad (3.27)$$

Введя характерный параметр Пекле $Pe_z \approx v_{z_2} m_2 / D_{T_{z_2}}$, получим

простые критериальные оценки: при $Pe_z < 0,5-1$ преобладает дисперсионное рассеяние и, наоборот, при $Pe_z > 5-10$ доминирует конвективный межслоевой обмен, причем для разнонаправленных процессов он может полностью подавить дисперсию.

Для примера рассмотрим безнапорный двуслойный водоносный горизонт небольшой мощности ($M = m_1 + m_2$) со следующими усредненными характеристиками: $K_{x_1} = 10$ м/сут, $K_{x_2} = 5$ м/сут, $m_1 = m_2 = 5$ м, $K_{z_2} = 5$ м/сут, $I = 0,01$ (средний гидравлический уклон свободной поверхности), $D_{T_{z_2}} = 10^{-4}$ м²/сут. Вертикальная компо-

нента скорости фильтрации вблизи контакта слоев имеет порядок $v_{z_2} \approx [m_2 / (m_1 + m_2)] k_{z_2} I^2$. Отсюда характерный параметр $Pe_z = m_2^2 k_{z_2} I^2 / [D_{T_{z_2}} (m_1 + m_2)] = 12,5$, т.е. в данном случае взаимодей-

ствие слоев при массопереносе будет определяться вертикальным конвективным потоком. В частности, если менее проницаемый слой (2) залегает сверху, то на участке «разрыва фронтов» из него в нижний пласт, вопреки ожидаемому действию поперечной дисперсии, будет поступать пресная вода.

В целом, вертикальная конвекция резко меняет расчетные значения коэффициента межслоевого обмена α_c и может приводить как к уменьшению, так и увеличению размера переходной дисперсионной зоны в зависимости от направлений конвекции и поперечной дисперсии в рассмотренной двуслойной системе.

В работе [26] подчеркивается принципиальная важность вертикальной составляющей скорости фильтрации и для развития макродисперсии в многослойных системах, описываемых при помощи стохастических моделей (см. разд. 3.1.2): ею во многом

определяется асимптотический режим переноса. Вертикальная компонента скорости фильтрации v_z ускоряет здесь поперечный обмен, тем самым уменьшая расчетные значения константы макродисперсии (3.20):

$$\delta_L^* = \frac{W_k^2 \delta_{T_z} [\delta_{T_z} / (3l_z) + \mu]}{(\delta_{T_z} / l_z + \mu)^3}, \quad (3.28)$$

где $\mu = v_z / v_x$. Оценки, выполненные для характерных значений параметров стратифицированных систем [26], показывают, что уже при $\mu > 0,01$ (т.е. при сравнительно малых значениях v_z , которыми обычно принято пренебрегать в построениях плановой теории фильтрации) влияние вертикальной конвекции существенно.

При этом критериальные оценки для времени наступления асимптотического режима (см. разд. 3.1.1 и 3.1.2) могут уменьшаться на один-два порядка.

Для приближенного учета влияния вертикальной компоненты скорости фильтрации на миграцию вещества в безнапорном горизонте, представленном стратифицированными породами со случайным распределением послойной проницаемости, могут быть использованы асимптотические параметры (3.27) и (3.28), где входящая в них величина v_z вычисляется по усредняющей формуле $v_z \approx k_z I^2 / 2$.

На основе представленных здесь зависимостей могут быть приближенно учтены и *вертикальные конвективные перетоки, обусловленные различиями в плотностях вытесняемого и вытесняющего растворов*. Для этого достаточно оценить вертикальную компоненту скорости плотностной конвекции, которая имеет порядок $v_z \approx k_z \Delta \bar{\rho}$.

В частном случае двуслойного пласта направленность изменений в обменных процессах определяется гипсометрическим положением слоев: если хорошо проницаемый слой подстилается менее проницаемым, то гравитационная дифференциация направлена на

выравнивание скоростей перемещения фронта вытеснения по профилю пласта, и наоборот.

В целом, приведенный анализ, с одной стороны, указывает на необходимость осторожного подхода к использованию широко рекомендуемых в литературе моделей диффузионного межслоевого обмена (которые могут приводить к принципиально неверным представлениям о миграции в стратифицированных комплексах), а с другой — выдвигает новые требования к более детальному изучению слоистых толщ. Особое место при этом должно отводиться методам определения вертикальной проницаемости не только разделяющих, но и водоносных слоев при прямой оценке (*in situ*) скорости и направления вертикальной фильтрации v_z . Нужно также иметь в виду, что фациально-литологическая характеристика стратифицированных комплексов обычно существенно меняется на площадях, соизмеримых с масштабами прогнозных гидрогеологических задач. Поэтому рассмотренные двумерные профильные модели могут оказаться во многих случаях излишне сильной идеализацией реального строения, приводящей к экстремальным выводам.

3.2. Комплексы трещиновато-пористых пород

При обосновании расчетных моделей переноса в трещиновато-пористых средах (а для теплопереноса — и в трещиноватых), как правило, предполагается, что

проницаемость пористой матрицы на несколько порядков ниже проницаемости трещин, а пористость (тепловая емкость) блоков, наоборот, заметно превосходит трещинную емкость системы. Отсюда и вытекают известные представления о существовании двух основных механизмов переноса — конвективного в трещинах и молекулярно-диффузионного (кондуктивного) в блоках; в некоторых частных вариантах принимается в расчет гидродисперсия вещества и тепла в проводящих трещинах, а при ощутимой проницаемости пористых блоков — конвекция в последних.

В рамках моделей с двойной пористостью рассматривается движение жидкостей и вещества не только в водоносных горизонтах, но и в разделяющих трещиноватых глинистых толщах («относительных водопорах»), а также в породах зоны аэрации. Более того, даже во многих случаях скальных пород ограниченная связная пористость матрицы на уровне первых процентов оказывается достаточным основанием для рассмотрения их как гетерогенных пород.

Заметим, однако, что при больших размерах элементарных компонент (ионов, молекул) фильтрующегося раствора, когда их подвижность в порах крайне незначительна (этой особенностью отличаются, в частности, растворы высокомолекулярных органических соединений), процесс мало чем отличается от миграции в однородных трещиноватых породах, хотя он может осложняться осмосом (разд. 1.1.4).

* Как будет видно из дальнейшего, обычно минимальные различия между коэффициентами трещиноватости и пористости блоков — в пределах порядка — оказываются вполне достаточными, чтобы специфика переноса веществ, усваиваемых пористыми блоками, всецело определялась (в региональных масштабах) двойной емкостью гетерогенной системы.

3.2.1. Принципиальные модели массопереноса

При ограниченных масштабах миграции в трещиновато-пористых породах не лишены смысла модели, описывающие перенос в единичных трещинах. В этом варианте может широко использоваться прямая аналогия с двухслойным пластом (разд. 3.1.1). В общем же случае, статистический характер реальных трещинно-блочных пород и существенная неопределенность их геометрии требуют обращения к осредненным квазиоднородным моделям. Так, сводя среду к однородной в структурном отношении, обычно моделируют ее в виде двух вложенных друг в друга систем: первая несет в себе свойства трещин, вторая — блоков. Соответственно, показателями интенсивности переноса для первой из них будут скорость фильтрации ($\bar{v}$) и активная трещиноватость (n), для второй — коэффициент молекулярной диффузии в блоках (D_M), их пористость (n_p) и усредненные геометрические характеристики. При таком представлении трещиноватых пород оказалось удобным учитывать их гетерогенность в рамках предельных расчетных схем, выбираемых в зависимости от особенностей режима переноса в блоках.

Математическое описание миграции в квазиоднородном трещиновато-пористом пласте основывается на уравнении (1.20), где под величиной W_s понимается интенсивность массообмена между трещинами и блоками. Для показателя W_s , в общем случае, справедливо следующее интегральное представление [2]:

* В реальном трехмерном варианте пористая матрица является гораздо более непрерывной, нежели это представляется по анализу зерна: на самом деле, пористые блоки как таковые могут оказаться фикцией, так как они редко оказываются замкнутыми со всех сторон: матрица — это «извилистый континуум». [19].

$$W_s = \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t (c - c^0) \varphi(t - \theta) d\theta, \quad (3.29)$$

где монотонно убывающая функция влияния $\varphi(t)$ отвечает молекулярно-диффузионному потоку вещества (при единичной концентрации на поверхности блока), c^0 — постоянная начальная концентрация. Функция $\varphi(t)$ зависит, помимо времени, от физических параметров D_M и n_0 , осредненного размера блоков m_6 и их формы (возможным оттоком вещества через кровлю и подошву пласта, также способствующим «погашению» концентрационного возмущения, мы здесь пренебрегаем).

Для начальных моментов времени ($t \ll m_6^2 n_0 / D_M$) расчетная схема предполагает, что пористые блоки обладают неограниченной емкостью: влиянию молекулярной диффузии подвергаются лишь зоны пористой матрицы, непосредственно прилегающие к трещинам. Такое допущение позволяет найти для подинтегральной функции $\varphi(t - \theta)$ в формуле (3.29) асимптотическое представление $\varphi(t - \theta) = (\lambda_M / \pi(t - \theta))^{1/2}$; при этом

$$W_s = \lambda_M^{1/2} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t \frac{(c - c^0) d\theta}{\pi^{1/2} (t - \theta)^{1/2}}, \quad (3.30)$$

где $\lambda_M = S_6^2 n_0 D_M$ — комплексный массообменный параметр, S_6 — удельная поверхность блоков. Таким образом, влияние геометрии блоков на интенсивность массового потока W_s полностью определяется одним показателем S_6 , в котором отражается соответствие между объемом блока v_6 и его поверхностью ω_6 : $S_6 = \omega_6 / v_6$ (для блоков пластинчатой конфигурации $S_6 = 2/m_6$, а для блоков кубической формы $S_6 = 6/m_6$).

Для условий поршневого вытеснения по трещинам ($D = 0$) при постоянных начальном (1.42) и граничном (1.45) условиях решение одномерного уравнения (1.20) [где ∇

определяется в соответствии с зависимостью (1.27), а W_s — по (3.30)] дается формулой [6]:

$$\bar{c} = \operatorname{erfc} \left(\frac{\eta}{2 \tau^{1/2}} \right), \quad (3.31)$$

где

$$\eta = \frac{\lambda_M x}{v n_o}, \quad \tau = \frac{\lambda_M}{n_o^2} (t - t_o), \quad t_o = \frac{x n}{v}. \quad (3.31, a)$$

Формула (3.31) является аналогом решения Ловерье (3.8) для двухслойного пласта (разд. 3.1.1).

Миграция в единичной трещине также описывается формулой (3.31), где необходимо положить $t_o = nx/v$, а отношение $2v/S_6$ заменить на удельный расход в трещине.

Для пласта, представленного блоками преимущественно кубической конфигурации*, расчетная схема неограниченной емкости справедлива, пока выполняется критерий [6]:

$$\tau < 0,3 \div 0,5. \quad (3.32)$$

В более поздние моменты времени, когда массовым потоком охватывается значительный объем порового пространства блоков, режим переноса в них близок к квазистационарному; в этом варианте приходим к расчетной схеме *сосредоточенной емкости*. Исходные уравнения массообмена, отражающие соотношение между количеством вещества (W_6), усваиваемого блоками в единице объема пласта в единицу времени, и текущими средними концентрациями в трещинах (c) и в блоках (c_6), имеют вид:

* Все критериальные оценки для трещиноватых пластов, состоящих из блоков пластинчатой формы, можно получить, руководствуясь аналогией с двухслойным пластом (разд. 3.1.1).

$$W_s = n_o \frac{\partial c_6}{\partial t}, \quad \frac{\partial c_6}{\partial t} = \alpha_M (c - c_6), \quad (3.33)$$

где $\alpha_M = \frac{D_M S_6}{n_o l_{cp}}$ — объемный коэффициент массообмена (сут^{-1}), l_{cp} — осредненная длина переноса по блокам.

Объединяя уравнения (3.33), можно придать выражению для массового потока W_s и более общую интегральную форму (3.29), где функция $\varphi(t - \theta) = \alpha_M n_o e^{-\alpha_M(t - \theta)}$; таким образом, приходим к формуле

$$W_s = \alpha_M n_o \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t (c - c^o) e^{-\alpha_M(t - \theta)} d\theta, \quad (3.34)$$

подобной (3.30).

Приближенное аналитическое выражение, связывающее параметр α_M с физическими характеристиками блоков, может быть получено из решения задачи нестационарного молекулярно-диффузионного переноса для блоков известной конфигурации. Для этого достаточно оценить отношение удельного массового потока через поверхность блока к изменению средней концентрации в нем из решения соответствующей краевой задачи или воспользоваться методом моментов. Как показал анализ полученных зависимостей [5,7], коэффициент массообмена является переменной во времени величиной, максимальное значение которой отвечает начальным этапам процесса; с течением времени, ориентировочно, при $\tau > 0,5$, однако, отмечается довольно быстрая стабилизация значений α_M , когда

$$\alpha_M \approx (12 \div 60) \frac{D_M}{m_6^2 n_o}, \quad (3.35)$$

где минимальное значение α_M отвечает блокам пластинчатой конфигурации, а максимальное — кубической.

Многочисленные эксперименты на математической модели позволили оценить параметр α_M при квазистационарном режиме переноса в блоках примерно изометрической конфигурации: его связь с массообменными характеристиками пористых блоков выражается приближенным равенством:

$$\alpha_M \approx \frac{D_M S_6^2}{n_o} = \frac{\lambda_M}{n_o^2}, \quad (3.36)$$

которое хорошо согласуется и с результатами других исследований.

При ощутимой проницаемости блоков в коэффициент массообмена α_M должен вводиться конвективный член, отражающий поступление вещества в блок за счет гидравлического переноса при градиенте I [4]:

$$\alpha_M^v = \alpha_M + \alpha_v, \quad \alpha_v \approx \frac{S_6 \bar{\kappa}}{6n_o} v \approx \frac{k_6 I}{n_o m_6}, \quad (3.37)$$

где $\bar{\kappa} = k_6/k$ — относительная проницаемость блоков. В этом варианте коэффициент α_M^v является линейной функцией скорости фильтрации v . Нетрудно показать, что конвективный механизм обмена в блоках будет преобладать при $\bar{\kappa}v/(S_6 D_M) > 30-50$; задаваясь характерными значениями $v = 0,1-1$ м/сут, $D_M = 5 \cdot 10^{-5}$ м²/сут, $S_6 = 10-100$ м⁻¹, получаем, что этому условию отвечают величины $\bar{\kappa} > 0,01-0,1$, характерные для слаболитифицированных покровных отложений суглинистого и супесчаного состава.

Выражение (3.37) предполагает, что конвективное насыщение блочной матрицы веществом идет параллельно с квазистационарным диффузионным его переносом. Если же диффузионный процесс длительное время протекает в резко нестационарном режиме (справедлива расчетная схема неограниченной емкости блоков), а абсолютная величина коэффициента диффузии невелика, то при

длительном крупномасштабном переносе необходимость учета конвекции в блоках может возникнуть и для литифицированных трещиновато-пористых пород. Так, если исходить из простой оценки времени t_6 продвижения конвективного фронта в блоке до его середины:

$$t_6 = \frac{m_6 n_o}{2k_6 I}, \quad (3.38)$$

то при характерных значениях параметров, например, для типичных песчаников ($m_6 \approx 0,5$ м; $k_6 = 0,01-0,001$ м/сут, $n_o = 0,1$) получаем при $I = 0,01$ время t_6 порядка сотен — первых тысяч суток; эти цифры вполне могут быть меньше временного критерия справедливости схемы неограниченной емкости, и конвективное насыщение превалирует над диффузионным. Более обстоятельные оценки по этому поводу можно найти в работе [14].

Решение одномерной (линейной) задачи массопереноса в трещиновато-пористой среде, отвечающее предпосылке сосредоточенной емкости (3.34) при постоянных краевых условиях (1.42), (1.45) имеет вид:

$$\bar{c} \equiv J(\eta, \tau), \quad (3.39)$$

где специальная функция $J(\eta, \tau)$ определяется соотношением (3.11) при

$$\eta = \frac{\alpha_M x n_o}{v}, \quad \tau = \alpha_M (t - t_o), \quad t_o = \frac{x n}{v}; \quad (3.39, a)$$

графики функции $J(\eta, \tau)$ приведены на рис. 3.4, а; как и в предыдущем случае решение (3.39) получено в предпосылке $D = 0$.

При длительном протекании процесса (3.39) дает асимптотическое решение:

$$\bar{c} \approx 1 - 0,5 \operatorname{erfc}(\tau^{1/2} - \eta^{1/2}); \quad (3.40)$$

оно применимо (с погрешностью менее 10-12 %) при условии $\tau \geq \eta > 5$. В этом случае, с достаточной для практических оценок точностью, справедливо простое соотношение:

$$x_{0,5} = vt / (n + n_0), \quad (3.41)$$

т.е. положение характерной изолинии $\bar{c} = 0,5$ уже слабо контролируется кинетическим обменным параметром (α_M), и всецело определяется суммарной емкостью трещин и блоков ($n + n_0$).

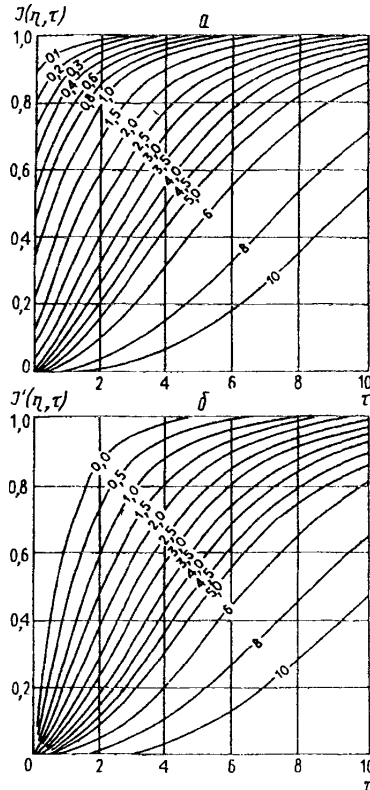


Рис. 3.4. Графики функций: $J(\eta, \tau)$ и $J'(\eta, \tau)$; шифры кривых - значения параметра η

Средняя концентрация вещества в блоках

$$\bar{c}_\delta = J'(\eta, \tau) = 1 - J(\tau, \eta) \quad (3.42)$$

(графическое представление этой функции дано на рис. 3.4, б).

Расчетная схема сосредоточенной емкости рекомендуется к использованию для тех моментов времени, когда выполняется критериальное соотношение

$$\tau > 0,3-0,5, \quad (3.43)$$

т.е. за пределами применимости расчетной схемы неограниченной емкости. Однако и в этом случае предпосылка о регулярном (квазистационарном) режиме обмена между трещинами и блоками может приводить к заметным погрешностям на переднем фронте концентрационной волны ($\bar{c} < 0,5$), где массообмен в действительности носит существенно нестационарный характер; поэтому желательно соблюдение дополнительного условия $\nu t \geq (n + n_0)x$, или $\tau \geq \eta$, гарантирующего высокую степень насыщения веществом пористой матрицы (обычно это условие ограничивает расчетные точки как раз областью изменения концентрации $\bar{c} > 0,5$).

Наконец, для описания *предельного асимптотического режима*, когда значения концентрации вещества в трещинах и пористых блоках практически выравниваются, могут использоваться решения эффективного конвективно-дисперсионного уравнения (3.15); для коэффициентов этого уравнения легко могут быть получены соотношения:

$$n^* = n_0 + n \approx n_0, \quad D_L^* = \delta_L^* \nu^2, \quad (3.44)$$

где $\delta_L^* \approx (\alpha_M n_0)^{-1} \approx (S_\delta^2 D_M)^{-1}$ — макродисперсивность (для средних значений параметра массообмена, когда пласт представлен блоками кубической конфигурации). Для условий фундаментальной задачи соответствующее решение дается формулой

$$\bar{c}^* \approx 1 - 0,5 \operatorname{erfc} \left(\frac{\tau - \eta}{2 \tau^{1/2}} \right), \quad (3.45)$$

записанной для задней половины концентрационной волны ($\bar{c} > 0,5$) и применимой при выполнении соотношений:

$$\tau \geq \eta > 10 \div 15. \quad (3.46)$$

Рассмотренные здесь одномерные модели могут, вообще говоря, быть распространены и на двумерные миграционные потоки, однако в подавляющем большинстве случаев (кроме последнего) для этого потребуются аппарат численного моделирования. С качественной же стороны, можно ожидать, что влияние, в частности, поперечной дисперсии в трещиновато-пористых породах должно занимать — по своим масштабам — промежуточное положение между трещиноватыми и пористыми средами, приближаясь к последним для типичных трещиновато-пористых пород.

3.2.2. 0 параметрической тождественности расчетных моделей миграции

Хотя при математической формализации различных уровней обмена в рассмотренных схемах нашли отражение различные физические предпосылки, определяющими для них являются, в конечном итоге, одни и те же параметры — удельная поверхность блоков (причем в этом показателе косвенно учитывается конфигурация блоков и их размер), коэффициент молекулярной диффузии и емкостные показатели трещин и блоков. Подобная параметрическая тождественность модели позволяет широко использовать аналитическую экстраполяцию параметров для описания существенно разномасштабных процессов. Например, от комплексного массообменного параметра $\lambda_M = S_o^2 D_M n_o$, характеризующего режим обмена в рамках схемы не-

ограниченной емкости и определяемого, в частности, локальными экспериментальными работами, нетрудно простым пересчетом перейти к оценке для коэффициента объемного массообмена или макродисперсивности, описывающих кинетику внутрипластового обмена в региональном масштабе.

Вместе с тем, рассмотренные расчетные схемы оказываются зависящими от тех или иных параметров среды в различной степени, причем эта зависимость определяется текущими пространственно-временными характеристиками процесса. Так, расчетная схема неограниченной емкости всегда весьма чувствительна к изменениям комплексного параметра α_M ; отсюда, в частности, следует, что этот параметр может хорошо оцениваться опытными работами. Кроме того, при малых значениях времени на общую интенсивность массопереноса большое влияние оказывает степень трещиноватости пород; однако за фронтом основного переноса ($x \ll vt/n$) величина емкости трещин весьма слабо влияет на рассчитываемые по решению (3.31) концентрационные поля. С другой стороны, при квазистационарном режиме обмена между трещинами и блоками чувствительность расчетных алгоритмов к массообменному параметру α_M резко падает во времени, особенно — при $\tau > 5$, однако чувствительность к изменениям пористости блоков, контролирующей суммарную емкость пласта, остается высокой. Наконец, при изучении процессов переноса регионального характера почти всегда допустимо пренебрегать трещинной емкостью системы.

В целом, принимая во внимание статистический характер реальных трещиновато-пористых сред, приведенные выше решения будут давать, конечно, лишь ориентировочные оценки. Разноразмерность блоков обуславливает дополнительное рассеяние вещества, величина которого определяется статистическими

параметрами среды. При этом собственно макродисперсионные эффекты могут оказаться в определенной степени затененными и искаженными. Последнее обстоятельство затрудняет экспериментальную оценку средних значений геометрических характеристик трещиноватой среды, определяющих интенсивность массообменных процессов в масштабе прогнозных оценок.

3.2.3. Об аналогии между процессами массо- и теплопереноса

Руководствуясь только что рассмотренными моделями, можно дать обоснование расчетным зависимостям для теплопереноса в трещиноватых средах, которые по отношению к нему всегда ведут себя как гетерогенные. Необходимо, однако, предварительно остановиться на некоторых теплофизических характеристиках трещиноватых пород. Здесь блоки обладают существенной теплоемкостью (c_θ^o) и способностью передавать тепло кондукцией, а трещины — малой тепловой емкостью ($n c_f^o$) и способностью переносить тепло конвекцией. Замена в исходных уравнениях функций концентраций c и c_θ на температурные функции T и T_θ , отношения D_M/n_0 — на коэффициент температуропроводности блока a_θ , параметра n_0 — на отношение c_θ^o/c_f^o , λ_M и α_M — на коэффициенты теплообмена $\lambda_T = S_\theta^2 a_\theta (c_\theta^o/c_f^o)^2$ и $\alpha_T \approx S_\theta^2 a_\theta$ делает постановку задачи массопереноса формально эквивалентной тепловому воздействию на трещиноватый или трещиновато-пористый пласт.

Однако в трещиновато-пористых средах временные границы применимости различных расчетных схем для процессов теплопереноса окажутся резко сдвинутыми — по сравнению с массопереносом; для оценки этих границ можно воспользоваться теми же абсолютными значения-

ми безразмерных критериев (3.32), (3.43) и (3.46), в которых для случая теплопереноса необходимо заменить значение D_M/n_0 на a_6 (или параметр α_M на α_T). В частности, из этих критериев следует, что временные диапазоны применимости расчетной схемы сосредоточенной емкости и предельной асимптотической схемы резко расширяются, а для схемы неограниченной емкости, наоборот, сужаются. Поэтому совместное изучение процессов тепло- и массопереноса в подземных водах позволяет в одних и тех же гидрогеологических условиях и, более того, в пределах одних и тех же временных интервалов оперировать различными предельными решениями переноса. Это важное обстоятельство должно учитываться при планировании и постановке экспериментальных работ.

При исследовании процессов массопереноса в трещиновато-пористых породах используются решения относительно концентрации вещества в трещинах. Однако при анализе данных теплового воздействия на пласт очень часто основной объем информации приходится на пьезометры, температура воды в которых может изменяться под влиянием кондуктивного теплообмена между пластом и скважиной по боковой поверхности ее ствола. Поэтому, если возможно заметное различие в температуре трещинных вод (T) и породных блоков (T_6), то при интерпретации опытных данных могут представлять интерес и решения, записанные относительно средней температуры блоков.

3.2.4. Некоторые обобщенные решения и их анализ

Здесь мы отойдем от простейшей одномерной постановки задачи переноса в трещиновато-пористых средах, а

также от предпосылки об идеальном вытеснении растворов по трещинам.

Если двумерность миграционных потоков обусловлена плановой деформацией фильтрационной сетки, то развитие решения (3.31) для расчетной схемы неограниченной емкости дает:

$$\bar{c}(t, t_0) = \operatorname{erfc} \left(\frac{\lambda_M^{1/2} t_0}{2n (t - t_0)^{1/2}} \right), \quad (3.47)$$

а в случае решения (3.39) для расчетной схемы сосредоточенной емкости:

$$\bar{c}(t, t_0) = J \left[\frac{\alpha_M n_0 t}{n}, \alpha_M (t - t_0) \right], \quad (3.48)$$

где t_0 — характерное время движения частиц вдоль линии тока $\Psi = \Psi(x, y)$ (находится из аналитического или численного решения гидродинамической задачи), причем $0 < \bar{c} \leq 1$ в области $t > t_0$ и $\bar{c} = 0$ при $t \leq t_0$.

Приведенные в разделе 3.2.1 решения допускают обобщение также на плановые двумерные модели с поперечной дисперсией. Так, в одномерном фильтрационном поле, пренебрегая продольной дисперсией, имеем:

$$c(y, t, t_0) = \bar{c}_i(t, t_0) c(y, t_0), \quad (3.49)$$

где $c(y, t, t_0)$ и $c(y, t)$ — решения задачи двумерного рассеяния, соответственно, в трещиновато-пористом и эквивалентном гомогенном пласте (для простейших форм миграционных потоков выражение для $c(y, t_0)$ дается обобщенной формулой (2.29)). $\bar{c}_i(t, t_0)$ — функция времени, учитывающая кинетику обмена между трещинами и блоками, которая для предельных расчетных схем — неограниченной и сосредоточенной емкости — определяется решениями (3.31) и (3.39). Таким образом, время стабилизации значений кон-

центрации за фронтом переноса может быть довольно длительным — в отличие от аналогичного случая для гомогенного пласта (разд. 2.3).

Для учета микродисперсии в трещинах гетерогенного пласта целесообразно представление решений в интегральной форме [12]:

$$\bar{c}(t) = \int_0^t \frac{\partial \bar{c}'(\theta)}{\partial \theta} \operatorname{erfc} \left(\frac{\lambda_M^{1/2} \theta}{2n(t-\theta)^{1/2}} \right) d\theta \quad (3.50)$$

— для расчетной схемы неограниченной емкости,

$$\bar{c}(t) = \int_0^t \frac{\partial \bar{c}'(\theta)}{\partial \theta} J \left[\frac{\alpha_M n_o \theta}{n}, \alpha_M(t-\theta) \right] d\theta \quad (3.51)$$

— для расчетной схемы сосредоточенной емкости; здесь $c'(\theta)$ — решение для эквивалентного гомогенного пласта, а функция $J(\eta\theta, \tau\theta)$ определяется согласно формуле (3.11).

Результаты численных расчетов по формуле (3.50), в которой подинтегральная производная определялась из решения (2.10), представлены на рис. 3.5. На этот же график нанесены кривые, отвечающие решению одномерной микродисперсии (2.10). Видно, что гидродисперсия по трещинам приводит к дополнительному рассеянию вещества в пласте, ускоряя транспортировку его в малых концентрациях и замедляет появление высоких концентраций; в результате решение (3.31) для идеального вытеснения в трещинах дает заметно заниженные концентрации на переднем фронте индикаторной волны. Однако с увеличением масштаба области переноса роль микродисперсии заметно падает; незначительно и ее влияние на конечные участки индикаторных графиков, отвечающие длительному взаимодействию трещин и блоков. В целом, гидродисперсия по трещинам обычно может иметь существенное значение в масштабе локальных экспериментов.

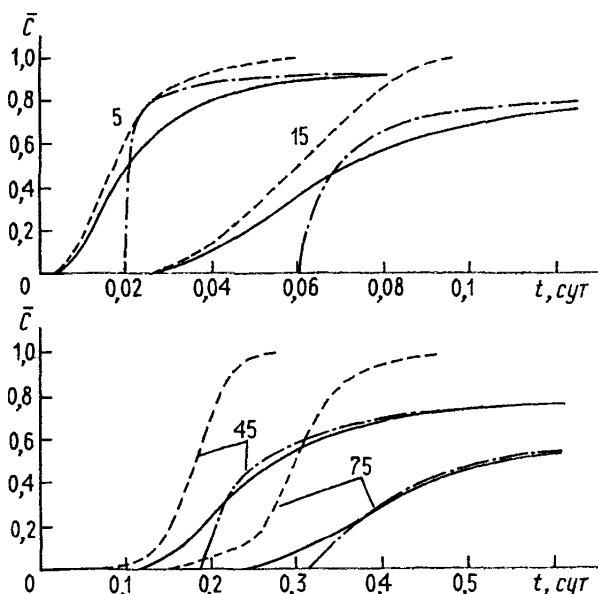


Рис. 3.5. Результаты сравнения предельных решений (2.10) - пунктирные линии - и (3.31) - штрих-пунктирные линии - с точным решением (3.50) - сплошные линии - задачи плоскопараллельного массопереноса в трещиновато-пористом пласте;

исходные данные: $v=2,5$ м/сут, $n=0,01$, $\delta_L=1$ м; $\lambda_M=2,25 \cdot 10^{-4}$ сут $^{-1}$; шифры кривых - координаты расчетных точек x , м

3.3. Анализ миграции в неупорядоченно-неоднородных системах на базе стохастических моделей макродисперсии

3.3.1. Общие представления о стохастических моделях

Для рассматриваемых здесь комплексов пород характерно наличие пропластков, линз и других включе-

ний с различной геометрией и проницаемостью, а также зон неоднородности по характеру трещиноватости, случайным образом распространенных по площади и в разрезе. О масштабах макродисперсии в водоносных системах неупорядоченного строения можно судить по приведенным в ряде работ [3,9,20,27 и др.] результатам оценки в полевых условиях* параметра δ_L^* — показателя продольного рассеяния (эффективный гетерогенный аналог микродисперсивности δ_L в однородных породах). По данным локальных трассерных экспериментов значения параметра δ_L^* составляли десятки сантиметров и первые метры, а значения, рассчитанные по результатам обработки опытно-эксплуатационных наблюдений, нередко достигали десятков метров. Эти данные свидетельствуют о существенном различии между масштабами продольной макро- и микродисперсии (см. разд. 1.1.3 и 2.2); аналогично возрастают и расчетные значения показателей поперечного рассеяния.

При характерных для рассматриваемых условий значительных колебаниях геометрических и фильтрационных показателей отдельных элементов водоносного комплекса, возможности описания процессов переноса на основе традиционных, статистически усредненных расчетных схем весьма ограничены. Применение в этих условиях детерминированных моделей требует нереально большого объема исходной информации, конкретизирующей миграционные и фильтрационные параметры в пределах всей области, на которую распространяется прогноз. Все это привело к широкому анализу миграции в неупорядочно нео-

* Данные натурных миграционных исследований обычно интерпретировались в рамках простейшей асимптотической (диффузионной) расчетной схемы.

днородных комплексах в рамках стохастического подхода.

Стохастические модели используются для анализа массопереноса как в пористых, так и в трещиноватых коллекторах, для которых характерно наличие гидравлически взаимосвязанных зон с различной геометрией и проницаемостью. Они получили название от применяемых для описания изменчивости фильтрационных свойств пород стохастических процедур (методов, подходов), элементы которых используются также для решения и анализа соответствующих краевых задач массопереноса.

Стохастический подход предполагает представление гидравлической проводимости или коэффициента фильтрации (k) пласта в виде случайной пространственно коррелированной функции, для которой, как правило, принимается логнормальный закон распределения ($Y \equiv \ln k$). В такого рода стохастически описываемых системах изменчивость проницаемости характеризуется соответствующей ковариационной функцией, которая в большинстве работ принимается экспоненциально затухающей и в общем трехмерном варианте может быть представлена в виде :

$$\text{cov}_Y(\bar{S}) = \sigma_Y^2 \exp \left[- \left(\frac{S_1^2}{l_1^2} + \frac{S_2^2}{l_2^2} + \frac{S_3^2}{l_3^2} \right)^{1/2} \right], \quad (3.52)$$

где $\bar{S}$ — некоторый пространственный вектор (S_1, S_2 и S_3 — его компоненты), l_1, l_2 и l_3 — корреляционные масштабы проницаемости — в горизонтальной плоскости ($l_1 \equiv l_x, l_2 \equiv l_y$) и в вертикальном направлении ($l_3 \equiv l_z$) (для

* Не стоит придавать этой функции универсальный характер: в ряде задач она может приводить к качественно неверным выводам.

изотропной среды $l_x = l_y = l_z = l_k$); σ_y^2 — среднеквадратичное отклонение.

В таком, достаточно типовом для современных исследований, подходе заложено довольно много предположений. Во-первых, поле проницаемости считается стационарным в стохастическом смысле, — ощутимый тренд в нем отсутствует и влияние границ не проявляется, т.е. значение корреляционной функции зависит только от расстояния между точками, но не от их положения в пределах поля; более того, оно не зависит и от направленности соединяющего их вектора (т.наз. стационарное поле второго рода). Главное же, считается справедливой предпосылка эргодичности, согласно которой единственная реализация случайного поля (в нашем случае — конкретная водоносная система) является представительной для всего ансамбля его возможных реализаций. Наконец, при этом молчаливо предполагается достаточная представительность сделанной выборки (в нашем случае — результатов опробований проницаемости). Вряд ли нужно доказывать, что совокупность всех этих предпосылок делает конечную модель достаточно сомнительным эквивалентом реальных геологических сред; более того, в концептуальном плане такая модель вообще не может быть проверена из-за базового требования эргодичности. О том, что предпосылка эргодичности отнюдь не безупречна, свидетельствуют и некоторые специальные исследования [36]. К тому же, о ней имеет смысл говорить лишь при выполнении достаточно жестких требований касательно масштабов изучаемой области; в частности, ясно, что применительно к нашим задачам необходимо, как минимум, соблюдение условий сплошности среды. Например, показано, что предпосылка эргодичности может выполняться лишь для достаточно большого ореола, когда различные его части «опробуют» все распределение

скоростей фильтрации в *каждой* реализации, и осреднение ансамбля реализаций для одной частицы можно заменить пространственным осреднением по ансамблю частиц в одной реализации [16]. С другой стороны, предпосылка стационарности недопустима, если масштабы корреляции сопоставимы с масштабом области. По всем этим причинам, результаты применения стохастических моделей в гидрогеологии, в лучшем варианте, должны восприниматься лишь как отражение возможных качественных тенденций развития миграционного процесса в неоднородных средах.

Стохастические модели подразделяются на аналитические и численные. Аналитические решения основываются на линеаризации базовых стохастических моделей с использованием спектральных, пертурбационных и комбинированных спектрально-пертурбационных методов. Они обычно имеют дело с описанием транспорта инертного вещества в условиях квазиодномерного стационарного фильтрационного потока в неограниченной среде, где коэффициент фильтрации представлен стационарной нормально распределенной функцией со сравнительно малой статистической дисперсией (ориентировочно, при коэффициенте вариации менее 0,5-1,0). Решения соответствующих уравнений даются в терминах статистических моментов для поля скоростей и концентраций^{**}, которые включают стохастические параметры среды. Они могут быть использованы для сопоставления с моментами классических уравнений конвективной дисперсии, что дает основание для анализа поведения коэффициентов эффективной макродисперсии в различных пространственно-временных диапазонах. Собственно результаты такого анализа и рассматриваются в настоящем разделе.

* Характерно, например, что результаты, получаемые в различных модельных экспериментах, дают заметный разброс даже для эквивалентных статистических выборок, причем фиксируемые распределения малых значений относительной концентрации оказываются практически непредсказуемыми.

** Чаше всего ограничиваются моментами второго порядка, что упускает нелинейные эффекты.

Свои специфику и возможности имеют численные методы исследования массопереноса в стохастических средах, о чем речь пойдет в разд. 8.1.2.

3.3.2. Анализ принципиальных результатов изучения трехмерной макродисперсии в неоднородных средах

Как уже отмечалось, стохастическое представление среды позволяет отразить в расчетных моделях миграции случайные флуктуации поля скоростей фильтрации, обеспечивающие не только дисперсию концентрационных фронтов, но и конвективное насыщение веществом отдельных элементов (зон) пласта. Тем самым эффективно учитывается реальная трехмерность фильтрационного потока. Очевидно, в общем случае относительная значимость конвекции и дисперсии во внутривластовом обмене контролируется не только скоростью, но и соотношением характерных масштабов — показателей l_x , l_y , l_z , с одной стороны, и δ_L , δ_T , с другой.

Так, например, анализ трехмерных стохастических моделей [21,28,29] показывает, что при $l_z \ll l_x(l_y)$ и $\delta_{T_z} l_x \ll l_z^2$ происходит их вырождение в модели идеально стратифицированных сред, в которых преобладает дисперсионный межслоевой обмен, а конвекция лишь определяет перенос вещества по напластованию. В этом случае для описания начальной и конечной стадий процесса может использоваться диффузионно-конвективная модель с параметрами, определяемыми согласно (3.19) при (3.23) и (3.20) при (3.26).

Однако, как уже отмечалось, модель идеально стратифицированной водоносной системы отвечает реальности в относительно редких случаях; она может приводить к весьма крайним выводам и качественно неверным обобщениям. Именно поэтому представляет ин-

интерес асимптотический анализ более общего трехмерного процесса — в стохастической среде с умеренной профильной анизотропией. При $t \gg l_x n/v$ (скажем, $vt/(l_x n) > 10+20$) коэффициент продольной макродисперсии стремится к постоянному значению, имеющему порядок

$$D_L^* \approx \sigma_Y^2 v l_x, \quad (3.53)$$

а коэффициенты поперечной макродисперсии определяются значениями:

$$D_{T,y,z} \approx D_M + \delta_{T,y,z} v + \sigma_Y^2 l_x^2 / 2t, \quad (3.54)$$

приближающимися, как видно, при $t \gg \frac{\sigma_Y^2 l_x^2}{2D_M}$ к коэффициенту поперечной (локальной) микродисперсии.

Оценим основные особенности выявленных асимптотик, которые, строго говоря, справедливы при выполнении дополнительного условия $Pe_l = v l_x / D_L \gg 1^*$.

Во-первых, эффекты рассеяния вещества в продольном направлении определяются исключительно показателями ковариационных функций и не зависят от локальных значений $\delta_L(\delta_T)$; это говорит о том, что процесс всецело контролируется флуктуацией поля скоростей фильтрации. Данный результат принципиально отличается от оценок, полученных для стратифицированных сред — см. формулы (3.19), (3.20), из которых следует $\delta_L^* \sim m^2 / \delta_T$ (или $\delta_L^* \sim l_z^2 / \delta_T$). Отсюда, в свою очередь, видно, что пренебрежение пространственным характером распределения внутрипластовых скоростей фильтрации приводит к резкому (в десятки и более раз) завышению

* Оно удовлетворяет широкому кругу прогнозных задач, за исключением, может быть, задач миграции вещества в зоне весьма замедленного водообмена.

истинных значений коэффициента продольной макродисперсии.

Во-вторых, в отличие от продольной дисперсии, поперечное рассеяние контролируется при больших временах процессами микродисперсии и макрофлуктуациями скорости, но не абсолютными значениями последней. Соответственно, оно идет наиболее интенсивно в том направлении, по которому масштаб корреляции проницаемости минимален [28]. В предельной асимптотике обращает на себя внимание микроскопический уровень проявления поперечной дисперсии, показатели которой со временем все меньше отличаются от локальной константы δ_T и все более зависят от стохастических свойств среды.

Достижению рассмотренной выше предельной асимптотики предшествует длительный период нестационарного поведения функции $D = D(t)$, описанный в работах [17, 28]. Так, на начальных этапах миграции ($vt/(nl_x) < 1$) абсолютные значения компонент D_x линейно растут во времени и пропорциональны квадрату скорости фильтрации, т.е. ведут себя качественно подобно детерминированной модели — см. (3.19) при $A_n = \frac{8\sigma_Y^2}{15}$ (для составляющих D_T $A_n = \frac{\sigma_Y^2}{15}$).

По мере расширения пространственно-временного диапазона миграции, величина D_x монотонно стремится к своему асимптотическому пределу D_L^* . Поведение функции D_T сложнее: со временем (примерно при $\tau = vt/(l_x n) \approx 5 \div 10$) она достигает своего максимума, а затем ее рост сменяется спадом, темп которого при $\tau = vt/(l_x n)$

* Грубо говоря, поток вещества «предпочитает» обходить слабопроницаемые включения по кратчайшим траекториям, отвечающим минимальным размерам включений.

>> 1 обратно пропорционален времени — см. (3.54). Это значит, что поперечная макродисперсия доминирует в формировании объемных потоков вещества лишь на участках, прилегающих к концентрационным источникам. На больших расстояниях процесс, как уже отмечалось, контролируется локальными значениями δ_T и молекулярной диффузией (D_M). Таким образом, со временем следует ожидать замедления динамики боковых границ ореолов рассеяния: рост зоны смешения в направлениях, ортогональных средней скорости фильтрации, происходит крайне медленно. Это, однако, не означает, что боковой отток вещества пренебрежимо мал: из-за большой площади боковой поверхности ореола через нее при этом может мигрировать основная доля загрязнений. Следует также еще раз подчеркнуть, что асимптотическое поведение поперечной дисперсии достигается очень медленно и на практике весь процесс может протекать в переходной области. Описание его тогда затрудняется еще и тем, что в соответствующих временных интервалах главные направления тензоров макродисперсии и скорости фильтрации существенно различны, хотя в асимптотике они вновь совпадают. В то же время, отношение коэффициентов макродисперсии D_x/D_y остается при достаточно больших значениях Pe_l более-менее постоянным, причем достигается это намного раньше, нежели асимптотическое значение D_L^* [35].

Если подавляющее число работ по стохастическому моделированию имели дело с неоднородностью какого-то одного масштаба, то в последнее время все чаще появляются исследования, выходящие за рамки этого ограничения.

Так, в работе [33] изучалась бимодальная формация, в которой различие двух уровней неоднородности не столь велико, чтобы влиянием изменчивости проницаемости на одном из них можно было пренебречь. В такой ситуации коэффициенты дисперсии оказываются сложным, нелинейным образом зависящими от вариаций

проницаемости на обоих уровнях, причем зависимости эти неаддитивны; в частности, это относится и к асимптотическим значениям дисперсивности. Характерно, что по мере роста масштаба переноса неоднородность более крупного уровня проявляется в поперечной дисперсии гораздо раньше, чем в продольной; на промежуточных этапах миграции это может приводить к существенному сближению соответствующих коэффициентов дисперсии — в сравнении с асимптотическими значениями для двух базовых распределений.

Развивая то же направление исследований, авторы работы [30] рассматривают стохастическую среду с широким спектром уровней неоднородности. При этом анализируется вклад в дисперсию средней концентрации (по ансамблю реализаций) со стороны двух основных факторов — 1) роста ореола из-за мелкомасштабных вариаций скорости и 2) изменчивости позиции центра масс ореола (по разным реализациям) вследствие крупномасштабных ее вариаций. Роль второго фактора особенно важна именно в средах с разнородной неоднородностью. Между тем, он имеет отношение именно к средней концентрации по ансамблю реализаций (а не по каждой конкретной реализации) и представляет поэтому ограниченный интерес: на самом деле, реальный ореол рассеивается только за счет вариаций скорости в масштабе, меньшем его размеров, так что проявление вариаций более крупного масштаба вызывают лишь «меландрирование» ореола и их следует исключать из оценок дисперсивности. Иначе говоря, все предшествующие исследования, не учитывавшие соответствующие требования к размеру ореола, резко завышали расчетную дисперсивность. Важно подчеркнуть, что в такой трактовке дисперсивность оказывается зависящей, в первую очередь, от поперечного размера ореола (b_T). При этом значения δ_L растут до определенного предела, зависящего от размера ореола (точнее от его отношения к соответствующему максимальному масштабу корреляции функции проницаемости* — b_T/λ_T), а значения δ_T сначала увеличиваются, а затем асимптотически стремятся к нулю. Однако на предшествующих этапах развития ореола расчетные значения поперечной дисперсивности растут, в зависимости от его размера, намного быстрее, чем продольной (хотя и остаются много

* Предполагается, что последний, в свою очередь, ограничен, как минимум, масштабами модели L_T ($L_T \gg \lambda_T$, как минимум, $L_T > 10 \lambda_T$).

меньшими по абсолютным величинам). Можно поэтому предположить, что многие оценки по полевым замерам, касающиеся отношения δ_{T_z}/δ_L для типичных профильно-анизотропных сред, занижены, так как они были получены по ореолам слишком узкого профиля — в сравнении с вертикальным масштабом корреляции проницаемости.

Важно, что изложенные в этом разделе результаты сравнительно недавних исследований получены на трехмерных моделях, что придает им гораздо большее практическое звучание. В целом, трехмерные модели дают более «простое» и реальное распределение концентраций, нежели двумерные: последние сильно завышают продольную дисперсию, приуменьшая роль поперечной, и часто дают гипертрофированный разброс концентраций вблизи фронта.

Это, однако, не означает, что рассмотренные результаты изучения макродисперсии на трехмерных моделях безупречны, — даже в рамках тех существенных ограничений, которые налагаются на стохастическое моделирование миграционных процессов в целом (см. выше). И дело здесь, прежде всего, в недоучете приведенными результатами мощных диссипативных эффектов, обусловленных молекулярной диффузией: последняя не включалась рассмотренными исследованиями в исходную модель с целью упрощения математического анализа. Более того, численные стохастические модели (разд. 8.1) макронеоднородных сред очень часто пренебрегают и другим диссипативным механизмом — локальной дисперсией, тем самым еще более огрубляя результат.

Частным подтверждением важности диффузионного рассеяния в макродисперсионном переносе могут служить результаты работы [29]. В ней показано, что при низких средних скоростях фильтрации

и, когда выполняется критериальное условие $Pe_l^0 = v l_x / D_M < 1$, асимптотические (при $t \rightarrow \infty$) значения всех трех компонент коэффициента макродисперсии прямо пропорциональны безразмерному комплексу Pe_l^0 и линейно связаны с квадратом средней скорости фильтрации.

В последнее время весьма обстоятельный анализ важной роли диссипативных эффектов, обусловленных локальной дисперсией (без явного выделения молекулярной диффузии) в стохастически неоднородных средах, был дан в работе [24], к которой мы еще вернемся в разд. 10.4. Пока же отметим лишь, что авторы убедительно подчеркивают опасность исключения «микромасштабных» процессов из модели макронеоднородной среды или же их представления на уровне случайных составляющих макропроцессов.

Еще одним серьезным упущением приведенных результатов является ограничение исходных моделей стационарными, неизменными во времени фильтрационными потоками. Поэтому расчетное поперечное рассеяние, сильно реагирующее на временные флуктуации градиента, оказывается резко заниженным по сравнению с реально наблюдаемым; именно так объясняют, в частности, несоответствие данных наблюдений и стохастических оценок на полигоне Борден [23].

В недавно опубликованной работе Г. Дагана с соавторами* получено стохастическое описание влияния нео-

* Свой вклад здесь вносит, очевидно, и резкое различие показателей профильной анизотропии на микро- и макроуровне.

** (G.Dagan, A.Bellin, Y.Rubin. Lagrangian Analysis of Transport in Heterogeneous Formations under Transient Flow Conditions, «Water Resources Research», 1996, v. 32, №4, p.p. 891-899).

днородности и временных флуктуаций на поперечное рассеяние. В этом случае расчетная поперечная дисперсивность включает дополнительный компонент, примерно пропорциональный квадрату амплитуды временных колебаний траекторий фильтрации (в направлении, перпендикулярном генеральному вектору скорости) и убывающий с ростом периода колебаний. При реально наблюдаемых амплитудах колебаний напора порядка метров этот компонент становится доминирующим в расчетной дисперсивности: в ней возникает временной тренд, так что она может возрастать на порядковые величины в сравнении с дисперсивностью, отвечающей стационарным потокам (напомним, что согласно традиционным стохастическим моделям, последние ассимптотически стремятся к локальной дисперсивности).

Завершив пока этими важными дополнениями анализ наиболее принципиальных результатов, полученных в рамках стохастических моделей макродисперсии, рассмотрим теперь некоторые частные проблемы миграции в стохастически макронеоднородных средах.

3.3.3. Стохастический анализ некоторых частных задач миграции в макронеоднородных средах

3.3.3.1. Макродисперсия при площадной инфильтрации

Специфически проявляются макродисперсионные свойства водоносных систем в условиях площадного инфильтрационного питания. Этот аспект проблемы применительно к плановой двухмерной задаче ($l_x = l_y = l_k$), в которой пренебрегали вертикальной компонентой скорости v_z , наведенной инфильтрацией, исследовался в

работе [32]. Полученные результаты можно интерпретировать опять-таки в терминах изменчивости показателей D_x и D_y :

$$D_x(D_y) \equiv D_{x(y)}(\tau) = e^{\beta\tau} D_{x(y)}^0(\tau'), \quad (3.55)$$

где $D_{x(y)}^0$ — коэффициент продольной (поперечной) макродисперсии без учета влияния инфильтрации, $\tau = v_o t / (l_k n)$, $\tau' = (e^{\beta\tau} - 1) / \beta$, v_o — скорость фильтрации в начальном сечении ($x = x_o$, где поддерживается граничное условие первого рода $H = H_o = \text{const}$), определяемая здесь

гидравлическим градиентом I_o , $\beta = \frac{\varepsilon l_k}{T_G I_o}$ (ε — величина

инфильтрации, T_G — средне-геометрическое значение проводимости); считается, что β достаточно малая величина ($\beta \ll 1$). Параметр $\tau = v_o t / (n l_k)$ характеризует безразмерное время прохождения мигрирующей частицей одного элемента неоднородности с характерной длиной l_k , а параметр τ' , положив $T_G I_o = q_o \approx m v_o$, можно записать в виде $\tau' = \frac{\tau}{\varepsilon^* t} (e^{\varepsilon^* t} - 1)$ — т.е. он отражает изме-

нение соответствующего времени миграции за счет инфильтрационного питания (в этом случае $\varepsilon^* = \varepsilon / m n$ — безразмерный параметр, характеризующий вклад инфильтрации в разбавление пластовых вод — см. также разд. 10.2.2).

Как и следовало ожидать, при малых временах и масштабах переноса, ориентировочно при $\tau < 1 \div 2$ имеет место линейный рост коэффициентов $D_x(\tau)$ и $D_y(\tau)$, подчиняющийся приведенным выше (разд. 3.3.2) закономерностям. Однако по мере развития процесса наблюдается все большее отклонение от установленных соотношений. Прежде всего, коэффициент D_x теряет свою асимптотику (3.53): он неограниченно возрастает с ростом

безразмерного времени процесса τ , подчиняясь зависимости вида [32]:

$$D_x = D_x(\tau) \sigma_Y^2 v_o l_k e^{\beta \tau}, \quad (3.56)$$

Данную тенденцию можно связать и с пространственным масштабом (длиной L) переноса:

$$\begin{aligned} D_x \equiv D_x(L) &= \sigma_Y^2 \left[1 + \frac{\beta L(t)}{l_k} \right] v_o l_k \approx \\ &\approx \sigma_Y^2 \left[1 + \frac{q_\varepsilon(t)}{q_o} \right] v_o l_k, \end{aligned} \quad (3.56,a)$$

где q_ε — инфильтрационное питание в интервале $L(t)$.

Из последней формулы следует, что «неасимптотичность» процесса тем выше, чем выше доля инфильтрационного питания в формировании общего расхода фильтрационного потока.

Что касается поперечной макродисперсии, то согласно формулам (3.55) и (3.54), величина коэффициента D_y равна при больших значениях времени

$$\begin{aligned} D_y(\tau) &= \frac{\sigma_Y^2 l_k v_o}{2 \tau'} e^{\beta \tau} = \frac{\sigma_Y^2 l_k v_o}{2} \frac{e^{\beta \tau}}{e^{\beta \tau} - 1} \beta \approx \\ &\approx \frac{\sigma_Y^2 l_k^2 \varepsilon}{2m} \frac{e^{\beta \tau}}{e^{\beta \tau} - 1}. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Иначе говоря, в отличие от случая $\varepsilon = 0$, коэффициент поперечной макродисперсии стремится к ненулевому асимптотическому значению

$$D_T^* = \frac{\sigma_Y^2 l_k^2 \varepsilon}{2m} = \frac{\sigma_Y^2 l_k^2 n \varepsilon^*}{2}. \quad (3.58)$$

Подобное поведение системы, находящее отражение в параметрах D_x и D_y , понятно и в свете простых качественных рассуждений: инфильтрационная вода идет на разбавление вещества в пределах переходной зоны, не давая стабилизироваться показателю продольной дисперсии и внося дополнительный вклад в поперечное рассеяние. При наличии инфильтрации миграционный процесс может иметь сильно дисперсивный характер даже в гомогенных средах, которые обычно рассматриваются в рамках схемы поршневого вытеснения.

Приведенные результаты получены в рамках анализа плановой модели при предпосылке Дюпюи о нулевой скорости фильтрации в вертикальном направлении ($v_z = 0$). Поэтому они могут претерпеть изменения в случае трехмерного фильтрационного потока, где компонента v_z наводится инфильтрационным питанием и может оказаться важным фактором межслоевого обмена веществом.

О том, что такая направленность процесса возможна, свидетельствует анализ соответствующего решения для стратифицированного пласта ($l_x, l_y \gg l_z$, разд. 3.1.2) [26].

3.3.3.2. Макродисперсия при плотностной конвекции

Эффекты рассеяния могут резко интенсифицироваться неустойчивостью вытеснения за счет различий в плотности-вязкости флюидов^{**}.

Так, в работе [37] рассмотрены 4 возможные ситуации для контакта двух жидкостей $\rho_1 < \rho_2, \mu_1 < \mu_2$, что условно отвечает пре-

* В частности, для поперечной профильной дисперсии важны временные его флуктуации.

** О постановке такой задачи говорилось в разд. 1.2.2

сной и соленой воде) в восходящем или нисходящем потоке через стохастически неоднородную среду:

1) если соленая вода находится сверху, и поток ориентирован вверх, то контрасты и по ρ , и по μ неблагоприятны для стабилизации, — условно говоря, это отвечает очень большой дисперсии;

2) при обратном положении пресных и соленых вод эти контрасты способствуют стабилизации и сокращают макродисперсию тем в большей степени, чем меньше расход потока, — например, для условий вторжения морской воды на побережье дисперсия сокращается на порядок;

3) если соленая вода находится сверху, и поток ориентирован вниз, то контрасты по ρ усиливают неустойчивость, а контрасты по μ способствуют стабилизации; чаще, все же, при не слишком больших расходах потока, это — нестабильный вариант;

4) при обратном расположении пресных и соленых вод контрасты по ρ и μ «работают» противоположно предыдущему случаю; при малых расходах доминируют плотностные эффекты и это обычно стабильный вариант, а при больших (доминируют вязкостные эффекты) — нестабильный.

В изотропных средах эти эффекты заметны уже при разности плотностей порядка 0,25 г/л.

Таким образом, суммарное рассеяние зависит от свойств не только массива, но и жидкости, причем с ростом плотностного градиента значимость стохастической фильтрационной неоднородности падает. Что же касается зависимости расчетной дисперсивности от отношения вязкостей, то она отражает степень корреляции изменчивости проницаемости в масштабе смещения (L). С ростом относительного масштаба корреляции (l_k/L) роль собственно дисперсии возрастает, а развитие «языков», связанных с разницей вязкости, ослабевает. При стабильном вытеснении на конце более вязкого «языка» вытесняющей жидкости давление меньше, чем в окружающей (менее вязкой) жидкости, и последняя перемещается в сторону «языка», замедляя его развитие. В том же направлении действует дисперсия, уменьшающая

контраст вязкостей. В результате «языков» становится меньше, размеры их достигают некоторого предела и они движутся с примерно постоянной скоростью, так же как и фронт концентрации, осредненной поперек потока. Чем больше скорость миграции (т.е. чем меньше дисперсия зависит от диффузии), тем слабее процесс образования «языков» реагирует на скорость.

В работе [38] предлагается оценивать суммарное воздействие контрастов в плотности и вязкости через расчетный коэффициент макродисперсии (замещающий коэффициент дисперсии в уравнении переноса):

$$\delta_c^* = \frac{\sigma_Y^2 l_k}{\gamma^2} e^{-2a}, \quad (3.59)$$

где δ_c^* — расчетная макродисперсность,

$$a = \beta G_c L_c \left(\frac{1}{\gamma} + \frac{\partial \rho_c}{\partial \mu_c} \frac{k_c g}{v_c} \right),$$

$$\beta = d \left[\ln \left(\frac{1}{\mu} \right) \right] / dc$$

($\beta \approx 2$ для NaCl); G_c — средний градиент концентрации, L_c — среднее смещение; σ_Y — вариация $\lg k$, $\gamma = 1 + \sigma_Y^2/6$; μ_c — средняя вязкость; ρ_c — средняя плотность; $\rho_c = \rho_o \exp [b (\bar{c} - \bar{c}_o)]$; $b = d [\ln \rho] / d c$ ($b = 0,7$ для NaCl), c_o и ρ_o — концентрация и плотность исходного раствора; k_c — средняя проницаемость.

Следовательно, δ_c^* зависит и от c , и от G_c (в частности, от знака G_c относительно направления потока), т.е. является фактором нелинейности. В нестабильных случаях, по мере увеличения масштаба переноса L_c , δ_c^* растет с ростом c и падением скорости, а в стабильных — наоборот.

В целом, роль упомянутых эффектов усиливается по мере увеличения смещения фронта по сравнению с характерными размерами макронеоднородности. Впрочем, необходимо отметить, что все приведенное рассмотрение годится для больших пространственно-временных масштабов и при сравнительно малых контрастах плотности—вязкости, учитываемых лишь через закон Дарси (но не в уравнениях неразрывности и переноса).

До сих пор речь шла, по сути дела, о несколько искусственной картине погружения ореола в субвертикальном потоке. Существенно сложнее эти эффекты в более важном для практики случае проникновения инородного флюида в субгоризонтальный фильтрационный поток, где значительную роль для стабильности ореола играет поперечная профильная дисперсия. При сравнительно малой разности плотностей, она быстро выравнивает их и делает ореол стабильным уже при малых его поперечных размерах. При больших значениях $\Delta\rho$ возможны два варианта:

1) если поперечная макродисперсивность $\delta_{T_z}^*$ велика, то она сравнительно быстро приводит к увеличению поперечных размеров ореола и, опять-таки, делает процесс стабильным;

2) при относительно малых значениях $\delta_{T_z}^*$ поперечная макродисперсия ускоряет проявления неустойчивости ореола.

В целом, повторим, эффекты, наведенные плотностной конвекцией, играют важнейшую роль в процессах смещения и рассеяния.

3.4. Макродисперсия в стохастически неоднородных средах с двойной пористостью

К рассматриваемому типу сред относятся трещиновато-пористые породы, описание миграции вещества в которых осложнено неоднородностью (пространственной изменчивостью) их фильтрационных свойств. Хотя такого рода системы широко представлены в природе, их исследованию посвящено ограниченное число работ. Обычно авторы предпочитают анализировать один из рассмотренных выше предельных вариантов: неоднородная среда со стохастически распределенными параметрами проницаемости (разд. 3.3.2), но однородная по емкости, или, наоборот, среда с двойной емкостью, однородная по проницаемости (разд. 3.2).

Один из примеров более широкого подхода отражен в статье [15], автор которой анализирует упрощенную модель среды с двойной емкостью применительно к единичной трещине с переменной (заданной с помощью параметров ковариационной функции) проводимостью. Выводы работы [15] свидетельствуют о существенном сглаживании рассеяния, обусловленного вариациями локальных скоростей фильтрации, кинетикой обмена веществом между трещиной и пористой матрицей (емкость последней при этом принималась неограниченной).

Полезной — в свете рассматриваемой здесь проблемы — является аналогия с кинетической линейной сорбцией, накладывающейся на перенос в гетерогенном массиве, проницаемость которого допускает стохастическое описание [18]. Так как обе модели — кинетической сорбции (см. далее разд. 5.2.2 и 6.1.1) и диффузионного насыщения породных блоков в регулярном режиме (схема сосредоточенной емкости) — формально подобны, то, следовательно, основные выводы работы [18] могут быть перенесены и на случай миграции в трещиновато-пористых породах.

Для оценки поведения системы в цитируемой работе анализируются пространственные статистические моменты концентрационных распределений, которые дает переносимый фильтрационным потоком ореол вещества. В целом, аналитические выражения, полученные для статистических моментов, и их сравнение с соответствующими зависимостями для массопереноса в породах с гомогенной емкостью, свидетельствуют о сложном характере макродисперсии при такой структуре среды: попытки описать массоперенос в рамках дисперсионной модели требуют введения коэффициентов, сложным образом зависящих от пространственно-временного масштаба процесса. Такое поведение системы наиболее типично в условиях, когда характерное время ее «матричной» релаксации (отвечающее периоду достаточно полного насыщения веществом пористых блоков) $t_M = n/(\alpha_M n_o)$ заметно превышает время прохождения конвективным фронтом расстояния, эквивалентного единичному корреляционному масштабу $t_h = nl_x/v$: $t_M/t_h = v/(l_x \alpha_M n_o) \gg 1$, причем отмеченные особенности проявляются даже при условии выхода на диффузионную асимптотику в эквивалентном гомогенном пласте — $t/t_h \gg 1$.

Вместе с тем, для менее жестких условий, отвечающих противоположному случаю $t_M/t_h \ll 1$, и при одновременном выполнении критерия $t/t_M \gg 1$, система ведет себя подобно гомогенному по емкости пласту с суммарной пористостью $n = n + n_o$, так что эффекты макродисперсии могут быть описаны в рамках традиционных представлений стохастической теории (разд. 3.3.2) посредством включения в расчетные зависимости некоторых дополнительных линейных членов, связанных с коэффициентами α_M и n_o .

Так, базируясь на результатах работы [18], можно показать, что изменчивость продольной макродисперсивности описывается зависимостью

$$\delta_x \equiv \delta_x(\tau) \approx \frac{n_o v}{\alpha_M (n + n_o)^2} + \frac{\sigma_Y^2 l_x}{\tau} (\tau + e^{-\tau} - 1), \quad (3.60)$$

где $\tau = bvt/nl_x$; $b = 1$ при $l_x \gg l_z$ (стратифицированная система), $b = 8/15 \approx 1/2$ при $l_x = l_z$ (изотропный пласт), в диапазон $b = 1 + 1/2$ укладываются анизотропные системы, характеризующиеся параметром $\kappa_l = l_z/l_x < 1$.

Как видно, в предельном варианте, когда одновременно $t/t_M \gg 1$ и $t/t_h \gg 1$, что отвечает существенному превышению времени развития миграционного процесса относительно характерных времен релаксации системы, отмечается стабилизация расчетного параметра продольной макродисперсивности, достигающего предельного значения:

$$\delta_L^* = \frac{n_o v}{\alpha_M (n + n_o)^2} + \sigma_Y^2 l_x \approx \frac{v}{\alpha_M n_o} + \sigma_Y^2 l_x. \quad (3.61)$$

Таким образом, мы пришли к простой сумме двух констант (3.44) и (3.53), первая из которых ответственна за рассеяние, обусловленное кинетикой обмена веществом между трещинами и блоками, а вторая — за дисперсию, связанную с вариациями скоростей фильтрации в гетерогенном по проницаемости пласте.

Отсюда легко оценить вклад каждой из компонент макродисперсии в асимптотическом режиме. Например, выполнение очевидного критерия:

$$\gamma = v (n_o \alpha_M \sigma_Y^2 l_x)^{-1} > 5 \div 10 \quad (3.62)$$

должно свидетельствовать о превалировании рассеяния за счет кинетики обмена между трещинами и пористой матрицей. Последнее условие удовлетворяется для большинства комплексов трещиновато-пористых пород неглубокого залегания с достаточно характерным диапазоном изменения миграционных и структурных параметров: $n = 10^{-3} - 10^{-4}$, $n_o = 0,1 - 0,3$, $10^{-6} < \alpha_M < 10^{-3}$ (сут⁻¹), при умеренных σ_Y^2 и l_x ($\sigma_Y^2 < 2,0$, $l_x = N \cdot 10$ м).

Далее, анализ полученных в работе [18] статистических моментов, в которых находят отражение параметры, ответственные за поперечную дисперсию, показал, что чем выше интенсивность массообмена между трещинами и блоками, тем меньше масштабы поперечного рассеяния.

Как и в случае пород с гомогенной емкостью, при весьма больших временах ($t \gg t_h$) отмечается тенденция к падению расчетных значений δ_y и δ_z , так что, по-видимому, соответствующие асимптотические значения $\delta_{T_y}^*$ и $\delta_{T_z}^*$ будут близки к локальным характеристикам $(D_M + \delta_{T_y(z)})$.

Достаточно тривиальным является вывод о том, что во временных диапазонах: 1) $t \ll t_M$ и 2) $t_M \gg t$ расчетные параметры поперечной макродисперсивности δ_y и δ_z не зависят от внутриблоковой диффузии. Такое поведение системы объясняется тем, что в первом случае поперечное фильтрационное рассеяние, вызванное вариациями проницаемости, не успевает себя сколь-нибудь заметно проявить, а во втором случае — временного масштаба недостаточно для ощутимого проявления диффузионного обмена.

В целом, в большинстве реальных ситуаций, отвечающих длительному загрязнению пород с выраженной двойной пористостью ($n_o \gg n$) и в достаточной степени дезинтегрированных системами трещин, влияние изменчивости проницаемости на макродисперсионные свойства среды является вторичным. Этот вывод сохраняет свою силу даже для сравнительно ограниченных масштабов переноса, когда интенсивность массообмена между трещинами и пористыми блоками максимальна, хотя характер концентрационных распределений будет при этом отличаться от типично дисперсионного.

3.5. Основные выводы теоретического анализа

Широкий спектр возможных масштабных уровней протекания миграционных процессов в гетерогенных средах обычно не укладывается в рамки единой расчетной модели. Отсюда вытекает необходимость в каждом конкретном случае специального доказательства

принципиальной осуществимости перехода от результатов изучения процесса на одном масштабном уровне к другому; в частности, без этого немыслима эффективная постановка опытно-миграционных исследований в гетерогенных средах и, более того, не может считаться обоснованной и сама их целесообразность. Подобное доказательство, в теоретическом плане, должно сводиться к обоснованию возможности экстраполяции параметров, входящих в модели локальных процессов (например, модели интерпретации опытных работ), на региональные условия (прогнозные модели) и к оценке роли возможных масштабных эффектов; последние могут приводить: 1) к последовательному переходу с одного уровня протекания миграционного процесса к другому — по мере роста длины и времени переноса и 2) к резко различающейся чувствительности процесса к одним и тем же его характеристикам на различных этапах его развития. Поэтому важнейшее значение приобретают представления о пространственно-временных диапазонах, контролирующих характерные масштабные уровни переноса.

В этом плане, наиболее интенсивному анализу в зарубежных публикациях последнего времени был подвергнут вопрос о влиянии масштабных эффектов на геометрический показатель механической дисперсии — так называемую дисперсивность, линейно связывающую коэффициент дисперсии со скоростью фильтрации (в западной литературе — с действительной средней скоростью переноса). В анализе использовались как данные полевых экспериментов, так и аналитические или численные методы в рамках стохастических моделей фильтрации и массопереноса. В результате сделан вывод о росте дисперсивности с увеличением длины переноса примерно по линейной зависимости.

Наиболее последовательное развитие этой проблемы можно найти в ряде статей Ш.Ньюмена. В одной из его работ [29] приводится сводный график зависимости дисперсивности от масштаба переноса, построенный по

сравнительно многочисленным опытным данным. Исходя из примерно линейного характера этого графика и с учетом ранее проведенных им аналитических исследований, автор делает обобщенный вывод о соответствии роста дисперсивности последовательной смене масштабов неоднородности фильтрующей среды, носящей, по мнению автора, фрактальный характер.

В этой связи можно заметить, что даже с формальных позиций стохастического моделирования сделанный вывод некорректен. Как правильно отмечает Г. Даган [16], если масштаб неоднородности неограниченно возрастает от одного уровня к другому, то не выполняется основополагающая предпосылка эргодичности (разд. 3.3.1): ореол конечных размеров никак не может тогда «опробовать» представительное распределение неоднородности. В этой ситуации коэффициент микродисперсии оказывается сильно зависящим от начального размера ореола, и уже одно это делает невозможным универсальный закон для дисперсивности.

Следует также уточнить, что применение дисперсивности как параметра среды уже само по себе предполагает справедливость расчетной модели микродисперсии. Между тем, внимательный анализ использованного полевого материала свидетельствует о том, что очень часто авторы имели дело с гетерогенными средами, в которых важнейшее место занимали диффузионные механизмы рассеяния, требовавшие отказа от модели микродисперсии в пользу макродисперсионной модели; иногда в том же направлении действовала и ограниченная сорбция индикатора, в том числе на стенках трещин. В этих условиях рост расчетной дисперсивности следует, несомненно, рассматривать как артефакт, обус-

* Допущение, само по себе, весьма спорное; по крайней мере, полевой материал никак не подтверждает фрактальное строение реальных геологических сред.

ловленный несоответствием расчетной модели характеру среды: для нее дисперсивность вообще не является параметром, имеющим физический смысл.

Многие авторы, несомненно, понимали, а некоторые явно отмечали это обстоятельство, однако, судя по продолжающемуся потоку публикаций, «давление традиции» пока оказывается сильнее. Уже появился ряд работ, в которых предлагаются аналитические решения для случаев дисперсивности, меняющейся по определенным законам. Другие исследователи, для соблюдения корректности выводов, делают априорное допущение о пренебрежимой роли механизма диффузии. В этом варианте, при некоторых дополнительных допущениях о иерархическом характере стохастической фильтрационной неоднородности, можно действительно представить поведение многоуровневой (в смысле ее масштаба) неоднородной среды с помощью модели микродисперсии с переменной дисперсивностью, как это и сделано, например, в некоторых упомянутых работах. Однако реальные геологические эквиваленты такой среды, вероятнее всего, встречаются не часто. Гораздо типичнее иерархически неоднородные гетерогенные среды, в которых дисперсия за счет фильтрационной неоднородности и гетерогенности сочетается с диффузией в относительно слабопроницаемые образования. Описание массопереноса в такой среде с помощью многоуровневой модели макродисперсии, вообще не использующей параметра дисперсивности, будет давать ряд последовательных асимптотик, отвечающих сменяющим друг друга — по мере роста масштаба переноса — уровням неоднородности. Соответственно, если пользоваться дисперсивностью, то линейный график ее зависимости от масштаба переноса придется заменить кривой, имеющей ряд последовательно возрастающих горизонтальных уровней. Вряд ли, однако, в этом есть какой-то практический резон. Физически гораздо более оправданным

здесь окажется использование детерминированно-стохастических моделей, включающих соответствующие детерминированные компоненты в отдельных масштабных диапазонах их инвариантного поведения.

Продолжая разговор о дисперсионных эффектах, стоит, очевидно, кратко остановиться на некоторых стереотипах, связанных с поперечной дисперсией. Так, во многих работах последнего времени настойчиво подчеркивается слабое поперечное (особенно профильное) развитие наблюдаемых ореолов миграции, из чего молчаливо, а подчас и явно делается вывод о малой роли поперечной дисперсии в рассматриваемых условиях. Наряду с известным положением о пренебрежимой значимости продольной микродисперсии при длительной миграции в однородных пористых образованиях, все это создает впечатление о некой второстепенности процессов поперечного рассеяния вещества, по крайней мере в пористых породах. Между тем, уже самые элементарные представления говорят об обратном: чем больше масштаб переноса, тем выше значимость поперечного рассеяния, ибо оно осуществляется через боковую поверхность ореола, возрастающую (при непрерывном поступлении вещества) примерно линейно по мере увеличения длины переноса. К тому же нужно учитывать, что в таком рассеянии участвуют не только собственно дисперсионные (и диффузионные) механизмы, но и флуктуации конвективного поля, плотностная конвекция, а вблизи уровня грунтовых вод — и инфильтрационное питание (применительно к профильному рассеянию). Короче говоря, поперечное рассеяние, и в частности поперечная дисперсия, потенциально представляет во многих крупномасштабных процессах переноса первостепенный интерес и нуждается поэтому в самом тщательном изучении и анализе.

Другая область интенсивных исследований связана с особенностями миграции в трещиноватых породах. Ключ-

чевым вопросом здесь является, конечно, обоснованный выбор одного из двух принципиальных типов моделей — дискретной среды или эквивалентной пористой (сплошной) среды. Повышенный, особенно в последнее время, интерес к первому из них объективно объясняется наличием ряда важнейших практических проблем, не допускающих априорно правомерность предпосылок сплошности среды (моделей второго типа) из-за малой протяженности изучаемых ореолов миграции, соизмеримой с характерными расстояниями между основными водопроводящими путями (трещинами, каналами и т.п.). Среди таких проблем следует назвать прежде всего анализ условий миграции при индикаторных опробованиях водоносных пластов и вблизи подземных репозиторий особо опасных отходов. Дополнительным толчком к изучению моделей первого типа явились представления о «каналовом» механизме миграции в трещиноватых породах, обострившие эти проблемы: вероятность взаимопересечения «каналов» и их подсечения опытными скважинами намного меньше, нежели у трещин, вследствие чего усиливаются проявления гетерогенности трещиноватых пород и резко возрастают их минимальные репрезентативные объемы.

В то же время, трещиноватые горные породы обычно так или иначе проявляют при переносе (и, в частности, при опытно-миграционных опробованиях) свои гетерогенные свойства. Они могут определяться наличием трещиноватости разных уровней, доступной для индикатора пористостью (достигающей даже в неветветрелых разностях трещиноватых пород долей, а то и первых процентов), физико-химическими взаимодействиями по стенкам трещин, т.е. неконсервативным поведением выбранного индикатора и т.д. Усложняя физическую сущность процесса переноса в целом, эти проявления гетерогенности, вместе с тем, демпфируют роль наиболее проводящих зон (каналов, трещин и пр.), делают перемещение вещества по трещинам более равномерным и

тем самым косвенно уменьшают минимальный репрезентативный объем трещиноватой среды, способствуют ее более обоснованному представлению в качестве сплошной. В этом смысле поведение трещиноватых пород начинает напоминать — с ростом масштаба переноса — трещиновато-пористые среды, укладываемые в рамки моделей макродисперсии. Именно здесь, кстати, надо прежде всего искать причины многочисленных неудовлетворительных датировок возраста подземных вод в комплексах трещиноватых пород по ландшафтным индикаторам, — эта проблема отнюдь не столь хорошо решена, как иногда пытаются представить многие опубликованные работы [31].

Что же касается типичных трещиновато-пористых пород, в которых емкость пористой матрицы доминирует над емкостью трещин, то они часто демонстрируют квазигомогенное поведение уже при сравнительно ограниченных масштабах переноса. Объясняется это тем, что мощный диффузионный отток вещества в сравнительно однородную пористую матрицу подавляет влияние на перенос изменчивости проницаемости трещинного пространства. Соответственно, если вернуться еще раз к уже упоминавшемуся сводному графику из работы Ш.Ньюмена [29], где автор пренебрег молекулярной диффузией, то его интерпретацию можно считать сравнительно правдоподобной лишь в случаях чисто пористых или чисто трещиноватых пород: в первом случае изменчивость пористости несоизмерима с изменчивостью проницаемости, а во втором влияние диффузионного оттока, особенно при малых масштабах переноса, невелико.

Таким образом, теоретический анализ миграции в гетерогенных пластах подтвердил наличие существенных

* По отношению к теплопереносу это справедливо и в чисто трещиноватых породах.

ограничений на применимость традиционной диффузионной модели. Не менее важно, однако, что этот анализ доказал — практически для всех типовых ситуаций — существование асимптотических режимов переноса, отвечающих предельной диффузионной модели для гомогенной (квазигомогенной) среды. Другое дело, что время выхода на такую асимптотику иногда соизмеримо с продолжительностью изучаемого процесса, но это лишь говорит о необходимости использования для описания более ранних стадий процесса иных моделей, достаточно хорошо разработанных в литературе. В конечном же счете, на практике проблема упирается, в основном, не в отсутствие модельного описания, а в адекватность последнего и в дефицит исходной информации. Но именно в этом плане диффузионная модель наиболее практична и не имеет равноценных альтернатив: позволяя описать широкий круг типовых условий — пространственно-временных диапазонов миграции — в рамках унифицированных алгоритмов, она предоставляет, вместе с тем, и максимальные возможности для своего параметрического обеспечения [6]. Важно только помнить, что такое обеспечение достигается чаще всего не прямым опытным определением асимптотических параметров модели, а расчетной экстраполяцией данных опытных работ — на базе внимательного анализа возможной изменчивости геолого-структурной и геофильтрационной ситуации по мере роста масштабов переноса.

С учетом сказанного, проведение дальнейшего теоретического анализа процессов массопереноса в гетерогенных комплексах должно включать:

* Часто это может быть также модель диффузионного типа, но иного уровня осреднения.

1) последовательное изучение переноса на всех возможных для данного комплекса пород уровнях проявления гетерогенности; особую роль здесь имеют предельные — асимптотические — оценки, отвечающие крайнему для данной системы масштабному уровню, когда гетерогенная модель сводится к квазигомогенной; важна и противоположная асимптотическая оценка для кратковременных локальных процессов, захватывающих лишь отдельные (гомогенные) элементы гетерогенной системы; и в том, и в другом случае расчетная схема обычно вырождается в простейшую (диффузионную) схему, рассмотренную в данной главе;

2) установление соответствия характерных режимов переноса в прогнозных условиях типовым масштабам протекания миграционных процессов при опытных работах и оценка значимости результатов опытного изучения гетерогенных систем для прогнозных построений; подобные оценки полезно проводить не только для химических компонентов, но и для теплового воздействия на систему, так как при этом появляется возможность анализа одномасштабных процессов на различных уровнях проявления гетерогенности (это важно прежде всего для расширения перспектив миграционного опробования водоносных комплексов);

3) анализ соответствия детальности модельных построений возможному уровню структурного — литологического и фильтрационного — расчленения реальных водоносных комплексов; иначе говоря, при построении физико-математических моделей миграции должны приниматься во внимание ограниченные возможности существующих методов дифференциации толщ пород по фациально-литологическим, структурным, фильтрационным и другим признакам.

Особого подхода требует изучение закономерностей миграции в гетерогенных системах неупорядоченного строения, ибо применение детерминированных квазиго-

могущих моделей с заранее обусловленными уровнями режима переноса, подобных описанным выше, здесь наталкивается на ряд трудностей принципиального характера: существенная неопределенность структурной организации систем со случайной фильтрационной макронеоднородностью, при крайне низкой информации об изменчивости их параметров, резко ограничивают возможности строгих аналитических оценок, определяя превалирующую роль в исследованиях математического (в сущности — имитационного) моделирования, основанного на стохастических принципах. Именно под этим углом зрения, в первую очередь, и следует рассматривать периодическое обращение к стохастическим моделям в последующих разделах книги.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ К ГЛАВЕ 3

1. Алексеев В.С., Коммунар Г.М., Шержуков Б.С. Массоперенос в водонасыщенных горных породах/ Итоги науки и техники. Гидрогеология и инженерная геология. — М., 1989, 144 с.
2. Боксерман А.А., Шалимов Б.В. О температурном поле трещиновато-пористого пласта при инъекции теплоносителя. — В кн.: Исследование методов увеличения нефтеотдачи пластов. — Тр. ВНИИ, 1979, вып. 69, с.43-52.
3. Грани гидрологии/ Под ред. Дж.К.Родда. — М.: Гидрометеиздат, 1980, 448 с.
4. Лукнер Л., Шестаков В.М. Моделирование миграции подземных вод. — М.: Недра, 1986.
5. Малофеев Г.Е., Кеннави Ф.И. О коэффициенте теплоотдачи от теплоносителя блокам трещиноватого пласта. — Нефть и газ, 1978, №1, с.29-35.
6. Мироненко В.А., Румынин В.Г. Опытнo-миграционные работы в водоносных пластах. — М.: Недра, 1986, 240 с.

7. МIRONENKO В.А., РУМЫНИН В.Г., УЧАЕВ В.К. Охрана подземных вод в горно-добывающих районах (опыт гидрогеологических исследований). — Л.: Недра, 1980, 320 с.
8. МIRONENKO В.А., ШЕСТАКОВ В.М. Теория и методы интерпретации опытно-фильтрационных работ. — М.: Недра, 1978, 326 с.
9. ОРАДОВСКАЯ А.Е. Миграция вещества и тепла в подземных водах. — В кн.: Гидрогеологические исследования за рубежом. — М.: Недра, 1982, с.33-74.
10. РОШАЛЬ А.А. Полевые методы определения миграционных параметров. — Обзор ВИЭМС, сер. «Гидрогеология и инженерная геология», 1981, 61 с.
11. РОШАЛЬ А.А., ШЕСТАКОВ В.М. О миграции подземных вод в слоистых пластах. — В кн.: Гидрогеологические вопросы подземного захоронения промышленных стоков. — Тр. ВСЕГИНГЕО, 1969, вып. 14, с.43-55.
12. РУМЫНИН В.Г. О теоретических моделях миграции в гетерогенных средах. — В кн.: Моделирование в гидрогеологии и инженерной геологии. — Новочеркасск, 1983, с.34-46.
13. ШЕСТАКОВ В.М. Динамика подземных вод. — М.: изд. МГУ, 1979, 368 с.
14. Birkholzer J., Rubin H., Daniels H., Rouve G. Contaminant advection and spreading in a fractured permeable formation. — Journ. of Hydrology, 1983, v.144, p.p.1-58.
15. Cvetkovic V.D. Mass arrival of reactive solute in single fractures. — Water Res. Res., 1991, v.27, №2, p.p.177-183.
16. Dagan G. The significance of heterogeneity of envolving scales to transport in porous formations. — Water Res. Res., 1994, №12, p.p.3327-3335.
17. Dagan G. Theory of solute transport by groundwater. — Ann. Rev. Fluid Mechanic, 1987, v.19, p.p.183-215.

18. Dagan G., Cvetkovic V.D. Spatial moments of a kinetically sorbing solute plume in a heterogeneous aquifers. — *Water Res. Res.*, 1993, v.29, №12.
19. Festoy S., Van Golf-Racht T.D. Gas gravity drainage in fractured reservoirs. — *SPE Reservoir Engineering*, 1989, v.4, №3, p.p.271-278.
20. Gelhar L.W. *Stochastic Subsurface Hydrology*. «Prentice-Hall Inc.», New Jersey, 1993, 385 p.
21. Gelhar L.W., Axnes C.L. Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. — *Water Res. Res.*, 1983, v.19, №1, p.p.161-180.
22. Gelhar L.W., Gutjahr A.L., Naff R.L. Stochastic analysis of macrodispersion in stratified aquifers. — *Water Res. Res.*, 1979, v.15, №6, p.p.1387-1397.
23. Goode D.J., Konikov L.F. Apparent dispersion in transient groundwater flow. — *Water Res. Res.*, 1990, v.26, №10, p.p.2339-2351.
24. Kapoor V., Gelhar L.W. Transport in 3-D heterogeneous aquifers. — *Water Res. Res.*, 1994, v.30, №6, p.p.1775-1802.
25. Lauverier H.A. The transport of heat in an oil layer caused by the injection of the fluid. — *Applied Sci. Res., Section A*, 1955, v.5, №2-3, p.p.145-150.
26. Matheron G., De Marsily G. Is transport in porous media always diffusive? A Counterexample. — *Water Res. Res.*, 1980, v.16, №5, p.p.901-917.
27. Neuman Sh.P., Winter C.L. Stochastic theory of field-scale Fickian dispersion in anisotropic porous media. — *Water Res. Res.*, 1987, v.23, №3, p.p.453-466.
28. Neuman Sh.P., Zhang Y.K. A quasi-linear theory of Non-Fickian and Fickian subsurface dispersion. — *Water Res. Res.*, 1990, v.26, №5, p.p.887-902.
29. Neuman Sh.P. Universal scaling of hydraulic conductivities and dispersivities in geologic media. — *Water Res. Res.*, 1990, v.26, №8, p.p.1749-1758.

30. Rajaram H., Gelhar L. Plume-scale dependent dispersion in aquifers with a wide range of scales of heterogeneity. — *Water Res. Res.*, 1995, №10, p.p.2469-2482.
31. Recent Trends in Hydrogeology. — «Geological Society of America. Special Paper», 1982, №189, 448 p.
32. Rubin Y., Bellin A. The effect of recharge on flow nonuniformity and macrodispersion. — *Water Res. Res.*, 1994, v.30, №4, p.p.939-948.
33. Rubin Y. Flow and transport in bimodal heterogenous formation. — *Water Res. Res.*, 1995, №10, p.p.2461-2468.
34. Sagar B. Dispersion in three dimensions: approximate analytic solutions. — *J. Hydraul. Div.*, 1982, v.108, №1, p.p.47-62.
35. Sposito G., Barry D.A. On the Dagan model of solute transport in ground water. — *Water Res. Res.*, 1987, v.23, №10, p.p.1867-1875.
36. Tompkins J.A., K.C.Gan, M.S.Wheater, F.Hirano . Prediction of solute dispersion in heterogeneous porous media. — *Journal of Hydrology*, 1994, v.159, №1/4, p.p.105-123.
37. Welty C., Gelhar L.W. Stochastic analysis of the effects of fluid density and viscosity variability on macrodispersion. — *Water Res. Res.*, 1991, №8, p.p.2061-2075.
38. Welty C., Gelhar L.W. Simulation of large-scale transport of variable density and viscosity fluids using a stochastic mean model. — *Water Res. Res.*, 1992, № 3, p.p. 815-827.

**Основные представления о переносе
влаги и загрязнений через зону
аэрации**

В связи с предельной остротой вопросов охраны подземных вод от загрязнения, повышенное внимание в последние годы уделяется оценке защитных свойств зоны аэрации как главной естественной преграды такому загрязнению. К сожалению, соответствующие исследования не носят систематического характера и выполняются специалистами разного профиля, скорее, попутно с проведением работ иного целевого назначения. Так, почвоведы и близкие им специалисты, во многом подготовившие, объективно говоря, научное обоснование этой проблемы, озабочены в первую очередь изучением влаго- и солепереноса лишь в самой верхней части зоны аэрации. Специфичность самой изучаемой при этом среды и ограниченность вертикального масштаба рассмотрения процесса десятками сантиметров — одним-двумя метрами неизбежно приводят к оценкам и выводам, недостаточно характерным для зоны аэрации в целом. С другой стороны, гидрогеологи, на словах признавая эту проблему «своей», оказались все же мало подготовленными к ее решению и в научно-методическом, и в техническом плане. Отражением этой ситуации явилось практически полное отсутствие обобщающих работ по данной тематике*, что для наших специалистов усугубляется преимущественно зарубежным происхождением тех редких статей, в которых она так или иначе затрагивается;

* Если исключить из рассмотрения многочисленные, но, к сожалению, малообоснованные, на наш взгляд, рекомендации по построению карт защищенности водоносных горизонтов, пренебрегающие рядом эффектов гидродинамического и физико-химического характера.

в результате даже публикации, имеющие принципиальное значение для поставленной проблемы, подчас остаются за рамками научных дискуссий. Настоящей главой авторы пытаются как-то восполнить упомянутые пробелы, в том числе и по части изложения основополагающих представлений.

4.1. Теоретические основы влагопереноса в горных породах при неполном водонасыщении

4.1.1. Общая энергетическая характеристика процесса влагопереноса

В отличие от фильтрации в водонасыщенных породах, для влагопереноса в зоне аэрации характерно наличие в поровом пространстве горных пород двух фаз — воды и воздуха*, причем последний, находясь в свободном состоянии, образует непрерывную фазу и обычно имеет прямую связь с атмосферным воздухом; сказанное не исключает существования здесь воздуха также в защемленном, растворенном и адсорбированном состояниях, однако принципиальным является наличие именно свободного воздуха. При этом соотношение фаз, т.е. степень водонасыщения является тем определяющим фактором в процессе влагопереноса, от которого зависят характер и интенсивность внутренних сил, действующих на частицы жидкости в порах. Чем меньше степень насыщения данного грунта, тем сложнее в целом комплекс этих сил и, соответственно, механизм переноса влаги: все большую роль начинает играть перемещение парообразной воды, — наряду с другими факторами, взаимосвязанными с мас-

* Возможны и другие газообразные компоненты (например, пары воды).

совым потоком (температурными, электрокинетическими, электромагнитными, химическими). Однако в условиях пород со сравнительно высокой влажностью (большей максимальной молекулярной влагоемкости), обычно характерной для зоны аэрации, главное значение сохраняется за силами гравитации, а также капиллярными и сорбционными силами. Так как в пределах каждого равномерно насыщенного элементарного объема грунта (рассматриваемого изолированно от смежных объемов) последние силы направлены на удержание воды в порах, то их суммарное влияние принято характеризовать *сорбционно-капиллярным потенциалом влаги* — работой, необходимой для извлечения из грунта некоторой (например, единичной) массы жидкости. Практически измеряется не работа, а ее эквивалент, приходящийся на единицу объема воды, — давление, которое принято называть *всасывающим давлением*; если отнести его к единице веса воды и, по аналогии с пьезометрической высотой, ввести *высоту всасывания* (Ψ), то она будет выражаться в метрах водяного столба. Схематически такой водяной столб Ψ может быть представлен на простейшей механической модели (рис. 4.1), где величина Ψ — предельная равновесная высота подъема образца водонасыщенного грунта относительно уровня в сосуде, при котором трубка остается еще целиком заполненной водой (нет поступления воздуха через образец).

Для данной породы значение всасывающего давления зависит от влажности, изменяясь от нуля при полном водонасыщении до $N \cdot (10 \div 100)$ мПа для «сухих» грунтов (а то и до значений порядка 10^3 мПа — для грунта, высушенного при температуре 105°C). Однако в диапазонах влажности, наиболее характерных для зоны аэрации, вса-

* Это справедливо, во всяком случае, для незасоленных грунтов, при фиксированных объеме и температуре.

сывающее давление обычно не превышает 0,1 мПа. Для практических расчетов зависимость $\Psi(W)$ иногда удобно представить в виде

$$\Psi = -h_k \ln(\bar{W}), \quad (4.1)$$

где $\bar{W}$ — относительная влажность, h_k — приведенная высота капиллярного поднятия, эквивалентная полному влагосодержанию капиллярной зоны:

$$h_k = \int_0^{\infty} W dz.$$

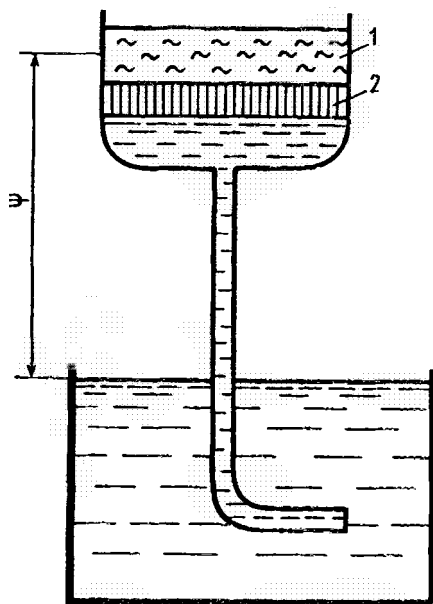


Рис. 4.1. Схематическое представление измерения всасывающего давления:

1 - образец; 2 - тонкопористая мембрана

Зависимость всасывающего давления от влажности W является важнейшей исходной характеристикой грунта (точнее — показателем свободной энергии грунтовой влаги) при оценках влагопереноса; некоторые характерные кривые $\Psi(W)$ приведены на рис. 4.2 [1]. Видно, что зависимость Ψ

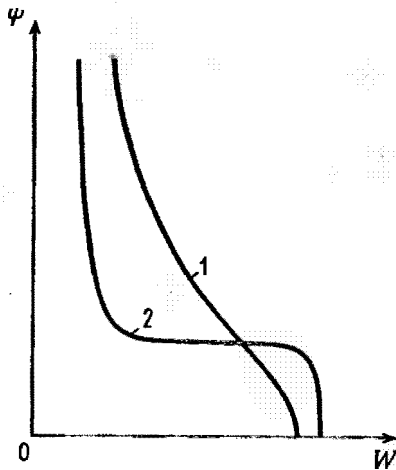


Рис. 4.2. Характерные графики зависимости всасывающего давления от влажности грунта:

1 - однородного; 2 - неоднородного

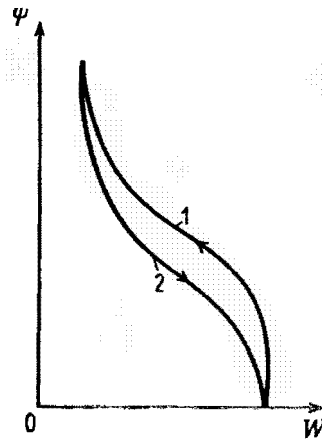


Рис. 4.3. Графики зависимости всасывающего давления от влажности при осушении (1) и водонасыщении (2)

(W) резко нелинейна. Кроме того, эта зависимость обычно характеризуется сильно выраженным гистерезисом: при уменьшении влажности — осушении грунта — всасывающее давление заметно больше (нередко в несколько раз), чем при увлажнении (рис. 4.3). Гистерезис объясняется различными формами менисков (углами смачивания) при осушении и увлажнении, а также наличием тупиковых пор, в которых при осушении остается вода. При достаточно высоких влажностях, характерных для зоны аэрации, значение капиллярно-сорбционного гистерезиса, однако, не столь существенно.

Удобной суммарной энергетической характеристикой, объединяющей силы всасывания и гравитации, является напорная функция (напор). Если отсчитывать значения давлений от атмосферного и помнить о том, что всасывающее давление отражает отклонения от атмосферного в меньшую сторону, то

$$H = -\Psi + z. \quad (4.2)$$

На депрессионной кривой $\Psi = 0$ и $H = z_d$ (z_d — отметка свободного уровня). Выше, в пределах капиллярной каймы, где влажность близка к влажности водонасыщенных пород, в равновесных условиях имеет место линейный рост всасывающего давления с высотой ($\Psi = z - z_d$, т.е. по-прежнему $H = z_d$). Наконец, за пределами капиллярной каймы всасывающее давление, а вместе с ним и напор меняются с высотой в зависимости от влажности. Таким образом обеспечивается непрерывность функции напора при переходе от зоны насыщения к зоне аэрации.

4.1.2. Закон движения влаги *

Экспериментальными исследованиями установлено, что при неполном водонасыщении движение влаги подчиняется закономерности, идентичной закону Дарси:

$$v = -K(W) \frac{\partial H}{\partial l}, \quad (4.3)$$

где, однако, коэффициент пропорциональности $K(W)$ не является константой, но зависит от влажности. Его принято называть *коэффициентом влагопереноса*.

Экспериментальные данные показывают, что зависимость коэффициента влагопереноса от относительной влажности $\bar{W}$ имеет вид:

$$K = K^0 \bar{W}^n, \quad (4.4)$$

где K^0 — коэффициент влагопереноса при полном водонасыщении (коэффициент фильтрации), а относительная влажность $\bar{W}$ определяется формулой:

* Принимается допущение, что влиянием на процесс влагопереноса движения воздуха можно пренебречь.

$$\overline{W} = \frac{W - W_0}{W_n - W_0},$$

где W — текущее значение влажности; W_n — полная влагоемкость; W_0 — влажность, при которой движение влаги в заданных условиях практически отсутствует (т.е. $K = 0$)*.

Показатель степени n в формуле (4.4) для однородных грунтов меняется обычно в пределах $n \approx 3-4$, однако в неоднородных (гетерогенных) фильтрующих средах значение n может существенно превышать эти цифры. Например, при наличии в грунте отдельных крупных пор и каналов даже незначительное уменьшение влажности (за счет стекания воды из этих каналов) приводит к резкому падению величины K . По этой же причине в таких грунтах отмечаются сильные гистерезисные явления: для одной и той же влажности коэффициент влагопереноса при увлажнении может оказаться намного больше, чем при осушении. Заметим еще, что, как и в зоне насыщения, значения $K(\overline{W})$ могут существенно зависеть от состава раствора.

Зависимость коэффициента влагопереноса от относительной влажности $K(\overline{W})$ является еще одной важной характеристикой грунтов при неполном водонасыщении. Обратим внимание на резко нелинейный характер этой зависимости: например, падение относительной влажности на 20 % (от 1,0 до 0,8) приводит к уменьшению коэффициента влагопереноса в два и более раз.

Зависимость $K(\overline{W})$ можно определить, задавая различные значения расхода влаги через колонну грунта и добиваясь стационарного режима влагопереноса в ней.

* В нормальных условиях, на глубинах, превышающих глубину интенсивного испарения, величина W_0 примерно отвечает максимальной молекулярной влагоемкости.

Пользуясь связью (4.2), перепишем теперь выражение для скорости влагопереноса (4.3) в координатной форме:

$$\begin{aligned}v_x &= K (\partial \Psi / \partial x) \\v_y &= K (\partial \Psi / \partial y) \\v_z &= K [(\partial \Psi / \partial z) - 1]\end{aligned}\quad (4.5)$$

(при оси z , направленной вверх). Здесь скорость дается как функция всасывающего давления, а параметр среды — коэффициент влагопереноса — зависит от влажности. Поэтому, наряду с зависимостью $K(W)$, может представлять интерес связь коэффициента влагопереноса с всасывающим давлением $K(\Psi)$. Характерная кривая $K(\Psi)$ приведена на рис. 4.4 [1]; она также резко нелинейна.

Наиболее широким распространением для связи $K(\Psi)$ пользуется зависимость:

$$K(\Psi) = K^0 e^{-\alpha \Psi}, \quad (4.6)$$

где $\alpha = \frac{1}{\lambda_k} \approx \frac{1}{h_k}$ — т. наз. сорбционно-капиллярное число, λ_k — характерный макроскопический масштаб проявления капиллярно-сорбционных эффектов, который может, в первом приближении, увязываться с приведенной высотой капиллярного всасывания. Таким образом, величина $\alpha \approx 1/h_k$ отвечает среднему уклону графика в координатах $\ln K(\Psi) \div \Psi$. Если изобразить кривую $K(\Psi)$ типа (4.6) графически (рис. 4.5) и отразить на ней значения высоты всасывания, отвечающие полному насыщению ($\Psi = 0$) и остаточной насыщен-

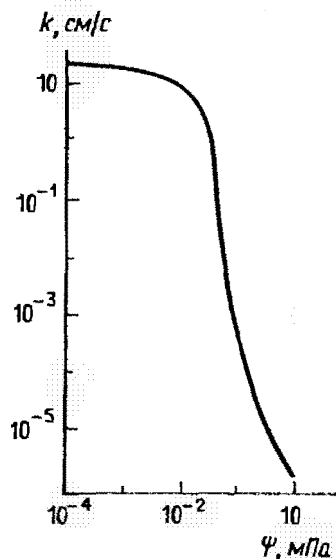


Рис. 4.4. Характерная опытная кривая зависимости коэффициента влагопереноса от всасывающего давления

ности (Ψ_0), то соответствующие площади под этой кривой могут быть представлены следующим образом:

$$\xi_d = \int_{-\Psi_0}^H K(\Psi) d\Psi = \int_{-\Psi_0}^0 K(\Psi) d\Psi + \int_0^H K(\Psi) d\Psi = \xi_m + \xi_v. \quad (4.7)$$

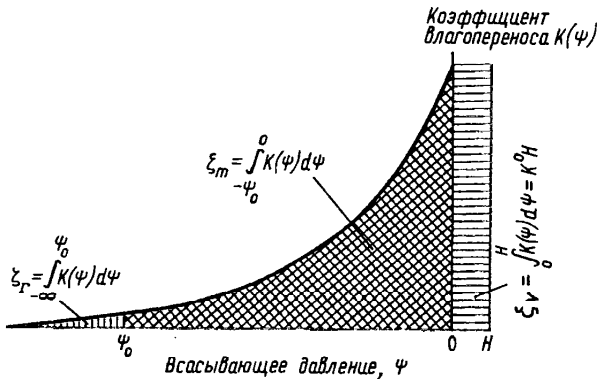


Рис. 4.5. График зависимости коэффициента влагопереноса от всасывающего давления

Здесь через ξ_d обозначен движущий потенциал потока влаги, через

$\xi_m = \int_{-\Psi_0}^0 K(\Psi) d\Psi$ — матричный потенциал, через

$\xi_v = \int_0^H K(\Psi) d\Psi = K^0 H$ — скоростной потенциал в насыщенной зоне;

общий потенциал влаги $\xi_w = \xi_d + \xi_r$, где $\xi_r = \int_{-\infty}^{-\Psi_0} K(\Psi) d\Psi$ — потенциал остаточного потока. Следовательно, величину α можно записать в виде:

$$\alpha = (K^0 - K_0)/\xi_m, \quad (4.8)$$

где K_0 — коэффициент влагопереноса, отвечающий остаточной насыщенности.

По аналогии, введем значение

$$\alpha^* = K^0 / \zeta_m = \alpha / (1 - K_0 / K^0), \quad (4.8, a)$$

которое не зависит от остаточной насыщенности. Для грунтов с остаточной влажностью ниже полевой влагоемкости $K_0 \ll K^0$ и $\alpha^* \approx \alpha$, но для грунтов с высокой исходной влажностью, для которых $\Psi \approx 0$, значение α^* заметно больше, чем α .

Исследования показывают, что параметр α (α^*) мало чувствителен к текстуре грунта, а определяется, главным образом, наличием трещин и макропор. Так, если вода подается в грунт при высоте всасывания, близкой к 0 или более (т.е. когда поверхность грунта сильно увлажнена), то для широкого круга ненарушенных почв значение α^* имеет порядок 10 м^{-1} . В работе [6] рекомендуется использовать следующие цифры для параметра α^* :

- в неструктурированных тонкозернистых грунтах $\alpha^* = 4 \text{ м}^{-1}$;
- в структурированных тонко- и мелкозернистых грунтах $\alpha^* = 12 \text{ м}^{-1}$;
- в крупнозернистых и гравелистых песках и в сильно структурированных грунтах с макропорами и трещинами $\alpha^* = 36 \text{ м}^{-1}$.

Прослеживается общая тенденция к росту значений α^* с увеличением проницаемости грунтов.

Для аппроксимации связи $K(\Psi)$ используются также зависимости, предложенные Ван-Генухтеном [16]; если положить, что

$$\bar{W} = \frac{1}{[1 + (\beta H)^n]^m}, \quad (4.9)$$

где β , n и m — эмпирические константы ($m = 1 - 1/n$), то связь с $K(\bar{W})$ записывается в виде:

$$K(\bar{W}) = K^0 \sqrt{\bar{W}} [1 - (1 - \bar{W}^{1/m})^m]^2. \quad (4.10)$$

При учете миграции воздуха, вводится дополнительное соотношение:

$$K_g(\bar{W}) = K_g^0 \sqrt{(1 - \bar{W})} (1 - \bar{W}^{1/m})^{2m}, \quad (4.10, a)$$

где K_g^o — коэффициент фильтрации воздушной фазы для сухого грунта. Характерные значения β и n (m) для разных грунтов можно найти в литературе. Недостатком этого подхода является обилие опытных параметров и не вполне четкая их физическая трактовка.

До сих пор мы предполагали, что движение воздуха в порах не оказывает влияния на перенос влаги. На самом деле, конечно, это допущение является лишь грубым приближением. Учет одновременной миграции влаги и воздуха осуществляется как для двухфазной системы на основе соответствующих фазовых проницаемостей. Опыты показывают, что движение свободного воздуха практически прекращается уже при не слишком высокой влагонасыщенности, например, порядка 0,7 — для песков [2]. При этом в породе остается защемленный воздух, препятствующий ее дальнейшему увлажнению и покидающий ее лишь в виде отдельных пузырьков. Скорость их подъема меняется от десятков до долей метров в сутки — для песков и глин, соответственно [2]. Таким образом, в тонкозернистых образованиях миграция влаги практически всегда идет при наличии воздуха — в том числе и в условиях, характеризующихся как полное водонасыщение.

В конечном итоге, наличие защемленного воздуха приводит к тому, что недостаток насыщения при увлажнении гетерогенного грунта оказывается в 2-3 раза меньше его коэффициента водоемкости.

Основные уравнения движения влаги (4.5) могут быть записаны в иной форме, в которой скорость и параметры влагопереноса оказываются зависящими от одной и той же переменной — влажности грунта:

$$\begin{cases} v_x = -D_w(W) (\partial W / \partial x) \\ v_x = -D_w(W) (\partial W / \partial y) \\ v_x = -D_w(W) (\partial W / \partial z) - K(W) \end{cases}, \quad (4.11)$$

где

$$D_w = -K (\partial \Psi / \partial W) = K |\partial \Psi / \partial W| \quad (4.12)$$

параметр, называемый *коэффициентом влагонепроводности* или *капиллярной диффузивностью*. Второе из этих наименований проводит параллель с законом Фика для диффузии солей, обусловленной, как мы знаем, градиентом концентрации. Здесь же можно говорить о диффузии влаги, вызванной наличием градиента влажности. Происхождение первого наименования станет яснее, если ввести коэффициент влажностной емкости $\eta_w = |dW/d\Psi|$ (изменение влажности при единичном изменении всасывающего давления) и рассматривать его как аналог коэффициента упругоэластичности: тогда $D_w = K/\eta_w$ — аналог коэффициента пьезопроводности, отражающий скорость передачи «влажностного возмущения» в грунте.

Так как $K(W)$ и $\eta_w(W)$ — однонаправленные функции влажности, то параметр $D_w(W)$ меняется с влажностью относительно слабее, нежели каждая из них; однако и эта связь существенно нелинейна.

4.1.3. Влияние гетерогенности ненасыщенных сред на влагоперенос

Изложенные элементарные представления о физических аспектах влагопереноса в зоне аэрации претерпевают решительную трансформацию применительно к гетерогенным — макропористым и трещиновато-пористым образованиям. Основная емкость таких пород связана с пористой матрицей, в то время как проводящие свойства последней могут быть на несколько порядков ниже, чем

* Заметим в то же время, что третье из выражений (4.11) содержит дополнительный член, отвечающий переносу влаги за счет сил гравитации.

при учете макропор и трещин (в условиях их водонасыщения).

При дополнительном увлажнении с поверхности земли условие $\Psi = 0$ на поверхности пористых агрегатов — контакте с макропорой или трещиной — сохраняется до тех пор, пока приток влаги достаточен для поддержания заполнения последних. В упрощенной постановке [2], динамику насыщения агрегата объемом V_6 и поверхностью ω_6 можно описать уравнением:

$$V_6 \frac{d W_6}{dt} = K_6 \omega_6 \frac{\Psi}{l_6}, \quad (4.13)$$

где W_6 , Ψ и l_6 — средние значения влажности агрегата, высоты всасывания и характерной длины пути миграции в нем. При линейной связи Ψ и W_6 и осредненном значении K_6 (W_6) получим [2]:

$$\bar{W} = 1 - e^{-t/\tau_0} \left(\tau_0 = \frac{2 l_6^2 \mu_n}{K_6^0 h_k} \right), \text{ или } \frac{d \bar{W}_6}{dt} = (1 - \bar{W}) / \tau_0, \quad (4.14)$$

где μ_n — недостаток насыщения. Отсюда видно, что практически полное насыщение агрегата происходит при $t > 3\tau_0$, где τ_0 имеет смысл характерного времени запаздывания (время влагообмена); для реальных пористых пород величина τ_0 обычно не превышает первых суток, но в трещиновато-пористых породах она может быть существенно большей. Таким образом, при ограниченном времени дополнительного увлажнения с поверхности или, что в данном случае равносильно, при большой мощности зоны аэрации, увлажнение оказывается недостаточным для полного насыщения пористой матрицы. При этом повышенное всасывающее давление в пористой матрице приводит к интенсивному (некомпенсируемому) оттоку в нее влаги из основных водопроводящих элементов — макропор или трещин, в результате чего насыщенность и,

соответственно, влагопроводность последних резко падает — вплоть до практически нулевых значений — при ограниченном подтоке воды сверху и достаточно большой мощности ненасыщенных пород. В таком варианте влагоперенос на соответствующих глубинах осуществляется только по матричному пространству* со скоростями, отвечающими его проводящим свойствам, а трещинная проницаемость «включается» лишь периодически в приповерхностной зоне, в моменты поступления в нее повышенного инфильтрационного питания, грубо говоря, когда $\epsilon > K_6$, где K_6 — коэффициент фильтрации блоковой матрицы. На самом деле, конечно, процесс развивается более сложно (особенно при осушении породы), в зависимости от всасывающего давления на стенках макропор или трещин.

При подъеме уровня грунтовых вод в пористой матрице сохраняется заземленный воздух в объеме, соизмеримом с ее водоемкостью. В первое время блоки остаются практически сухими, а затем идет медленное впитывание в них воды, ограниченное давлением заземленного воздуха. В целом, однако, процесс насыщения блоков идет обычно значительно быстрее, чем осушение — в силу больших перепадов всасывающего давления. К тому же, при осушении макропоры могут заплывать под влиянием гидродинамического давления воды, вытекающей из поровой матрицы.

Таким образом, влагопроводящие свойства даже однородного массива ненасыщенных пород в целом могут меняться на порядки как в пространстве, так и во времени. Для примера, на рис. 4.6 приведены графики изменения влагопроводимости трещиновато-пористых туфов на полигоне Юкка-Моунтэн (США) в зависимости от всасываю-

* Не исключено, правда, что в осушенных трещинах жидкость может сохраняться на их стенках — в виде очень тонких пленок (в несколько молекулярных слоев), способных перемещаться со скоростями, превышающими скорость влагопереноса в пористой матрице.

щего давления в пористой матрице, подсчитанные в работе [5]. Высота всасывания на верхней границе массива менялась при этом от -18 м до -0,6 м при соответствующих расходах инфильтрационного питания в этом (пустынном) районе от 0,2 мм/год до 66 мм/год.

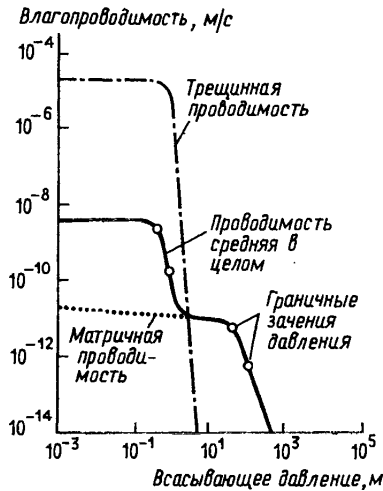


Рис. 4.6. График зависимости вла­го­про­вод­но­сти трещиновато-по­ри­стых ту­фов от всасывающего давления

В трещиновато-пористых породах описанный процесс усложняется возможностью частичной взаимной изоляции отдельных пористых блоков вдоль поверхностей осу­шен­ных трещин, в первую очередь, горизонтальных. Переток влаги через такие трещины из одного блока в другой идет в этом случае лишь по локальным зонам их смыкания (пережимы трещин, их выклинивания и т.п.), т.е. принимает резко выраженный неоднородный, пространственный характер. При этом влага, тяготея к упомянутым зонам, увеличивает их насыщенность и, следовательно, их проводящую способность, в результате чего перемещение влаги вниз, хотя и замедленное во

времени, не прекращается даже при очень ограниченной относительной площади контактных зон — порядка 5-10 % [5].

Естественно, пространственный характер влагопереноса может стимулироваться не только трещиноватостью, но и макронеоднородностью ненасыщенной зоны, прежде всего, характерной для нее слоистостью отложений, их нерегулярным чередованием, выклиниванием и т.д.; при этом влияние неоднородности самым существенным образом зависит от характера площадного инфильтрационного питания.

Так, при равномерном инфильтрационном питании по площади распространения толщи с выдержанным слоистым строением, процесс влагопереноса остается одномерным и усложненным лишь за счет резкой смены его характеристик (всасывающего давления, насыщенности, влагопроводимости) вблизи контактов отдельных слоев. Процесс при этом саморегулируется таким образом, что изменения упомянутых характеристик в пределах отдельных слоев приводят к сохранению баланса потока влаги при переходе из одного слоя в другой. Уместно попутно отметить, что предпосылка о единичном вертикальном градиенте напора (I_z) вполне хорошо выдерживается и для такой слоистой толщи, коль скоро в ней не возникает верховодка [13]: величина I_z зависит от влажности гораздо слабее, чем проводящие свойства.

Описанная (одномерная) картина резко усложняется при неравномерной по площади инфильтрации и/или площадной невыдержанности элементов неоднородности.

Прежде всего, вертикальная миграция загрязнений через зону аэрации часто характеризуется повышенной нестабильностью, — образованием внедряющихся «языков», далеко опережающих основной фронт увлажнения (полного насыщения в пределах «языков» нет). Их появление обусловлено как флуктуациями капиллярного давления на микроуровне, так и макрогетерогенностью

среды. Первый вариант особенно характерен для внедрения тяжелых растворов с повышенной вязкостью или несмачивающих жидкостей при многофазных течениях (разд. 1.1.5). Второй вариант связан с макрохарактеристиками среды и наведенными эффектами. Например, достигнув относительно водоупорной линзы, влага начинает перемещаться вдоль контакта — до тех пор, пока давление во внедряющемся флюиде не превысит барьерного капиллярного давления на контакте или же пока перемещающийся по горизонтали флюид не встретит на своем пути «окно» в водоупорном образовании.

В частности, в работе [9] рассматривалась слоистая ненасыщенная среда, в которую сверху подавался «пакет» влаги. Выяснилось, что, наряду с гистерезисом функции влажности (последняя принимает более высокие значения на фронте осушения), вариации значений капиллярного натяжения на фронте увлажнения были намного большими, чем на фронте (последующего) осушения. В исходно достаточно сухих макронеоднородных грунтах это приводит, в конечном счете, к наведенной потоком влаги сильной анизотропии влагопроводящих свойств среды на фронте увлажнения, с резким усилением на нем горизонтального оттока влаги. В результате вертикальный перенос загрязнения с потоком влаги многократно замедляется. Подчеркнем еще раз, что подобные крупномасштабные гистерезисные явления являются следствием макронеоднородности, а не локальных гистерезисных свойств. Проявления наведенной анизотропии усиливаются уклоном слоистости и земной поверхности. Полевые эксперименты с запуском трассера [10] выявили коэффициент анизотропии проницаемости $\chi = 11,4$ (по форме ореола), в то время как в насыщенном состоянии $\chi = 1,5$. Попытки получить устойчивое значение χ не увенчались успехом: оно сильно зависело от гидродинамического состояния системы, в частности, от степени насыщенности.

Исследованиями стохастических пространственных моделей влагопереноса [7,9] доказано, что амплитуда изменения показателя анизотропии определяется как вариациями проницаемости отложений по глубине (коэффициентом вариации $\sigma^2 \ln K$), так и статистической дисперсией параметров, характеризующих связь величин K_i со всасывающим давлением Ψ по всей совокупности слоев (далее осредненное значение Ψ обозначается через H). Например, если положить, что для каждого i -го слоя выполняется соотношение $K_i = K_0 e^{-\alpha_i \chi}$, то значимость капиллярных барьерных эффектов, препятствующих гравитационному переносу избыточной влаги из одного слоя в другой, будет определяться величиной σ — среднеквадратичным отклонением α от среднего A , где в первом приближении можно положить $A \approx 1/h_k$ (h_k — средняя величина капиллярного поднятия).

Тогда профильная анизотропия толщи по параметру k предсказывается из выражения [7]

$$k = \exp [\chi \sigma_{\ln K}^2 / (1 + A \lambda_z I_z \cos \gamma)]$$

при $k = 1 + H^2 \sigma_\alpha^2 / \sigma_{\ln K}^2$, (4.15)

где I_z — средний градиент, γ — угол между вектором среднего градиента и нормалью к напластованию, λ_z — вертикальный масштаб корреляционной функции проницаемости (имеет порядок мощности слоев), причем K_0 и α — некоррелируемые величины. Если K_0 и α коррелируют ($\xi \ln K^0 = \alpha + \beta$, где ξ и β — некоторые константы), то необходимо положить $k = (1 - \xi H)^2$. Отсюда следует [7], что в первом варианте значения k могут колебаться в пределах нескольких порядков (даже при относительно небольшом изменении H), достигая для слабо увлажненных грунтов величин 10^3 - 10^5 ; в более реальном втором варианте значения k , правда, не столь велики, но вполне могут достигать одного-двух порядков.

Анализ чувствительности показал сильное влияние масштаба корреляции, а также уклона слоев и земной поверхности. Все это особенно важно в сухих районах с глубоким уровнем подземных вод. Так, при падении слоев

вдоль склона главные участки проникновения влаги сопряжены с основанием склона: здесь отмечается максимальная влажность и раньше всего начинается подтопление при обильных дождях. Нужно, правда, заметить, что приведенные результаты носят, скорее, качественный характер, так как они получены в рамках стохастической стационарной модели. Между тем, условие стационарности (в вероятностном смысле) для пород зоны аэрации почти никогда не выполняется [14]: при доминирующем влагопереносе вкrest простираения слоев, практически всегда ярко выражено влияние тренда, часто усугубляемое близостью верхней и/или нижней границы зоны влагопереноса.

4.1.4. Математические основы вертикального влагопереноса

В наиболее распространенной постановке, влагоперенос в зоне аэрации рассматривается как одномерный процесс, в котором пренебрегают его обеими латеральными составляющими. Тогда условие баланса влаги в элементарном объеме однородного гомогенного грунта и последнее уравнение системы (4.11) приводят к дифференциальному уравнению вертикального влагопереноса (уравнение Ричардса) [2]:

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[D_w(W) \frac{\partial W}{\partial z} + \frac{\partial K(W)}{\partial z} \right] \quad (4.16)$$

— при оси z , направленной вверх. В этом уравнении левая часть отражает изменение влажностной емкости системы, а правая часть отвечает приращению, соответственно, дисперсионно-диффузионного потока влаги (первый член) и конвективного потока с единичным градиентом (второй член), обусловленного силой тяжести. Уравнение (4.16) пренебрегает, таким образом, влиянием на влагоперенос воздушной фазы. Кроме того, будучи

справедливым для условий сплошной среды, оно предполагает, что в пределах минимального репрезентативного объема перераспределение насыщенности в зависимости от капиллярного давления — (согласно связи $\Psi(W)$) — происходит весьма быстро в сравнении с миграцией влаги и перемещением фронта увлажнения (см. также разд. 4.1.3).

Уравнение (4.16) — нелинейное, так как коэффициенты K и D_w зависят от искомой функции влажности. Начальное условие для этого уравнения задается исходным распределением влаги, которое само по себе чаще всего бывает существенно нестационарным: устойчивые во времени профили влажности в пределах зоны аэрации — скорее исключение, чем правило. Однако на глубинах более 2 м (для средней полосы России) обычно можно полагать, что в длительные периоды устойчивого режима влаги на земной поверхности исходная влажность сравнительно однородной толщи пород в зоне аэрации примерно отвечает так называемой полевой влагоемкости (т.е. влажности, при которой нисходящий или восходящий поток влаги в данных условиях пренебрежимо мал).

Граничные условия для уравнения (4.16) должны задаваться, вообще говоря, на границах зоны аэрации, т.е. на поверхности земли и на свободной поверхности грунтовых вод. И то, и другое обычно достаточно сложно, особенно задание условий на поверхности земли: здесь режим влаги весьма неустойчив, а кроме того приповерхностный слой грунта обычно характеризуется своей специфической (измененной) структурой и, соот-

* Ориентировочно со значением полевой влагоемкости связывается нижний предел влажности W_0 в формуле (4.4).

ветственно, проницаемостью — последняя обычно ниже исходной на один-два (а то и на три-четыре) порядка.

Поэтому практически гораздо удобнее принимать за верхнюю границу зоны аэрации нижнюю кромку приповерхностного кольматационного слоя, имея в виду, что под ним, как правило, отмечается свободный режим инфильтрации с постоянной скоростью v_z^0 . Условие на этой границе ($v_z = -v_z^0$), с учетом (4.11), принимает тогда вид:

$$-D_w(W) \frac{\partial W}{\partial z} + K(W) = v_z^0. \quad (4.17)$$

Ввиду малой мощности кольматационного слоя, можно ожидать, что непосредственно под ним быстро образуется зона равномерно увлажненных пород ($W = W_z = \text{const}$), т.е. градиент влажности здесь стремится к нулю и граничное условие упрощается:

$$K(W_z) = v_z^0. \quad (4.17, a)$$

Таким образом, при заданной скорости поступления влаги с поверхности v_z^0 , с помощью опытного графика связи $K(W)$ находится граничное значение влажности W_z .

При подтоплении поверхности может ставиться граничное условие первого рода:

$$W_z = W_n. \quad (4.18)$$

В случае испарения грунтовой влаги обычно используют следующую линейную зависимость, связывающую скорость испарения v_z^H с влажностью [2]:

* Конечно, возможны и иные ситуации, когда в приповерхностном слое проницаемость, наоборот, повышена (например, в корнеобитаемой зоне).

$$v_z^H = \alpha (W - W_o), \quad (4.19)$$

где W_o — влажность, при которой испарение в данных условиях практически отсутствует; $W_o^H \leq W \leq W^H$; W^H — влажность, при превышении которой испарение протекает практически независимо от влажности; α — экспериментальная константа ($\alpha \approx 0,04-0,08$ м/сут для районов аридного и полуаридного климата). С учетом (4.19), граничное условие на поверхности земли при испарении принимает вид:

$$D_w(W) \frac{\partial W}{\partial z} - K(W) = \alpha (W - W_o). \quad (4.20)$$

На нижней границе зоны аэрации условия, на первый взгляд, достаточно просты: $H = z$, $W = W_n$, где W_n — полная влагоемкость. Однако, так как на деле влияние этой границы необходимо учитывать в условиях относительно неглубокого залегания подземных вод (когда само положение границы определяется притоком влаги к ней сверху), то здесь необходимо задавать дополнительное кинематическое условие, связывающее скорость изменения свободного уровня v_z^f со скоростью притока (оттока) влаги v_z :

$$v_z^f = \frac{v_z}{(W_n - W_o)}. \quad (4.21)$$

При глубоком залегании уровня грунтовых вод граничное условие на нижней границе зоны аэрации не принимается во внимание: задача вертикального влагопереноса формально решается как для полуграниченной области, в пределах которой рассчитывается изменение во времени положения подвижной границы — фронта увлажнения.

Еще раз отметим здесь, что предпосылка о единичном градиенте вертикальной фильтрации дает для ненасыщенных грунтов хорошие результаты, а это позволяет, в час-

тности, легко учитывать слоистость системы. При таком подходе удобнее пользоваться формой уравнения (4.16), представленной в терминах напорной функции (уравнение Клюта):

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial H}{\partial z} \right) + e = \eta_w \frac{\partial H}{\partial t}, \quad (4.22)$$

где η_w — коэффициент влажностной емкости, а « e » — интенсивность внутреннего источника (стока) влаги. В гетерогенных грунтах роль последнего выполняет пористая матрица, для которой записывается свое уравнение влагопереноса.

Для облегчения понимания соответствующей математической формализации, рассмотрим цилиндрический блок грунта, по оси которого проходит макропора [2]. Считая, что диаметр блока намного меньше его высоты, будем учитывать лишь его латеральный обмен влагой с макропорой. Тогда, исходя из приведенных ранее зависимостей (4.13) и (4.14) для линейной кинетики насыщения блока, а также уравнения баланса воды:

$$Q = \omega_T n_T \frac{\partial l}{\partial t} + \int_0^{\tau} q(t - \tau) \frac{\partial l}{\partial \tau} d\tau, \quad (4.23)$$

(l — глубина промачивания макропоры с площадью поперечного сечения ω_T и пористостью n_T , q — единичный расход влаги, впитывающейся в блок, Q — постоянный расход на поверхности блока), имеем:

$$l = \frac{v}{\mu_n} [t + \tau (1 - e^{-\frac{t}{\tau} \bar{\omega}})]; \quad u = \frac{dl}{dt} = \frac{v}{\mu_n} (1 + \bar{\omega} e^{-\frac{t}{\tau} \bar{\omega}}), \quad (4.24)$$

где $\bar{\omega}$ — отношение агрегатной и межагрегатной свободной водоемкости. При достаточно большом времени ($t \bar{\omega} / \tau > 3$) скорость движения фронта насыщения « u » становится постоянной ($u \approx v / \mu_n$), а глубина промачивания

$l = u(t + \tau)$. При этом формируется неизменный профиль влажности, смещающийся параллельно самому себе. При $t \geq z/u$ (z — глубина):

$$\bar{W} = 1 - \exp \left[-\frac{1}{\tau} (t - z/u) \right]. \quad (4.25)$$

4.2. Основные представления о массопереносе в ненасыщенных грунтах

4.2.1. Перенос в гомогенных грунтах

В первом приближении, массоперенос в неп полностью насыщенных гомогенных грунтах описывается в рамках представлений, изложенных выше для водонасыщенных горных пород. Пренебрегая межфазовым взаимодействием в системе «вода-воздух», полагают, что перенос вещества протекает лишь в водной фазе грунта и подчиняется тем же закономерностям дисперсионно-конвективного переноса, в которых, однако, и активная пористость, и коэффициент гидродисперсии являются функциями влажности грунта. Последнее обстоятельство обычно учитывается по приближенной схеме, предполагающей, что, ввиду отставания фронта переноса вещества от фронта увлажнения, упомянутые параметры массопереноса отвечают «новой» объемной влажности (отождествляемой с величиной активной пористости), возникающей за фронтом увлажнения.

Лабораторные эксперименты на грунтовых колонках подтвердили довольно хорошее соответствие процесса уравнению типа микродисперсии (2.9):

$$n \frac{\partial c}{\partial t} = D_{wz} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v_z \frac{\partial c}{\partial z}, \quad (4.26)$$

где коэффициент микродисперсии D_{wz} зависит примерно линейно от скорости v_z . В таком представлении, инфильтрующаяся со скоростью v_z^0 (условно говоря, «соленая») вода вытесняет природный поровый раствор, который смещается со скоростью

$$v_0 = v_z^0 / (W - W_0), \quad (4.27)$$

(где W и W_0 — «новая» и природная влажности), а фронт «соленой» воды движется со скоростью

$$v_c = v_z^0 / W. \quad (4.28)$$

Зона дисперсионного рассеяния описывается при этом аналогично решению уравнения микродисперсии для насыщенного потока (2.11) при коэффициенте D_{wz} , отвечающем «новой» влажности W . То же можно, в первом приближении, сказать и о равновесных физико-химических взаимодействиях: при необходимости в уравнение (4.20) вносится кинетическая составляющая таких взаимодействий.

Таким образом, фронт увлажнения движется со скоростью большей, чем у фронта переноса вещества, и разрыв между ними растет со временем: он тем больше, чем меньше была исходная влажность грунта W_0 .

Дисперсия сильно зависит от химической природы раствора. Так, в экспериментах на колонках ненасыщенных грунтов, при вытеснении пресной водой соленых вод, значение дисперсивности δ было в три раза выше, чем при противоположном процессе. В целом же, дисперсия растворенных компонентов в ненасыщенных однородных грунтах намного меньше, чем в насыщенных.

На самом деле, приведенная картина может существенно усложняться под влиянием ряда факторов. Так как

* При глубоком залегании уровня грунтовых вод.

мы пока говорим об однородных гомогенных (в частности, с точки зрения влажностной емкости) грунтах, то среди таких факторов следует, прежде всего, упомянуть об образовании отдельных «языков» соленых вод, опережающих основной (осредненный) фронт переноса. Их возникновение объясняется локальными микронеоднородностями порового пространства грунта и стимулируется также повышенной плотностью соленых вод. Например, при инфильтрации хлоридных растворов через гравий было отмечено [15] интенсивное образование «языков», которые постепенно смыкались вблизи капиллярной каймы. Зафиксировано резкое увеличение скоростей переноса ионов Cl^- вдоль этих «языков». По мере роста масштаба переноса, поперечный диффузионно-дисперсионный обмен веществом между такими «языками» и исходной пресной водой приводит к их постепенному подавлению.

Другой причиной ускоренного продвижения соленых вод может служить эффект «проскока» анионов в слабопроницаемых глинистых грунтах.

В обратном направлении действует латеральный отток вещества — аналогично поперечной диффузии-дисперсии (разд.1.1.3).

Важную роль в усложнении описанной выше картины переноса могут играть также нелинейные эффекты, связанные с физико-химическими взаимодействиями между внедряющимся раствором и минеральной фазой. Так, при традиционной линейной постановке задачи о вертикальном просачивании загрязнений через однородный грунт, фронт раствора со временем оказывается в зоне постоянной влажности. На самом же деле, большое значение имеют нелинейные эффекты, связанные с зависимостью проницаемости от концентрации, а сорбции — от влажности. Если считать, что проницаемость среды растет с увеличением концентрации, а сорбция интенсифицируется по мере увлажнения, то фронт увлажнения увеличивает, а фронт засоления уменьшает свою скорость, т.е. разрыв фронтов растет. В частном случае, учитывающем лишь зависимость

проницаемости от концентрации, образуются два фронта, разделенные переходной зоной с постоянными значениями влажности и концентрации (рис. 4.7).

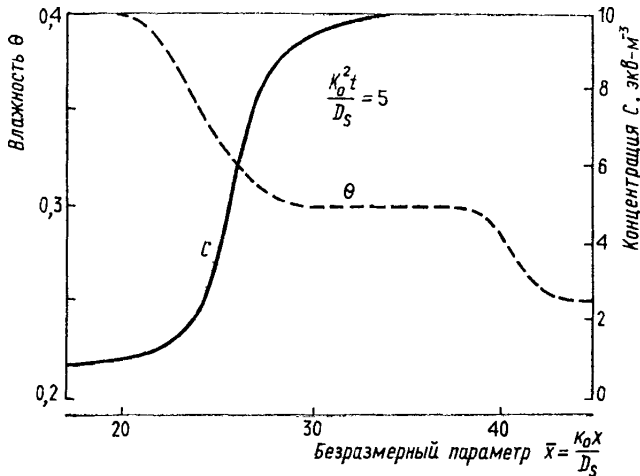


Рис. 4.7. Профили концентрации раствора и влажности грунта в зависимости от $\bar{x}$ при величине безразмерного времени $K_0^2 t/D_s = 5$

Пространственная изменчивость миграционных свойств пород зоны аэрации может зависеть также от состава и концентрации мигрирующего раствора. Так, в работе [12], на примере натриево-кальциевых хлоридных растворов, показано, что вариации W и $K(W)$ росли с увеличением Na-Ca соотношения и с уменьшением концентрации, а сама величина $K(W)$ убывала по мере роста Na-Ca соотношения, причем эффекты эти усиливались с увеличением влажности. Тем самым замедляется и влагоперенос, и миграция солей — в сравнении со случаем трассера.

Однако, главные отклонения от изложенных простейших представлений о массопереносе связаны с проявлением гетерогенности среды. Она дает о себе знать уже на микроуровне даже в однородных (микрогомогенных) грунтах — в результате возникнове-

ния проточных и застойных зон в поровом пространстве, причем в ненасыщенных грунтах эта дифференциация проявляется намного резче, чем в насыщенных. Тем более необходимо учитывать подобную дифференциацию в макрогетерогенных средах.

4.2.2. Особенности массопереноса в ненасыщенных гетерогенных средах

С формальных позиций, описание переноса в ненасыщенных гетерогенных породах основывается на принципах, аналогичных насыщенным средам: исходными являются представления о двойной пористости, или «застойных» и «проточных» зонах (разд. 3.2.1). Подобные параллели облегчаются и тем обстоятельством, что в не слишком сухих грунтах фронт увлажнения обычно распространяется заметно быстрее, чем фронт переноса веществ, и поэтому параметры последнего могут приниматься примерно отвечающими «новой» (формально говоря, известной) влажности; при наложении же массопереноса на естественное инфильтрационное питание, такой подход тем более обоснован. Конечно, в нем имеются свои серьезные упущения, связанные с недоучетом специфики миграционных процессов в ненасыщенных средах, но важность этой специфики обычно затушевывается повышенной неопределенностью расчетных параметров, обусловленной как грубостью экспериментальных методов (гл. 22), так и сильной пространственной изменчивостью свойств [11,12]. Кроме того, будем иметь в виду ориентацию настоящей работы, не предполагающую особый упор на анализ процессов в верхней, наиболее динамичной, части зоны аэрации, как это делается, например, при оценках процессов засоления-рассоления грунта на орошаемых территориях [2].

По отмеченным причинам здесь достаточно ограничиться упоминанием о тех же основных расчетных моделях и схемах миграции в гетерогенных средах, которые внимательно анализировались уже нами применительно к насыщенной зоне (разд. 3.2.1). В частности, для схемы неограниченной емкости и предельной квазигомогенной схемы исходные уравнения миграции в трещинах (макропорах) и в пористой матрице имеют те же формальные представления вида (3.30) и (3.33), соответственно. В последнем случае характерное значение коэффициента макродисперсии для макропористых пород имеет порядок $0,01 \text{ м}^2/\text{сут}$. Определенная специфика характерна иногда лишь для схемы сосредоточенной емкости: в макропористых породах, ввиду не слишком сильных различий между проводящими свойствами макропор и пористой матрицы, часто желательно учитывать конвективный перенос в последней. При этом коэффициент скорости массообмена между макропорами и матрицей (α), входящий в уравнение

$$\bar{\omega}_6 \frac{\partial c_6}{\partial T} = \alpha (c - c_6), \quad (4.29)$$

имеет две составляющие (α_d и α_k), отвечающие диффузионному и конвективному переносу [2]:

$$\alpha_d = D_M \frac{\bar{\omega}_6}{l_6 V_6}, \quad \alpha_k = \bar{K}_6 v \frac{\omega_z}{V_6}, \quad (4.30)$$

где $\bar{K}_6$ — относительная проницаемость блока, $\bar{\omega}_6$ — площадь поверхности блока с характерным расстоянием до его центра l_6 , V_6 — объем блока, ω_z — площадь горизонтального сечения блока. Считая, что блоки имеют кубическую конфигурацию, получаем:

$$\frac{\alpha_k}{\alpha_d} = \frac{K_6 l_6 v}{6 D_M}. \quad (4.31)$$

При характерных для макропористых пород зоны аэрации значениях $l_6 = 0,3$ м, $D_m = 10^{-5}$ м²/сут, $\nu = 0,1$ м/сут, $K = 0,1$, получаем [2]: $\alpha_k/\alpha_6 = 20$, т.е. при этом внутренний массообмен идет, преимущественно, конвективным путем, и можно считать, что $\alpha \sim \nu$. В такой трактовке к уравнению массообмена (4.29) добавляется общее уравнение для переноса в макропорах и блоковой матрице [2]:

$$\overline{W} \frac{\partial c}{\partial t} + \overline{\omega}_6 \frac{\partial c_6}{\partial t} - \nu \frac{\partial c}{\partial z} = 0. \quad (4.32)$$

Решение фундаментальной задачи для системы (4.29) — (4.32) аналогично приведенному в разд. 3.2.1. Важно заметить, что и в случае гетерогенной блоковой среды массоперенос может рассматриваться на квазистационарном влажностном фоне. Так, если принять коэффициент массообмена между макропорами и кубическими блоками в виде (см. 4.13):

$$\alpha_w = \frac{K_6 h_k \omega_6}{l_6 V_6} \approx \frac{3 K_6 h_k}{l_6^2}, \quad (4.38)$$

(h_k — характерная высота капиллярного поднятия в блоке), а коэффициент конвективного массообмена — согласно (4.30), то при $\nu = K_6 l = K_6$

$$\frac{\alpha_k}{\alpha_w} = \frac{\overline{K}_6 \nu l_6^2}{3 K_6 h_k 2 l_6} = \frac{\overline{K}_6 l_6}{6 h_k}. \quad (4.38)$$

Для характерных значений $K_6 = 0,1$, $l_6 = 0,3$ м и $h_k = 3$ м, получаем $\alpha_k/\alpha_6 < 0,01$, т.е. действительно, влагообмен идет на два порядка интенсивнее массообмена.

В заключение приведем краткую характеристику результатов, полученных на более полной, усложненной модели гетерогенной ненасыщенной среды, в которой учитываются, в частности, возмож-

ные водоудерживающие свойства (капиллярное всасывание) материала, заполняющего макропоры или трещины, а также особо выделяются свойства среды в пределах тонких зон, их окаймляющих [4]. Рассматривалась задача об инфильтрации пресной воды в ранее «засоленную» гетерогенную среду, причем считалось, что поступление воды с поверхности осуществляется лишь через трещины (макропоры). Прежде всего, отметим сравнительно равномерное распределение по глубине скорости отвода воды из макропор в пористые блоки с некоторым, однако, максимумом ее вблизи фронта увлажнения. Это означает, что процесс увлажнения «саморегулируется» таким образом, что уменьшение градиента всасывающего давления между трещинами и матрицей (по мере донасыщения последней) более-менее компенсируется параллельным ростом коэффициента влагопереноса в ней. При этом суммарное поступление воды из трещин в блоки остается весьма устойчивым во времени — после сравнительно непродолжительного первого периода инфильтрации. На поздних стадиях влагопереноса, когда пористая матрица в верхней приповерхностной зоне оказывается существенно донасыщенной, обмен между трещинами и матрицей развивается здесь более интенсивно в сравнении с нижней зоной — ввиду нарастания значимости конвективного влагопереноса в матрице под действием гравитационных сил.

На этом фоне еще более сложным оказалось поведение функции концентрации. Сначала концентрация в трещинах, куда поступала пресная вода, резко падала. Затем опресненная вода мигрировала в пористую матрицу посредством, преимущественно, конвективного переноса, обусловленного градиентом всасывающего давления. С другой стороны, возникший большой градиент концентрации между матрицей и трещинами стимулировал встречную тенденцию, так что в целом суммарная интенсивность переноса вещества отвечала этой тенденции; однако вблизи фронта влагопереноса суммарный поток вещества оставался ориентированным в сторону матрицы. Все это иллюстрирует исключительно сложное пространственно-временное распределение интенсивности массопереноса в ненасыщенной гетерогенной среде.

Вместе с тем, приведенные результаты оказались весьма тесно зависящими от задаваемых (сильно пониженных) значений проницаемости в тонких приповерхностных зонах пористых блоков. При отсутствии таких зон, опережающий перенос по трещинам

быстро подавлялся взаимодействием с матрицей. Учитывая же слабую параметрическую обеспеченность этого аспекта проблемы, вряд ли целесообразно отдавать предпочтение подобным усложненным моделям. Очевидно, более реальным на практике окажется сочетание тех же упрощенных асимптотических схем массопереноса, что и для насыщенных сред, т.е. схемы неограниченной емкости, последовательно сменяемой во времени схемой сосредоточенной емкости и предельной квазигомогенной схемой (разд. 3.2.1).

Заклячая настоящую главу, отметим, что мы вообще не затрагиваем в ней особенности миграции через зону аэрации несмешивающихся с водой загрязнителей, в частности, жидких углеводородов, чему будет посвящен специальный раздел в третьем томе монографии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ К ГЛАВЕ 4

1. Бэр Я., Заславски Д., Ирмей С. Физико-математические основы фильтрации воды. — М.: Мир, 1971, 452 с.
2. Шестаков В.М., Пашковский И.С., Соيفер А.М. Гидрогеологические исследования на орошаемых территориях. — М.: Недра, 1982, 244 с.
3. Barnes C.I. Solute and water movement in unsaturated soil. — Water Resources Research, 1989, v.25, №1, p.p.38-42.
4. Gerke H.H., van Genuchten M.T. A dual porosity model for sumulating the preferential movement of water and solutes in structured porous media. — Water Resources Research, 1993, v.29, №2, p.p.305-319.
5. Eaton R.R., Dykhuizen R.C. Effect of material nongomogeneity on equivalent conductivities in unsaturated porous mesia flow. — International Conference and workshop

* Добавим здесь крайне неясные на сегодняшний день возможности раздельной оценки кривых всасывающего давления $\Psi(W)$ для матрицы и трещин (макропор).

on the validation of flow and transport models for the unsaturated zone, New Mexico, 1988, May 22-25, p.p.72-77.

6. Elrick D.E., Reynolds W.D., Tan K.A. A new analysis the constant head well permeameter technique. — International Conference and Workshop on the validation of flow and transport models for the unsaturated zone, New Mexico, 1988, May 22-25, p.p.88-95.

7. Jeh T.C., Gelhar L.W., Gutjahr A.L. Stochastic analysis of unsaturated flow in heterogeneous soil (papers 1-3). — Water Resources Research, 1985, v.21, №4, p.p.447-471.

8. Mantoglou A.Y., Gelhar L.W. Capillary tension head variance, mean soil moisture content and effective specific soil moisture capacity of transient unsaturated flow in stratified soils. — Water Resources Research, 1987, v.23, №1, p.p.47-56.

9. Mantoglou A.Y., Gelhar L.W. Effective hydraulic conductivities of transient unsaturated flow in stratified soils. — Water Resources Research, 1987, v.23, №1, p.p.57-67.

10. McCord I.T., Stephens D.B., Wilson I.L. Hysteresis and state-dependent anisotropy in modelling unsaturated hillslope hydrologic processes. — Water Resources Research, 1991, v.27, №7, p.p.1501-1518.

11. Russo D. Field-scale transport of interacting solutes through the unsaturated zone. 1. Analysis of the spatial variability of the transport properties. — Water Resources Research, 1989, v.25, №12, p.p.2475-2486.

12. Russo D. Field-scale transport of interacting solutes through the unsaturated zone. 2. Analysis of the spatial variability of the field response. — Water Resources Research, 1989, v.25, №12, p.p.2487-2495.

13. Sisson J.B. Drainage from layered field soils: fixed gradient models. — Water Resources Research, 1987, v.23, №11, p.p.2071-2075.

14. Srivastava R., Yeh T.C. Analytical solution for one-dimensional, transient infiltration toward the water table in homogeneous and layered soils. — Water Resources Research, 1991, v.27, №5, p.p.753-762.
15. Starr J.L., Parlange I.Y., Frink C.R. Water and chloride movement through a layered field. — Soil Science Society of America, 1986, v.50, №6, p.p.1384-1390.
16. Van Genuchten M. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. — Soil Science Society of America J., 1980, v.44, p.p.892-898.

ГЛАВА 5**Гидрогеохимическое описание
условий и процессов,
контролирующих качественный
состав подземных вод**

Техногенное изменение состава подземных вод обусловлено действием двух групп факторов [14,16]: 1) собственно привносом новых (загрязняющих) веществ в водоносные горизонты извне и 2) нарушением естественных геохимических условий в водоносных горизонтах под влиянием внешних воздействий, которые вызывают концентрирование в водах элементов, находящихся до этого в кристаллическом или адсорбированном состоянии. В настоящей работе основное внимание уделяется анализу факторов первой группы, которые контролируют поведение загрязняющих веществ при их движении в водоносных горизонтах от техногенных источников загрязнения.

Формирующиеся таким образом гидрогеохимические поля характеризуются заметными градиентами химических потенциалов (концентраций), а иногда и температуры, изменения которых весьма ощутимо проявляются за относительно кратковременные периоды наблюдений. Собственно геохимические превращения протекают на фоне хорошо выраженных гидродинамических механизмов миграции. Именно такое сочетание факторов отличает данные — *техногенные миграционные системы* — от природных квазистатистических систем, исследование которых гораздо чаще допускает рассмотрение собственно геохимических процессов миграции независимо от гидродинамических механизмов.

Вместе с тем, направленность и интенсивность физико-химических взаимодействий в условиях техногенеза во многом определяется естественной («фоновой») гидрогеохимической обстановкой, которая играет важную роль в формировании общего потенциала массопереноса. Ее обобщенными характеристиками являются: 1) химический (ионно-солевой, газовый) и микробиологический состав подземных вод, 2) литолого-минералогический состав и структурные особенности водовмещающих коллекторов:

5.1. Естественный гидрогеохимический фон и его роль в проявлениях буферных свойств водоносной системы

5.1.1. Общие сведения о качественном составе подземных вод

Гидрогеохимический анализ природных систем традиционно отталкивается от достаточно детально разработанных классификационных схем [1,18,22]. В сфере внимания гидрогеологов, занятых проблемой охраны подземных вод, находятся, главным образом, воды верхней части гидросферы, на них наиболее ощутимо сказываются неблагоприятные последствия хозяйственной деятельности человека. Определенный интерес представляет и геохимия вод глубоких горизонтов, рассматриваемых здесь в качестве вероятных источников некондиционных вод, а также возможных коллекторов для подземного захоронения промстоков.

Естественный химический состав подземных вод зоны активного водообмена формируется преимущественно за счет процессов взаимодействия атмосферных осадков и инфильтрующихся поверхностных вод с водовмещающи-

ми породами. По классификации О.А.Алекина [1] воды инфильтрационного генезиса относятся к первым двум классам со следующим соотношением ведущих ионов: $\text{HCO}_3^- > \text{Ca}^{2+} + \text{Mg}^{2+}$ и, реже, $\text{HCO}_3^- < \text{Ca}^{2+} + \text{Mg}^{2+} < \text{HCO}_3^- + \text{SO}_4^{2-}$; ионы Na^+ , K^+ и Cl^- присутствуют обычно в подчиненном количестве.

Источники поступления химических элементов и физико-химические процессы, определяющие макрокомпонентный состав подземных вод (характеризующийся так называемой шестеркой ведущих ионов — HCO_3^- , SO_4^{2-} , Cl^- , Ca^{2+} , Mg^{2+} , $\text{Na}^+/\text{и K}^+$), хорошо известны [1,18]: выщелачивание (а также катионный обмен, растворение) — для всех ионов, привнос атмосферными осадками — для хлор-иона и иона кальция, деятельность микроорганизмов — для гидрокарбонат- и сульфат-ионов.

Соотношение между макрокомпонентами для рассматриваемых классов подземных вод контролируется карбонатной, силикатной и сульфатной (точнее серной) системами химических равновесий (разд. 5.1.2). Центральным процессом в карбонатной системе является растворение карбонатов, протекающее в присутствии углекислого газа (CO_2); эта система почти всегда контролирует кислотно-щелочную реакцию среды — величину pH . Аналогичную роль в изверженных породах играют процессы химического выветривания силикатов и алюмосиликатов. Для системы серы ($\text{SO}_4^{2-} \text{—} \text{S}^{2-} \text{—} \text{HS}^- \text{—} \text{H}_2\text{S}^0$ — сульфидные минералы) характерны окислительно-восстановительные процессы, протекающие с изменением величин pH - Eh .

В целом, для зоны интенсивного водообмена свойственна окислительная обстановка ($Eh > 250\text{--}300$ мВ), обусловленная присутствием в воде растворенного кислорода; здесь, например, имеют место реакции окисления органических веществ, двухвалентного железа и марганца. Лишь в отдельных случаях разложение

органических веществ при участии микроорганизмов приводит к развитию восстановительных условий ($Eh < 200-250$ мВ); важно, что при этом миграционная способность ряда элементов резко возрастает.

Весьма разнообразен *микрокомпонентный состав* подземных вод; он характеризуется присутствием таких элементов как фтор, бром, иод, литий, стронций, барий, мышьяк, золото, представители группы тяжелых металлов (свинец, кадмий, цинк, медь, никель, ртуть, марганец), радиоактивные компоненты и др. Эти элементы, содержания которых часто не превышают десятых и сотых долей мг/л, обладают пониженной способностью к миграции в водной среде (по сравнению с макрокомпонентами). К факторам, препятствующим их накоплению в подземных водах, относятся: присутствие анионов (таких как CO_3^{2-} , OH^-), с которыми катионы металлов образуют слабо растворимые соединения; адсорбция металлов частицами породы; извлечение из растворов микроорганизмами.

Несмотря на низкие содержания, роль микрокомпонентов в жизнедеятельных процессах очень велика (многие из них биологически активны): понижение или, наоборот, повышение их концентраций неблагоприятно сказываются на жизнеспособности микроорганизмов. Содержание некоторых микроэлементов (таких как F, B, As, Sr, Be) в подземных водах отдельных регионов приближается к предельно допустимым (по нормам питьевого водоснабжения) значениям [19]. В этом случае небольшие внешние воздействия могут приводить к опасным техногенным изменениям качества подземных вод.

Растворенные органические вещества, имеющие биогенное происхождение, обнаружены практически во всех водных растворах природного происхождения. В области активного водообмена источники поступления органического вещества в подземные воды связаны с

продуктами почвенных процессов и преобразованиями ископаемого вещества, которым особенно богаты глинистые породы разделяющих (слабопроницаемых) толщ. При распаде и преобразовании этих веществ в природные растворы переходят аминокислоты, углеводы, белки, органические кислоты, фенолы, амины и т.д. Особое значение имеют органические кислоты, такие как фульво- и гуминовая кислоты, являющиеся сильными комплексообразователями. Суммарные содержания органических веществ в грунтовых водах колеблются в пределах 25-35 мг/л.

Структурные формы нахождения органического вещества в подземных водах могут быть самыми разнообразными — от молекулярных до коллоидных, причем последние, судя по литературным данным [52], в ряде гидрогеохимических условий являются превалирующими. Данное обстоятельство предопределяет многие особенности поведения органических веществ как мигрантов — природных и техногенных.

Участие органического вещества в формировании химического состава подземных вод проявляется: а) в образовании различных форм связей с химическими элементами (органок комплексы и элементарноорганические соединения); б) в микробиологических процессах; в) в окислительно-восстановительных процессах, протекающих химическим путем; г) в изменениях физико-химических свойств воды как растворителя.

Жизнедеятельность микроорганизмов поддерживается энергией различных химических реакций, катализаторами которых они тем самым и являются. Поэтому микроорганизмы ускоряют окислительно-восстановительные процессы, способствуя изменению валентного состояния многих элементов. Мобилизирующее действие микроорганизмов заключается в переводе твердых элементов в жидкую фазу и в выделении по ходу биохимических процессов.

мических реакций органических и неорганических продуктов, являющихся основой для комплексообразования; тем самым увеличивается миграционная способность элементов.

Для окислительных условий большое значение в преобразовании химического состава вод играют аэробные бактерии, в частности:

- серо-бактерии, окисляющие сероводород и серу до серной кислоты;
- железо-бактерии, отлагающие гидрат окиси железа.

С участием бактерий протекают и восстановительные процессы:

- сульфатредукция (восстановление SO_4^{2-} до H_2S);
- денитрификация (восстановление NO_3^- и NO_2^- до элементарного азота N_2).

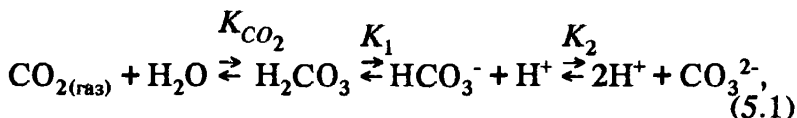
5.1.2. Определяющие минеральные равновесия

Природные гидрогеохимические системы характеризуются большим разнообразием протекающих в них процессов, их детальному разбору посвящен обширный литературный материал [5,8,17,18]. Эти исследования важны в свете решения следующих задач: 1) определение минеральных источников поступления вещества в подземные воды, причем эта проблема связана с обратной оценкой — выявлением роли подземных вод в изменении состава вмещающих пород; 2) оценка растворимости минералов, что эквивалентно нахождению предельных концентраций насыщения растворов теми или иными компонентами; 3) установление возможной степени отклонения физико-химической системы от равновесной. Не пытаясь охватить здесь все аспекты проблемы формирования естественного состава подземных вод, остановимся лишь на тех из них, которые контролируют наиболее важные параметры природных

гидрогеохимических систем и могут впоследствии быть полезными при обосновании моделей техногенного загрязнения подземных вод.

Карбонатная система включает равновесия, устанавливающиеся вследствие взаимодействия растворов с карбонатным материалом (доминирующим минералом является, как правило, кальцит — CaCO_3) в присутствии растворенного углекислого газа (CO_2). Центральными реакциями являются:

- реакция растворения CO_2 в воде с последующей диссоциацией угольной кислоты на ионы



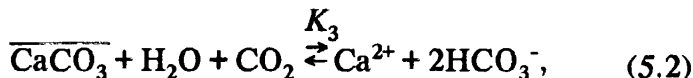
термодинамические константы которой —

$$p K_{\text{CO}_2} = p \left[\frac{a_{\text{H}_2\text{CO}_3}}{p_{\text{CO}_2}} \right] = 1,4; \quad p K_1 = p \left[\frac{a_{\text{H}} + a_{\text{HCO}_3^-}}{a_{\text{H}_2\text{CO}_3}} \right] = 6,4;$$

$$p K_2 = p \left[\frac{a_{\text{H}} + a_{\text{CO}_3^{2-}}}{a_{\text{HCO}_3^-}} \right],$$

(вблизи $T = 298,15^\circ \text{K}$, $p = 1 \text{ атм}$; $pK_i = -\lg K_i$);

- реакция углекислотного выщелачивания кальцита



константа равновесия которой —

$$K_3 = \frac{a_{\text{Ca}^{2+}} a_{\text{HCO}_3^-}^2}{p_{\text{CO}_2}} = \frac{K_1 K_{\text{CO}_2} K_{\overline{\text{CaCO}_3}}}{K_2},$$

($K_{\overline{\text{CaCO}_3}} = PP_{12}$, $pK_{\overline{\text{CaCO}_3}} = 8,3$ — для тех же условий).

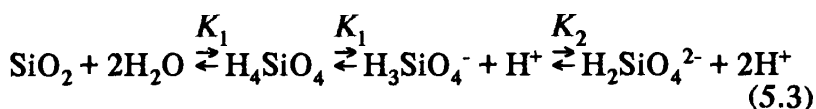
Основываясь на соотношениях (5.1)—(5.2), легко рассчитать поля устойчивости различных форм миграции компонентов карбонатной системы ($\text{H}_2\text{CO}_3\text{—HCO}_3^-\text{—CO}_3^{2-}$), соотношения между которыми контролируют величину pH . Подобные расчеты выполняются при фиксированных значениях $\Sigma(\text{CO}_2)_0 = a_{\text{H}_2\text{CO}_3} + a_{\text{HCO}_3^-} + a_{\text{CO}_3^{2-}}$. В частности, для характерного значения $\Sigma(\text{CO}_2)_0 = 10^{-2}$ диапазон $6,4 \leq pH \leq 10,3$ отвечает полю преобладающей активности гидрокарбонат-иона HCO_3^- ; при $pH < 6,3$ доминирующей становится активность иона H_2CO_3 ; при $pH > 10,3$ преобладающей формой миграции становится карбонат-ион CO_3^{2-} .

Уравнение (5.2), дополненное некоторыми балансовыми соотношениями [8], является основным для расчета равновесных концентраций C_{Ca}^{2+} и $a_H^+(pH)$ в *открытых* (при неограниченном доступе CO_2 в раствор, контактирующий с кальцитом) системах.

Для *закрытых* гидрогеохимических систем, формирующихся после поступления растворов в водоносный пласт, куда доступ атмосферного CO_2 ограничен, важна другая оценка, отвечающая нахождение распределения главных компонентов в зависимости от состава исходного раствора. Такого рода оценки также являются традиционными в гидрогеологической практике изучения процессов выщелачивания карбонатного материала из массивов обводненных пород. Если поступлению воды в водоносный горизонт предшествует ее инфильтрация через почвенный слой, то при расчетах рекомендуется принимать значение $P(\text{CO}_2)_0$, превышающее, как минимум, в 10–20 раз равновесное значение $P_{\text{CO}_2} = 10^{-3,5}$ атм; по сути,

это — поправка на насыщение воды углекислым газом, концентрируемым в почвах за счет протекания биологических процессов. Наконец, можно показать, что в закрытой карбонатной системе величина pH слабо зависит от входного значения $(pH)_0$ инфильтрационной воды.

Силикатная система и процессы выветривания силикатных пород контролируются обычно большим числом физико-химических параметров. В этой системе по достаточно простой (конгруэнтной) схеме протекает растворение ограниченного числа минералов, среди которых особое место занимает кварц (SiO_2). По аналогии с (5.1), для реакции



можно записать выражение, определяющее суммарное содержание воднорастворенного кремнезема,

$$\Sigma \text{SiO}_2 = C_{\text{H}_2\text{SiO}_4} \left(1 + \frac{K_1}{a_{\text{H}}^+} + \frac{K_1 K_2}{a_{\text{H}}^+} \right),$$

где $pK_1 = 9,9$, $pK_2 = 11,7$.

Более характерными для рассматриваемой системы являются равновесия между несколькими минералами и природной водой. По существующим термодинамическим данным достаточно надежно рассчитываются поля устойчивости минералов в таких подсистемах, как $\text{Na}_2\text{O}—\text{Al}_2\text{O}_3—\text{SiO}_2—\text{H}_2\text{O}$ (альбит—гиббсит—анальцит—смектит—каолинит—пирофиллит), $\text{K}_2\text{O}—\text{Al}_2\text{O}_3—\text{SiO}_2—\text{H}_2\text{O}$ (калиевый полевой шпат—мусковит—гиббсит—каолинит—пирофиллит); на базе равновесных соотношений возможен анализ «смешанных» систем, включающих, помимо Na_2O и K_2O , окислы CaO , MgO и FeO .

Результаты расчетов, обсуждаемые в работах [5,8,18], дают возможные варианты состава растворов в зависимости от состава пород и направленности процессов выветривания (химического разрушения) силикатов и алюмосиликатов; эти процессы, очевидно, могут протекать как чисто гидролитическим путем, так и с участием растворенного углекислого газа (углекислосое выщелачивание).

Равновесия в системе карбонатных и силикатных минералов с участием растворенного углекислого газа контролируют два важных параметра гидрогеохимической системы [14,16]: 1) карбонатную буферность подземных вод и 2) соотношение в них между ионами натрия и кальция (Na/Ca).

Карбонатная буферность определяется соотношением между ионом HCO_3^- и растворенным CO_2 ; основываясь на рассмотренных выше реакциях (5.1), можно показать, что чем ближе отношение $\text{HCO}_3^-/\text{CO}_2$ к 1, тем подвижнее, менее устойчиво кислотно-щелочное равновесие в систе-

ме. Это значит, что небольшие внешние воздействия, приводящие к изменению соотношения $\text{HCO}_3^-/\text{CO}_2$, вызывают резкое изменение pH , что, в свою очередь, сказывается на миграционной способности ряда химических элементов.

Природные воды с низкой карбонатной буферностью характерны, например, для гидрогеологических массивов силикатных пород северных районов. Наоборот, в аридной зоне континентального засоления, карбонатные равновесия сдвинуты в сторону HCO_3^- , причем часто наблюдается дефицит равновесного CO_2 . Поэтому внешние воздействия в виде, например, инфильтрации подкисленных вод, не приводят к сколь-нибудь заметному изменению pH в системе.

Далее, концентрация ионов Са контролирует поведение в водных растворах некоторых анионогенных элементов, образующих с ним труднорастворимые соединения. Среди этих элементов, концентрации которых в питьевых водах жестко регламентируются, — F, В и As. Поэтому уменьшение в подземных водах концентрации кальция и, соответственно, рост Na/Ca-отношения приводит к накоплению в них упомянутых элементов. Особенно чувствителен к колебаниям Na/Ca-отношения ион F^- , поскольку практически всегда присутствует минеральный источник фторидов.

Потенциалзадающие системы, главными представителями которых являются системы кислорода, органического вещества, серы и железа, характеризуются активностью в растворах электронов, перенос которых управляет целым рядом соподчиненных реакций [11]. Если исключить из рассмотрения аномальные геохимические ситуации, то преобладающие в верхних водоносных горизонтах околонейтральные кислотно-щелочные среды характеризуются довольно высокими положительными значениями Eh (≥ 250 мВ) [11,16]. Такой потенциал

подземных вод объясняется постоянным присутствием в них растворенного кислорода.

Вместе с тем, степень насыщения вод по O_2 — весьма невысокая (обычно не превышает 5-10 мг/л) и поэтому привнос даже небольшого количества вещества — восстановителя резко смещает равновесие в сторону пониженных значений Eh . В условиях техногенеза таким восстановителем являются прежде всего растворенные органические соединения — углеводороды, относительно небольшие концентрации которых способны полностью лишить подземные воды кислорода. Процесс окисления протекает с участием микроорганизмов и носит кинетический (растянутый во времени) характер (разд. 5.1.1). В целом можно говорить об относительно низкой «окислительной буферности» водоносных горизонтов.

Хорошо известно, что падение окислительно-восстановительного потенциала приводит к накоплению в подземных водах ряда токсичных элементов и соединений (например, фосфора, аммония), а также таких нормируемых компонентов, как железо и марганец.

5.2. Основные процессы физико-химического преобразования вещества в подземных растворах (без учета фильтрации)

Физико-химические процессы, инициируемые внедрением в пласт техногенных растворов, заметно смещают природные квазистатистические состояния. Однако весьма активные изменения общего потенциала массопереноса могут происходить и при малых отклонениях от исходных гидрогеохимических равновесий в пределах полей загрязнения, как это имеет место при физической сорбции. В настоящем разделе закономерности физико-химических процессов рассматриваются в «статике» — безотносительно к перемещению растворов по пласту.

При этом считается, что для этого достаточными являются традиционные для химической термодинамики и кинетики представления о локально равновесных и неравновесных (кинетически обратимых или необратимых) реакциях.

Физико-химический характер миграции подземных вод определяется двумя основными типами превращений:

- гетерогенными — межфазовыми — процессами (реакциями), реализующимися на границе раздела жидкости и минерального скелета, и
- гомогенными — внутрифазовыми — процессами (реакциями), протекающими в объеме поровой жидкости.

Типичными межфазовыми взаимодействиями являются растворение (осаждение), выщелачивание, сорбция, ионный обмен и некоторые другие. К внутрифазовым относятся реакции комплексообразования (нередко осложненные окислительно-восстановительными процессами), деструкции и радиоактивного распада.

5.2.1. Межфазовые сорбционные и ионообменные взаимодействия

5.2.1.1. Равновесная сорбция (адсорбция)

Под этим процессом понимается концентрирование вещества из раствора на поверхности минеральных агрегатов (пористые породы) или на стенках трещин и каналов (трещиноватые породы). При длительном взаимодействии в статических условиях зависимость между концентрацией компонента в растворе c и на твердой фазе q оказывается для данной температуры однозначной и определяет вид изотермы адсорбции ($q \sim c$), эмпирические константы которой в общем случае характеризуют энергию взаимодействия сорбируемых компонентов с ми-

неральными частицами; в качестве типовых выделяют линейную, выпуклую и вогнутую изотермы [3].

Сорбция из малоconцентрированных растворов обычно подчиняется линейной изотерме Генри, форма представления которой для комплексов пористых и трещиноватых пород имеет вид, соответственно:

$$q = K_d \rho c, \quad (5.4)$$

$$q = K_a S_b c, \quad (5.5)$$

где K_d и K_a^* — коэффициенты сорбционного распределения (размерность $L^3 M^{-1}$ и L , обычно $\text{см}^3/\text{г}$ и см), ρ — объемная плотность породы, S_b — удельная поверхность трещин.

Реально в константе K_a находит частичное отражение сорбция в пределах глинистых и гидроокисных «налетов» — продуктов выветривания скальных пород, покрывающих поверхность трещин [44,58,59,64,65]. Увеличивает сорбционную способность трещиноватых пород неглубокого залегания и рыхлый заполнитель трещин, привнесенный инфильтрационными водами из покровных суглинистых отложений. Если обозначить толщину «налетов» на стенках трещины через δ' , а коэффициент объемного сорбционного распределения — через K_d' , то из несложных балансовых соотношений можно найти величину дополнительной сорбционной емкости трещин: $K_a' = \delta' K_d' \rho$.

Роль распределения минеральных компонентов на поверхностях трещин в вариациях сорбционной емкости может быть столь высокой, что она позволяет некоторым авторам [39] говорить о канализации (разд. 1.1.1) миграционных течений, наведенной сорбцией.

* Параметр K_a отвечает увеличению количества вещества на поверхности блоков ($\text{г}/\text{см}^2$) с ростом его концентрации в растворе $\text{г}/\text{см}^3$.

При больших диапазонах изменения концентрации достаточно общей является нелинейная изотерма Лэнгмюра:

$$q = \frac{K Q_V c}{1 + Kc}, \quad (5.6)$$

где Q_V — полная сорбционная емкость породы, K — константа (постоянная энергия связи), характеризующая степень сорбционного насыщения породы в зависимости от диапазона изменения концентрации; при низких значениях последней ($Kc \ll 1$) формула (5.6) переходит в зависимость (5.4) при $K_r = K_d \rho = KQ_V$, а при высоких концентрациях $q \rightarrow Q_V$.

Наконец, для определенной группы веществ, таких как некоторые тяжелые металлы и пестициды, адсорбция удовлетворительно описывается эмпирической изотермой Фрейндлиха:

$$q = K_F c^N, \quad (5.7)$$

где K_F и N — опытные константы; обычно $0 < N < 1$. По результатам численных экспериментов влияние нелинейности процесса на массоперенос отмечается при $N < 0,9$ [29].

Нелинейные модели могут оказаться особенно полезными при анализе сорбционных процессов в трещиноватых породах с ограниченным числом сорбционных площадок на стенках трещин. Если обозначить через $Q_{\max}$ величину предельной сорбции (г/см^3), то параметр Q_V в изотерме Лэнгмюра (5.6) будет определяться соотношением: $Q_V = Q_{\max} S_b$. Например, в работе [63] при расчете переноса растворенных и коллоидных форм урана принимается $Q_{\max} = 10^{-3} \text{ г/см}^3$, причем считается возможным сведение изотермы (5.6) к «комбинированной» изотерме вида:

$$q = \begin{cases} K_a S_b c & \text{— при } q < Q_{\max} \\ Q_{\max} & \text{— при } q \geq Q_{\max} \end{cases} \quad (5.8)$$

Сорбционные процессы обычно обратимы лишь частично, так что параметры десорбции могут сильно отличаться в меньшую сторону от сорбционных.

Одной из причин такого поведения компонентов, которое, в частности, было отмечено для радиоцезия и радиостронция в почвах в пределах «Чернобыльского следа», является их диффузия в кристаллическую решетку породообразующих минералов [12]. Так, из опубликованных материалов [13,25] следует, что доля необратимо сорбируемых таким образом радионуклидов в отобранных пробах грунтов достигает порой 95-98 %. Данное обстоятельство заставляет обращаться для описания сорбции к чисто кинетическим (первого порядка) моделям, допускающим неограниченную емкость минерального скелета (так называемые модели «необратимой сорбции вещества без насыщения» [12]).

Неполярные органические соединения в силу своей гидрофобности сорбируются, главным образом, на органическом веществе, содержащемся в породе. Поэтому лабораторное изучение распределения органического соединения в растворе октанола и воды косвенно дает представление об ожидаемых коэффициентах сорбции в грунтах. При этом используется эмпирическая формула:

$$K_d = f_{oc} K_{oc}, \quad (5.9)$$

где K_{oc} — коэффициент распределения в модельном растворе, f_{oc} — исходное относительное содержание органического вещества в породе.

Интенсивность сорбционных процессов, находящая отражение в соответствующих изотермических зависимостях, контролируется обширной совокупностью физико-химических параметров грунтов и взаимодействующих с ними растворов. При этом отмечается повышенная чувствительность опытных результатов к изменению

гранулометрического и минералогического состава пород, а также к колебаниям содержаний в последних органического вещества, что объясняет, в частности, противоречивость литературных данных по сорбции одних и тех же компонентов на породах близких литологических разностей. Определенные закономерности удается установить лишь при оценке влияния на интенсивность сорбции изменения некоторых обобщенных термодинамических характеристик (таких как ионная сила, pH , макрокомпонентный состав) растворов, содержащих исследуемые компоненты.

Так, достаточно характерным является случай сорбции микрокомпонентов из растворов, ионная сила которых определяется содержаниями макрокомпонентов. В этом случае, как правило, рост ионной силы приводит к уменьшению количества сорбируемого породой компонента. Это объясняется тем, что увеличение концентрации избыточного катиона в растворе создает конкуренцию исследуемому компоненту, занимая часть активных площадок на минеральном скелете и снижая тем самым степень его концентрирования породой. Одновременно в растворах с высокой ионной силой падает активность (действующая концентрация) этого компонента, обуславливая ту же направленность в изменении эффективных параметров сорбции.

Данный эффект иллюстрируется рис. 5.1,а, где представлены изотермы сорбции ионов Zn^{2+} из растворов $NaNO_3$ с различной ионной силой. Интересно отметить, что пересчет содержаний $c_{Zn^{2+}}$ на активность $a_{Zn^{2+}}$ (см. рис. 5.1,б) не позволил исключить влияние ионной силы и не привел к совпадению изотерм: произошло лишь сжатие графиков по оси абсцисс. Это свидетельствует о слабом влиянии электростатических взаимодействий в растворе на сорбционные равновесия.

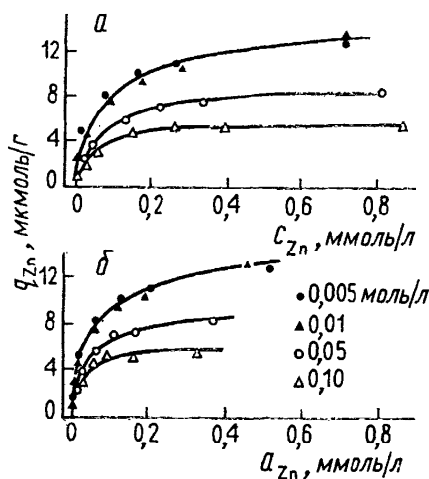


Рис. 5.1. Изотермы сорбции Zn^{2+} ($q_{Zn} + c_{Zn}$ - а; $q_{Zn} + a_{Zn}$ - б) при различных концентрациях буферного раствора NaNO_3 ($\text{pH} = 6$) [57]

Менее однозначно интерпретируется влияние на сорбцию химической природы доминирующего аниона. Однако, если априорно допустимо пренебречь ролью комплексообразования как процесса, удерживающего в растворе дополнительное (по сравнению с равновесной ионной формой) количество компонента в химически связанной с анионом форме, то наиболее сильное влияние оказывает специфическая сорбция этого аниона. Среди традиционно рассматриваемых анионов — макрокомпонентов к такой сорбции склонны сульфат-ионы (SO_4^{2-}). Сорбируемость SO_4^{2-} зависит от pH (в том случае, когда процесс протекает по анионообменному механизму, т.е. из обменного комплекса вытесняется гидроксильная группа) и содержания в породе органического вещества [34] — см. также разд. 5.2.1.3. Сорбция SO_4^{2-} может увеличить поверхностный потенциал породы и тем самым интенсифицировать сорбцию

микрокомпоненты. О значимости рассматриваемого эффекта можно судить по рис. 5.2.

Изменение кислотно-щелочной реакции среды может также повлиять на величину сорбционной емкости породы, что особенно важно учитывать для нелинейных изотерм. Так, при низких pH активные площадки на минеральной фазе породы, способные к сорбционному осаждению компонента, часто оказываются заполненными протонами (H^+).

Очевидно, этим обстоятельством можно объяснить характер графиков на рис. 5.3, свидетельствующих о существенном росте интенсивности сорбции при переходе от кислых растворов к нейтральным (см. также объяснение подобных эффектов в рамках более строгих моделей — разд. 5.2.1).

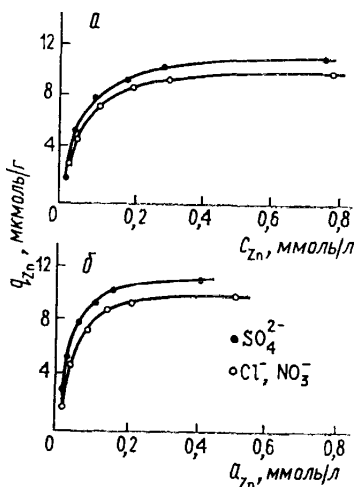


Рис. 5.2. Изотермы сорбции ионов цинка ($q_{Zn} + c_{Zn}$ - а; $q_{Zn} + a_{Zn}$ - б) из растворов Na_2SO_4 , $NaCl$ и $NaNO_3$ ($I = 0,01$ моль/л)

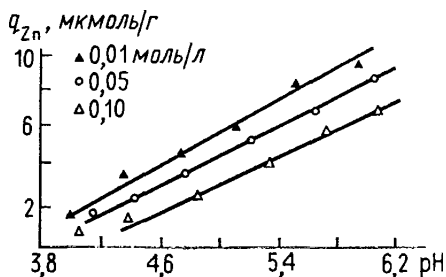


Рис. 5.3. Влияние pH раствора на величину сорбции ионов цинка (при исходной концентрации Zn^{2+} в растворе 0,24 ммоль/л [57])

Для органических загрязнителей возможна противоположная ситуация: с ростом pH растет степень их ионизации и растворимость, а сорбционная способность, соответственно, падает [45].

Со своей стороны, сорбция, особенно в глинистых породах, может вызывать структурную перестройку порового пространства с последующим изменением фильтрационно-диффузионных свойств. Например, в работе [35] отмечается, что такого рода структурные изменения способствуют увеличению коэффициента диффузии, который оказывается прямо пропорциональным коэффициенту распределения. Поэтому диффузия загрязнения через глинистые барьеры может активизироваться.

Достоинства и недостатки рассмотренного здесь «изотермического» подхода, базирующегося, в первую очередь, на широком использовании линейной модели (так называемой « K_d -концепции»), отчетливо проявились в многочисленных работах, посвященных детальному исследованию сорбции радионуклидов, особенно — Cs-137, Sr-90, Co-60, Pu-238. Эти исследования выявили практически неограниченные диапазоны изменения характерной константы K_d — от десятых долей и первых единиц до многих тысяч $\text{см}^3/\text{г}$. Минимальные значения соответствуют песчаным или гравелистым разностям пород, фильтрующих высокоминерализованные растворы; максимальные — глинистым разностям в условиях их диффузионного насыщения слабоминерализованными растворами. В трещиноватых породах отмеченный диапазон изменения K_d составил 0,1-100 см. При этом важную роль может играть неоднородное распределение сорбируемых веществ на стенках трещин в зависимости от представленных на них минералов [39].

Сорбция (коэффициент распределения) урановых соединений уменьшается на несколько порядков с ростом содержания карбонатов и фосфатов, а также с увеличением pH , а сорбция стронция — с ростом содержания сульфатов [31].

Главное же, выводы этих работ свидетельствуют о неинвариантности расчетных значений константы $K_d(K_a)$, которые оказываются сильно зависящими от физико-химических (геохимических) условий миграции радионуклидов: даже небольшие изменения состава раствора и температуры, которые всегда имеют место в пластовых условиях, приводят к резким, часто немонотонным изменениям $K_d(K_a)$. Зачастую оказалось невозможным подобрать среднее (единственное) значение данной константы, удовлетворительно описывающее поведение концентрационных фронтов (см. разд. 8.3.2); эти значения часто резко различны для начальной и конечной фаз загрязнения в данной точке. С этих же позиций, часто оказывается малонадежной и любая экстраполяция лабораторных (или даже полевых) определений констант K_d и K_a на прогнозные условия.

Нередко рост значений K_d по мере наблюдений за миграцией объясняется использованием равновесной модели для реального кинетического процесса. Например, при наблюдениях за миграцией радиостронция через пески на полигоне Chalk River [58] расчетная величина K_d росла в течение 30 лет почти линейно, увеличившись в 4 раза (с 1 до 4 мл/г); одно из объяснений тому — проявление кинетики сорбции стронция на гидроксильных оболочках, покрывающих песчаные зерна. Для учета сложного воздействия пластовых условий на кинетику сорбции используются опыты с колоннами грунта, установленными в скважины.

* Нужно, в частности, напомнить, что обычная методика нахождения коэффициента распределения не делает различий между сорбцией и осаждением [69].

Сказанное определило в последнее время активную критику « K_d -концепции» и явилось стимулом к разработке более совершенных подходов к описанию данного класса физико-химических взаимодействий. Так, альтернативными для рассмотренной модели физической сорбции могут служить модели поверхностного комплексообразования и ионного обмена, к рассмотрению которых мы и перейдем.

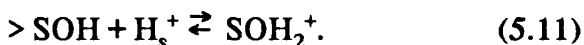
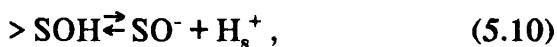
5.2.1.2. Модель поверхностного комплексообразования

Считается, что данный тип взаимодействия достаточно характерен для минеральных сред, представленных оксидами (например, SiO_2 и Al_2O_3) и гидроокислами (такими как гетит, $\alpha\text{-FeOOH}$), и менее типичен для глинистых минералов (последние более склонны к участию в ионообменных взаимодействиях — см. разд. 5.2.1.3). Следовательно, предпочтительно учитывать поверхностное комплексообразование при оценках миграции в хорошо проницаемых средах, в частности, трещиноватых. Как будет видно из дальнейшего, поверхностные комплексообразовательные процессы дают хорошее объяснение наблюдаемым в экспериментах зависимостям интенсивности сорбции от кислотно-щелочных условий (pH), и в этом отношении рассматриваемой здесь модели трудно найти альтернативу. Поэтому модель поверхностного комплексообразования находит все более широкое применение в практике гидрогеологических расчетов, особенно тех из них, которые посвящены прогнозированию загрязнения подземных вод радионуклидами и тяжелыми металлами.

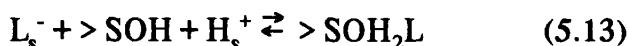
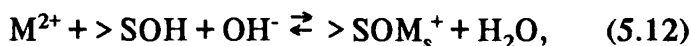
Модель исходит из предположения, что растворенные компоненты и частицы воды образуют определенный тип химических связей с поверхностью минеральных частиц. Считается, что в исходном состоянии эта поверхность

покрыта гидроксильными группами, так что каждая активная площадка представляет собой «комплекс», структурная формула которого $> \text{SOH}$ [62].

Поверхностная гидроксильная группа может быть депротонирована ($> \text{SO}^-$) или протонирована ($> \text{SOH}_2^+$):



(Здесь и далее нижний индекс s относится к компоненту, находящемуся в непосредственном контакте с поверхностью). Понятно, что данные реакции контролируются значениями pH раствора. Катионы и анионы раствора могут специфически адсорбироваться на минеральной поверхности посредством обмена на H^+ или OH^- в поверхностном комплексе, например,



(M и L — металл и лиганд).

Дальнейшее развитие модельных представлений связывается с выбором схемы электростатической коррекции концентрации компонента вблизи поверхности минерала — в объеме диффузионного слоя. В простейшем варианте такой коррекции считается, что все компоненты подвержены воздействию одного и того же поверхностного электростатического потенциала Ψ_o , так что

$$[i]_s = [i] \exp \left(-\frac{Z F \Psi_o}{K T} \right), \quad (5.14)$$

где $[i]$ и $[i]_s$ — концентрации компонента в растворе и на минеральной поверхности, Z — заряд поверхностного комплекса, F — число Фарадея (96486 С/моль), K — константа Больцмана, T — абсолютная температура. Потенциал Ψ_o может быть определен из соотношения

$$\Psi_o = \frac{\delta}{C}, \quad (5.15)$$

где C — емкость (в F/m^2) двойного электрического слоя, δ — поверхностный заряд (C/m^2). Параметр δ может быть рассчитан посредством специальных итерационных процедур через суммарную поверхностную концентрацию компонентов и удельную поверхность S_s (m^2/dm^3). Таким образом, данный подход предполагает задание трех параметров: емкости C (F/m^2), удельной поверхности S_A (m^2/g) и отношения «минеральная фаза — раствор» C_s (г/л); отсюда $S_s = S_A C_s / n$ (n — пористость).

Другая модификация модели предполагает наличие дополнительного (промежуточного) электрического уровня (слоя), ответственного за адсорбцию всех компонентов, за исключением H^+ (OH^-). Этот уровень характеризуется потенциалом Ψ_1 , так что

$$[i]_s = [i] \exp \left(- \frac{Z F \Psi_1}{K T} \right). \quad (5.16)$$

На внутреннем слое располагаются частицы H_s^+ и OH_s^- , потенциал которых, как и в первом варианте, равен Ψ_0 . Для удобства математических операций при моделировании, экспоненциальный член в обеих зависимостях (5.14) и (5.16) формально рассматривается как некоторый «электростатический» компонент с концентрацией $\exp(-zF\Psi_i/KT)$.

5.2.1.3. Равновесный ионный обмен

Ионообменный процесс является следствием более сильного, по сравнению с физической сорбцией, взаимодействия растворенных компонентов — ионов — с минералами породы. Самопроизвольные ионообменные процессы, активизирующиеся при смене физико-химической обстановки в водоносных горизонтах, захватывают обычно катионный состав системы раствор—порода. В отличие от сорбционных процессов, которые приводят к выборочному снижению содержания отдельных компонентов, ионный обмен представляет собой стехиометрическое замещение равноименных ионов, что способствует значительно более глубокой трансформации

качественного состава раствора. При этом суммарная концентрация компонентов может оставаться неизменной.

Наличие хорошо выраженных ионообменных свойств характерно для породообразующих глинистых и слюдистых минералов, обменная цесовая емкость E (мг-экв/100 г) у которых меняется в пределах: 70-150 (100) — для монтмориллонита и вермикулита; 10-40 (20) — для гидрослюд, хлорита и иллита; 3-15 (8) — для каолинита и галлуазита. Для кварцита, кальцита и минералов группы алюмосиликатов значения E обычно не превышают 3-5 мг-экв/100 г, а для окисей и гидроокисей железа и алюминия они составляют 0,5-5 мг-экв/100 г.

Характер ионообменных взаимодействий растворов с аморфной группой только что упомянутых и некоторых других минеральных образований существенно зависит от кислотности — щелочности среды — параметра pH , который контролирует отношение между активностями (количеством) отрицательно и положительно заряженных площадок — активных центров — на поверхности минералов (рис. 5.4). Таким образом, возможна инверсия ионообменных свойств минералов: в определенных условиях они могут поглощать не только катионы, но и анионы. Однако анионообменные свойства ощутимо проявляются, как правило, лишь при низких

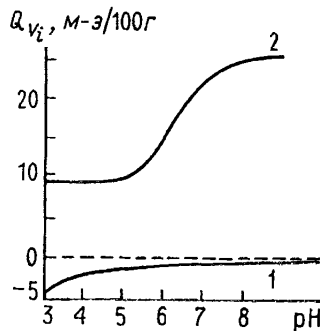


Рис. 5.4. Характерные кривые изменения концентрации положительных (1) и отрицательных (2) зарядов на породе (K. V. Raman, 1986)

* В скобках даны средние значения параметра E .

значениях pH ($pH < 3-4$). В околонеutralной и щелочной среде минералы являются, в основном, катионитами. Переза-рядкой активных площадок при смене pH объясняются результаты экспериментов (рис. 5.5) по сорбции сульфатов и фосфатов. Как видно, относительная доля сорбируемых анионов падает с ростом значений pH . Инверсия ионообменных свойств при исследовании мономинеральных образований была подмечена рядом авторов у гиббсита, гематита, магнетита. Не исключена возможность участия в ионообменных процессах такого «инертного» компонента как хлор-ион.

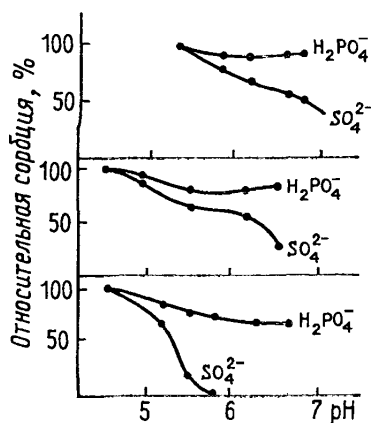


Рис. 5.5. Влияние pH на изменение относительной величины сорбции сульфатов и фосфатов. графики отвечают различным типам грунтов [51]

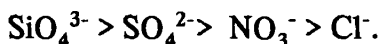
Достаточно высокой ионообменной подвижностью в кристаллических структурах горных пород обладают катионы щелочных и щелочно-земельных элементов — Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , Mg^{2+} и некоторых других; еще более активным компонентом в поглощенном комплексе является ион водорода (H^+). Поэтому ясно, что ионообменные процессы в водоносных системах влияют и на макрокомпонентный состав подземных вод, нередко спо-

собствуя смене их гидрохимического типа, и на изменение величины pH .

По своей энергии поглощения упомянутые ионы образуют следующий селективный ряд:

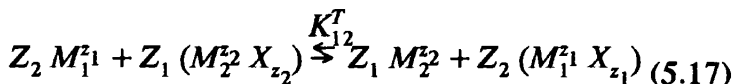


Как уже отмечалось, менее значимыми для гидрогеохимических систем являются реакции анионного обмена. Тем не менее следует отметить, что значительное содержание в породе гидратированных форм железа и алюминия может потребовать включения в модели и анионообменных реакций. Как показывает анализ [37], способность анионов к такого рода обмену описывается следующим селективным рядом:



Анионообменные реакции весьма чувствительны к изменениям pH и ионной силе. Отмечается [37] определенное влияние анионного обмена и на содержания катионов. Например, при обмене SO_4^{2-} на OH^- последний анион выходит из породы и взаимодействует с H^+ . Убыль иона H^+ в растворе приводит к его десорбции с последующим замещением свободной емкости катионами Ca^{2+} , Mg^{2+} , K^+ и Na^+ .

Предположив, что катионный обмен протекает до установившегося подвижного химического равновесия между катионами в растворе и на породе, реакцию обмена для бинарной системы можно представить в следующем общем виде:



где M_1 и M_2 — обменивающиеся катионы; (M_1X) и (M_2X) — катионы в обменном комплексе породы; Z_1 и Z_2 — заряды вытесняющего и вытесняемого катионов. Таким

образом, интерпретация явлений катионного обмена может основываться на законе действующих масс, устанавливающем соотношение между активностями продуктов реакций и исходных веществ. В соответствии с этим законом, равновесное состояние системы (5.17) при активностях катионов M_1 и M_2 в растворе (a_1 и a_2) и на породе (a_{x_1} и a_{x_2}) определяется уравнением:

$$K_{12}^T = \left(\frac{a_{x_1}}{a_1} \right)^{z_2} \left(\frac{a_2}{a_{x_2}} \right)^{z_1}, \quad (5.18)$$

где K_{12}^T — термодинамическая константа равновесия.

Основные трудности использования уравнения (5.18) связаны с необходимостью расчета термодинамических функций a_{x_1} и a_{x_2} .

Преобразуем уравнение (5.18), введя в него коэффициенты активностей (f_{x_1} и f_{x_2}) для твердой фазы [26]:

$$K_{12}^T \left(\frac{f_{x_1} q_1}{a_1} \right)^{z_2} \left(\frac{a_2}{f_{x_2} q_2} \right)^{z_1} \text{ или } K'_{12} = K_{12}^T \frac{(f_{x_2})^{z_1}}{(f_{x_1})^{z_2}}, \quad (5.19)$$

где последнее выражение записано для рационального коэффициента ионного обмена; q_1 и q_2 — концентрации компонентов на породе. Коэффициенты f_{x_1} и f_{x_2} являются в общем случае функциями состава $N_1 = q_1/Q_v$ и $N_2 = q_2/Q_v$ (N_1 и N_2 — мольные доли для первого и второго катионов). Существует несколько моделей, авторы которых предлагают свои аналитические представления зависимостей $f_{x_i}(N_i)$.

Так, для одно-двухвалентного обмена Е.Н.Гапоном получены соотношения [26]:

$$f_{x_1} = 1/(2 - N_1), \quad f_{x_2} = 2/(1 + N_2), \quad (5.20)$$

которые довольно часто используются при анализе ионообменных процессов. Тем не менее, многие экспериментальные результаты свидетельствуют о гораздо более сложных зависимостях для параметра K_{12}^T . Кроме того, анализ рассматриваемого вида взаимодействий требует учета отклонений термодинамических величин a_1 и a_2 от аналитических концентраций c_1 и c_2 (жидкая фаза), так что в общем виде

$$K_{12} = K_{12}^T \left(\frac{\gamma_1}{f_{x_2}} \right)^{z_2} \left(\frac{f_{x_2}}{\gamma_2} \right)^{z_1}, \quad (5.21)$$

где K_{12} — обобщенный коэффициент селективности.

Дальнейшее развитие принципов описания ионообменных равновесий может идти по пути их сведения к изотермическим зависимостям, которые, как и в случае адсорбции, устанавливают связь между концентрацией данного компонента на породе (в составе ее обменного комплекса) q_i и в растворе c_i при заданных температурах и давлении.

Основу такого подхода может быть положен достаточно очевидный принцип эквивалентности, согласно которому в ходе обменной реакции должны выполняться предпосылки сохранения электронейтральности раствора и постоянной емкости поглощения [33,38,53]:

$$z_1 c_1 + z_2 c_2 = z_0 c_0, \quad q_1 + q_2 = Q_v, \quad (5.22)$$

где c_0 — концентрация анионов в растворе, Q_v — полная емкость катионного поглощения. Эквивалентная запись в безразмерной форме:

$$z_1 \bar{c}_1 + z_2 \bar{c}_2 = 1 \text{ и } \bar{q}_1 + \bar{q}_2 = 1 \quad (\bar{c}_i = c_i / z_0 c_0, \bar{q}_i = q_i / Q_v).$$

* В противном случае, при анализе нестационарных миграционных процессов требуется рассмотрение уравнений движения и баланса масс для каждой пары i -ых компонентов в растворе и на породе, что делает соответствующие краевые задачи исключительно сложными.

Подставляя соотношение (5.22) в уравнение (5.18), получаем функциональные зависимости лэнгмюровского типа (5.6), в частности:

для гомовалентного обмена

$$\bar{q}_1 = \frac{K_{12}^z \bar{c}_1}{Z + (K_{12}^z - 1) \bar{c}_1} \quad (5.23)$$

— с участием одновалентных ($Z = 1$) и двухвалентных ($Z = 1/2$) катионов;

для гетеровалентного обмена

$$\bar{q}_1 = \delta(Z) + \frac{Z}{2\alpha} (1 - \sqrt{1 + 4\alpha}) \quad (5.24)$$

— с участием одно- и двухвалентных катионов, причем

$$\alpha = Q_v \left(K_{12} \frac{c_1^2}{c_2^2} \right) = \frac{Q_v}{Z_o c_o Z_2} \left[\frac{K_{12} \bar{c}_1^2}{(1 - Z_1 \bar{c}_1)} \right]^z, \quad Z = Z_1 - Z_2, \quad (5.24, a)$$

а функция $\delta(z) = 1$ при $z > 0$ и $\delta(z) = 0$ при $z < 0$.

Отсюда нетрудно показать, что графическое представление изотерм ионного обмена $\bar{q}_1 + \bar{c}_1$ (или $\bar{q}_2 + \bar{c}_2$) дает все три типовые их формы. Для гомовалентного обмена эта форма контролируется значением коэффициента селективности: $K_{12} = 1$ — линейная, $K_{12} > 1$ — выпуклая, $K_{12} < 1$ — вогнутая изотерма. В случае гетеровалентного обмена (одно-, двухзарядные катионы) изотерма является выпуклой при выполнении критерия:

$$\varphi = Z K_{12}^z \frac{Q_v}{Z_o c_o} > 2Z. \quad (5.25)$$

В противном случае ($\varphi < 2z$), изотерма вогнутая. Однако, строго говоря, подобные оценки формы изотермы обмена должны увязываться с возможными колебаниями коэффициента селективности (K_{12}) в зависимости от состава (ионной силы) раствора и степени концентрирования того или ионного катиона на породе (q_i или N_i).

Для важного частного случая взаимодействия растворов и породы в области низких концентраций вытесняющего катиона ($c_1 \ll c_2 \approx c_o$, $q_1 \ll Q_v$) уравнения (5.23)-(5.24) обобщаются:

$$q_1 = K_{Г1} c_1, K_{Г1} = K_{12}^{1/z_2} \left(\frac{z_2 Q_v}{z_o c_o} \right)^{z_1/z_2}. \quad (5.26)$$

Таким образом, с формальных позиций, линейная изотерма (5.26) должна быть достаточно типичной для ионообменного взаимодействия с породой растворенных микрокомпонентов, мигрирующих в составе природных или техногенных вод, которые содержат обычно макрокомпоненты в значительных концентрациях.

5.2.1.4. Модель кинетики сорбционных и ионообменных взаимодействий

Для описания кинетической стадии сорбционных и ионообменных процессов, предвещающей наступление равновесного состояния в системе, можно ориентироваться на формальные подходы, разработанные для обратимых физическо-химических реакций. Так, полагая, что взаимодействие раствора и породы протекает в диапазоне, далеком от ее полного сорбционного насыщения ($q \ll Q_v$), приходим к известному уравнению линейной кинетики сорбции:

$$\partial q / \partial t = \alpha(c - q/K_r), \quad (5.27)$$

где α — константа скорости сорбции, $K_r = K_d \rho$. По оценкам различных авторов, величины α , определенные в лабораторных условиях, имеют порядок не ниже 10 сут^{-1} , так что время установления сорбционного равновесия в этих условиях не превышает нескольких часов. Однако данные эти — мало показательны для многих реальных полевых (динамических) ситуаций, когда скорость конвективно-дисперсионного подвода вещества к сорбирующим элементам минеральной фазы намного меньше, нежели при форсированных режимах лабораторных экспериментов.

Так как степень сорбционного насыщения породы определяется наличием пассивных (в фильтрационном отношении) зон или вторичной пористостью минеральной фазы, то кинетика процесса в целом контролируется конечной скоростью диффузии вещества из потока в эти обособленные зоны порового пространства. Поэтому проявление диффузионного механизма внутрипорового обмена может резко расширить кинетическую область сорбционного процесса при миграции вещества. Если считать, что характер базисного кинетического уравнения остается без изменения, то в расчетах можно использовать экспериментально определяемый коэффициент α , в котором находит обобщенное отражение и данный механизм: это вынужденно предполагает полевое определение коэффициента α при условиях миграции, близких к прогнозируемым.

Критериями степени локального равновесия системы служат т. наз. числа Дамколера, соответственно, для физического и химического факторов:

$$D_{a_1} = \frac{\alpha L}{v}, \quad D_{a_2} = \frac{\alpha L n}{K_f v}. \quad (5.27, a)$$

При $D_{a_1} + D_{a_2} > 10+100$ влияние кинетики практически незначительно, причем это справедливо для любых реакций.

На практике предпосылку о локальном равновесии приходится часто использовать вынужденно — в силу очень бедной информации о константах кинетики. Однако такой подход, будучи чаще всего справедливым для

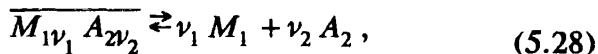
* В макротерогенных средах этот эффект многократно усиливается, что и отмечается авторами некоторых публикаций, основанных на анализе полевого материала.

неорганических соединений, может оказаться мало правомочным для органических загрязнителей.

5.2.2. Термодинамика и кинетика процессов растворения-осаждения

При неограниченно длительном взаимодействии минеральной и жидкой фаз наступает равновесное состояние, при котором молекулы или ионы переходят из одной фазы в другую в эквивалентных соотношениях и с одинаковой интенсивностью. Устанавливающиеся при этом равновесные содержания i -ых компонентов в растворе отвечают так называемым концентрациям насыщения c_i^H , являющимся мерой растворимости твердых веществ. Очевидно, что такого рода равновесия контролируют, в значительной степени, естественный состав природных вод. Действие внешних (например, техногенных) факторов может приводить к отклонению содержаний c от равновесных значений ($c_i \leq c_i^H$): гидрогеохимическая система приходит в неравновесное состояние, характеризующееся концентрированием дополнительного количества солей на породе (осаждение) или в растворе (растворение).

Наиболее приемлемыми для термодинамического анализа являются равновесные реакции растворения, имеющие конгруэнтный характер. Такие реакции протекают с сохранением стехиометрического соотношения компонентов в растворе и в растворяемом минерале:



где черта над буквенным символом указывает на нахождение соединения в кристаллической (твердой) фазе.

В соответствии с законом действующих масс, уравнение (5.28) при активности кристаллической фазы, равной 1, может быть записано в виде ионного произведения (произведения растворимости $PP_{12} = K^T$):

$$PP_{12} = a_{M_1}^{\nu_1} a_{A_2}^{\nu_2} = (\gamma_1 c_1^H)^{\nu_1} (\gamma_2 c_2^H)^{\nu_2}. \quad (5.29)$$

Значения констант PP_{12} для большинства труднорастворимых соединений определены и приводятся в справочной химической литературе; численные величины PP_{12} для этих веществ колеблются в весьма широком диапазоне значений (10^{-3} – 10^{-40}).

Растворы, состав которых характеризуется более высокими, по сравнению с термодинамическими величинами PP_{12} , ионными произведениями, являются перенасыщенными, а с более низкими значениями соответствующего показателя — недонасыщенными по отношению к кристаллическому веществу $M_1 A_2$ (стехиометрические индексы в формуле состава далее опускаются); растворимость последнего определяется по формуле

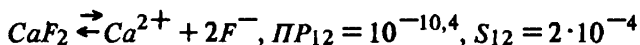
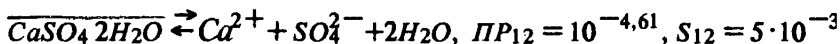
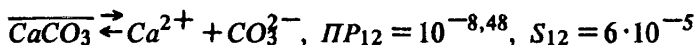
$$S_{12} = \left(\frac{PP_{12}}{\gamma_1^{\nu_1} \gamma_2^{\nu_2}} \right)^{1/(\nu_1 + \nu_2)}. \quad \text{При проведении таких расчетов}$$

необходимо учитывать возможность существенных отклонений ионных концентраций c_1^H и c_2^H от суммарных (определяемых аналитически) при нахождении в растворах ионов-комплексобразователей, — их присутствие увеличивает значение S_{12} .

За условную границу устойчивости исходного твердого соединения (осадка) $M_1 A_2$ предлагается [5,27] принимать суммарную концентрацию c_2^H равновесных с ним растворенных форм, равную 10^{-6} моль/л. Иными словами, осадок неустойчив, если он дает в той или иной гидрохимической обстановке концентрацию компонента, превышающую 10^{-6} моль/л. Это же значение

принимается за критерий полноты осаждения компонентов в неравновесных процессах.

По схеме (5.28) протекают реакции растворения-осаждения таких порообразующих минералов, как кальцит, гипс, кварц, флюорит:



(S_{12} — растворимость в моль/л).

При растворении нескольких порообразующих минералов встает вопрос о выборе равновесий, определяющих заданную активность в водном растворе того или иного иона, в составе этих минералов. Ответ на него дает простое правило: таким контролирующим равновесием является то из совокупности возможных, которое обеспечивает наименьшую активность иона [18]. В обобщенном виде относительную устойчивость минералов в многокомпонентных системах характеризуют диаграммы их состояния (диаграммы полей преобладания компонентов и фаз).

Здесь же необходимо отметить, что существенные погрешности в такого рода расчетах обусловлены исходной предпосылкой о нахождении осаждающихся и растворяющихся минералов в стандартном состоянии, при котором их активность ($a_{M_1A_2}$) может быть принята равной 1. Достижению этого состояния могут препятствовать: повышенная степень дисперсности кристаллов и зерен, их дефекты, образование промежуточных (метастабильных) аморфных соединений с низкими показателями кинетики перекристаллизации, а также

изоморфное замещение одних ионов кристаллической решетки на другие в процессе совместного осаждения нескольких веществ.

Достижению равновесного состояния (5.28) может предшествовать длительный период кинетических изменений в системе. Потенциалом реакции, определяющим интенсивность (W_s) перехода в раствор или осаждения из него солей, является степень насыщения этого раствора [4,17,21]:

$$W_s = \partial q / \partial t = \beta^* (c - c^n), \quad (5.30)$$

где c^n — концентрация насыщения, $\beta^* = K_e S_y$ — обобщенный параметр скорости межфазовой реакции (K_e — константа скорости растворения или осаждения, S_y — удельная поверхность твердой фазы). При растворении солей $c < c^n$ ($\partial q / \partial t < 0$), а при их выпадении в осадок $c > c^n$ ($\partial q / \partial t > 0$).

Значения константы K_e для различных минералов изменяются в широком диапазоне значений. Например, авторы работы [21] в своих расчетах растворения флюоритсодержащих пород использовали для CaF_2 значение $K_e = (0,2-2) \cdot 10^{-6}$ см/с. Скорость растворения карбонатов контролируется содержанием (парциальным давлением — P_{CO_2}) в системе углекислого газа. Соответствующий процесс экспериментально изучался в работе [20].

Поскольку взаимодействие растворов с воднорастворимыми солями обычно протекает в диффузионной области (лимитирующей стадией процесса является диффузия компонентов через тонкий слой насыщенного раствора, окружающего растворяющийся минерал), то параметр K_e может считаться постоянной величиной только в достаточно узком диапазоне изменения скоростей фильтрационного потока. С другой стороны, нелинейность процесса обуславливается колебаниями обобщенного параметра β^* вследствие изменения активной поверхности растворения (осаждения). Н.Н.Веригин [4] показал, что такого рода эффекты наиболее значимы при дисперсном (объем-

ном) характере засоления грунтов; в этом случае необходимо принять

$$\beta^* = \gamma^* q^n / \rho_k^n \quad (n = 1/2);$$

здесь ρ_k — плотность соли, γ^* — кинетический коэффициент внутрипорового массообмена, зависящий от структурных и физико-химических свойств пористой среды. При пленочном (поверхностном) засолении минеральных частиц можно положить $n \approx 0$ и выражение (5.30), где $\beta^* = \text{const}$, является достаточно строгим.

Зависимость (5.30) экспериментально подтверждена для процесса растворения гипса, флюорита и некоторых других минералов.

Для процессов выщелачивания или химического выветривания труднорастворимых минералов или их ассоциаций характерно образование новых твердых фаз; равновесия между ними и растворенными компонентами анализируются с помощью термодинамических диаграмм состояния. Принципиальные сложности здесь обычно возникают в связи с необходимостью описания кинетики процессов, без которого их рассмотрение часто не оправдано. Соответствующие кинетические модели требуют отражения химических взаимодействий в явном виде — через парциальные концентрации реагирующих веществ c_i с учетом стехиометрических коэффициентов ν_i конкретных реакций.

* Проявление кинетического фактора часто объясняет инконгруэнтный характер процессов, когда при термодинамическом (равновесном) их описании наблюдается кажущееся несоответствие стехиометрических коэффициентов, находящихся в различных фазах.

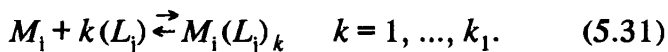
5.2.3. Гомогенные (внутрифазовые) взаимодействия

5.2.3.1. Комплексообразование

Ранее для любого химического компонента допускалось единственно возможное устойчивое состояние (миграционная форма) с заранее заданными физико-химическими параметрами, причем чаще всего априорно подразумевалась простая — ионная — форма существования компонентов. Вместе с тем, подобная идеализация может оказаться слишком грубым приближением для реальных гидрогеохимических систем, где для большинства элементов характерно несколько термодинамических состояний и отвечающих им форм переноса; эти же элементы могут обладать и различной степенью устойчивости в растворах.

Комплексообразование — процесс, дающий объяснение формированию в природных и техногенных растворах, наряду с диссоциированными ионами, ионных и молекулярных ассоциаций (в том числе органических). Ими могут быть относительно устойчивые заряженные или электронейтральные образования, состоящие из иона металла (центрального иона — комплексообразователя — M_i) и иона, группы ионов или электронейтральных молекул — лигандов — L_j , так что в данных обозначениях (опуская валентности) общую формулу комплексного соединения можно представить в виде $M_i(L_j)_k$ (k — координационное число).

Простейшая реакция комплексообразования протекает путем последовательного присоединения к центральному иону лигандов (при одновременно идущих обратных реакциях диссоциации промежуточных соединений):



Реакции (5.31) отвечает константа устойчивости комплексного соединения K_{ijk} , численные значения которой при известных значениях стандартных свободных энергий образования соответствующих

равновесных форм рассчитываются известными термодинамическими методами [17].

Параллельно с этой центральной реакцией в водных растворах обычно идут реакции гидратации и протонирования ионов-комплексообразователей и лигандов [6,17,28,43].

Понимая несовершенство исходной модели (5.31), мы, тем не менее, видим в ней и существенные достоинства: уже в настоящее время она реально может быть обеспечена необходимой параметрической базой. Важно также, что на рассмотренные здесь представления не накладывается принципиальных ограничений для их развития по линии более сложных гомогенных взаимодействий, например, в системе потенциалзадающих элементов, когда взаимодействия протекают с переносом электронов.

Особую группу соединений составляют металлоорганические комплексы: сильными комплексообразователями в природных водах являются фульво- и гуминовые кислоты [17,18]; для техногенных стоков характерна комплексация ионов металлов с синтетическими органическими веществами. Несмотря на массовый характер миграции элементов (особенно микрокомпонентов) в форме органокомплексов, анализ процесса обычно затруднен ввиду дефицита термодинамической информации. Только в последнее время в литературе начинают появляться более-менее достоверные данные о термодинамических параметрах такого рода систем.

Так, в работе [28] приведены результаты определения констант устойчивости K_{121} хелатных комплексов, образованных ионами тяжелых металлов с фульвокислотами (ФК) и нитрилтриуксусной кислотой (НТА) по схеме (5.31, $i = 1, j = 2, k_1 = 1$) — табл. 5.1.

Таблица 5.1

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

Поскольку каждой реакции комплексообразования соответствует свое уравнение для константы равновесия, нетрудно найти обобщенные соотношения между суммарными (практически определяемыми) концентрациями металлов c^T и лигандов c^T и парциальными концентрациями этих компонентов в химически несвязных формах c_i и c_j .

5.2.3.2. Исходные представления о коллоидных формах переноса загрязнителей

Пристальное внимание к коллоидам в последние годы обусловлено ролью, которую они играют в качестве потенциального носителя радионуклидов. Именно присутствием таких коллоидов в растворах объясняются частые расхождения расчетных (оцениваемых на основе лабораторных сорбционных экспериментов) и наблюдаемых в природных условиях скоростей миграции радионуклидов [30,52]. Принято считать, что к коллоидным относятся системы, у которых размеры частиц находятся в пределах 1 нм — 10 мкм.

Концентрации в природных водах коллоидов, ядра которых часто представлены молекулами кремниевой кислоты или глинистыми частицами, не превышают первых мг/л [66,67]. Однако в сравнении с концентрациями радионуклидов вблизи значений ПДК (10^{-7} – 10^{-9} мг/л) данные величины весьма существенны.

Коллоиды — носители радионуклидов — могут иметь естественное происхождение, связанное с природными процессами физико-химического выветривания пород, или формироваться за счет воздействия собственно источников радиоактивного загрязнения на вмещающие их породы, например, при разрушении сильно разогретых капсул высокоактивных отходов [32] или при выщелачивании глинистых экранов хранилищ слабо активных отходов [60]. Своеобразным подвижным адсорбентом являются некоторые виды бактерий и органическое вещество. Отмечаемая повышенная роль микробиологических процессов в коллоидообразовании [46] затрудняет его изучение в лаборатории.

Сорбционные равновесия в системе «раствор—коллоиды—порода» описываются при помощи следующих реакций:

1) реакции адсорбции радионуклида (M_1) коллоидной частицей (M_2)



приводящей к образованию соединения $M_1 M_2$;

2) реакции адсорбции радионуклида породой (R)



Таким образом, равновесные соотношения между концентрациями вещества в растворе c_1 , c_2 и c_{12} и на породе $\bar{c}_1$ выглядят так:

$$c_{12} = K_{12} c_1 c_2, \quad (5.34)$$

$$\bar{c}_1 = K_1 c_1. \quad (5.35)$$

Коэффициенты пропорциональности (равновесия) определяются следующими соотношениями:

$$K_{12} = F K_d, \quad K_1 = \rho K_d, \quad (5.35, a)$$

где K_d — коэффициент сорбционного распределения, ρ — объемная плотность частицы, F — некоторый коэффициент «усиления» ($F \gg 1$), указывающий на более сильное взаимодействие коллоида и нуклида в сравнении с сорбцией на минеральном скелете породы [66,67].

Базируясь на представленных соотношениях, легко рассчитать процент радионуклидов, ассоциированных с коллоидами, в зависимости от концентрации коллоидов c_2 и коэффициента распределения. Соответствующие оценки показывают, что при $c_1 > 1-10$ мг/л и $K_d > 10^5-10^6$ см³/г насыщенность раствора радиоколлоидами превышает 10 %. Данные значения c_2 и K_d вполне реальны для рассматриваемых систем [30,67].

Если принять во внимание ограниченную сорбционную способность коллоидных частиц, характеризующуюся некоторой предельной емкостью насыщения $S_m^{\max}$ (безразмерная величина), то справедливо соотношение:

$$c_{12} = \frac{S_m^{\max} K_m c_1 c_2}{1 + K_m c_1}, \quad (5.36)$$

которое отождествляется с изотермой сорбции Лэнгмюра*.

Альтернативная модель формирования «радиоколлоидов» связывается с каким-либо из физико-химических процессов, которые могут обусловить рост содержания в растворе растворенной формы радионуклида свыше некоторой критической величины c_o , отвечающей пределу растворимости. В этом случае общее (суммарное) содержание радионуклида (c^T) определяется соотношением:

$$c^T = \begin{cases} c_s, & \text{если } c^T < c_o \\ c_s + c_o, & \text{если } c^T \geq c_o \end{cases}. \quad (5.37)$$

* Ibaraki M., Sudicky E.A. Colloid-facilitated contaminant transport in discretely fractured porous media: 1. Numerical formulation and sensitivity analysis. — Water Res. Res., 1995, v.31, №12, p.p.2945-2960.

Согласно такой модели, имеет место и обратный процесс — распад (растворение) коллоидной частицы при снижении суммарной концентрации ниже значения c_0 .

Следует подчеркнуть, что большинство сведений о переносе радионуклидов коллоидами получено в лабораторных условиях; убедительные подтверждения важности этого механизма переноса в полевых условиях пока отсутствуют, — накапливаются материалы, скорее, негативного свойства [36]. Кроме того, мало понятно, как решать главный вопрос — о переносе самих коллоидов, весьма чувствительном к любым фильтрационным неоднородностям и межфазовым переходам; например, установлено интенсивное осаждение коллоидов на границе водной и газовой фаз [68]. В трещиноватых породах коллоиды, судя по всему, перемещаются гораздо более «избирательно», нежели нейтральные трассеры: они проникают, преимущественно, в незакольматированные трещины повышенного раскрытия, плохо усваиваются материалом матрицы (если они не сорбируются на стенках трещин), так что и дисперсионные эффекты по отношению к коллоидам отнюдь не отвечают условиям трассеров.

5.2.3.3. Деструкция химических соединений

Под этим процессом понимаются различные превращения, которые выражаются в постепенном распаде (разложении) неустойчивых водорастворенных компонентов, входящих в состав мигрирующих растворов. Они могут протекать как самопроизвольно (например, радиоактивный распад), так и обуславливаться воздействием разнообразных небиотических факторов (например, окисление, гидролиз) или биотическим разложением [7,24].

Простейшей является линейная модель одноступенчатой ($A \xrightarrow{\lambda_p} B$) деструкции (распада); этой модели соответствует уравнение кинетики первого порядка, согласно которому интенсивность процесса в статике

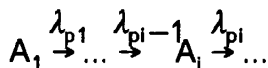
$$W_s = \lambda_p n_s, \quad (5.38)$$

где λ_p — константа распада.

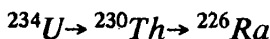
Значения λ_p для радиоактивных элементов-изотопов легко получаются расчетным путем по известным периодам их полураспада ($T_{1/2}$): $\lambda_p = 0,693/T_{1/2}$. Ниже приводятся данные, характеризующие распад изотопов в сточных растворах атомно-энергетических комплексов:

Изотоп	$T_{1/2}$, сут	λ_p , сут ⁻¹
¹³¹ I	8,05	$8,61 \cdot 10^{-2}$
⁶⁰ Co	$2,28 \cdot 10^3$	$3,04 \cdot 10^{-4}$
¹³⁴ Cs	$7,46 \cdot 10^2$	$9,29 \cdot 10^{-4}$
¹³⁷ Cs	$1,9 \cdot 10^4$	$6,36 \cdot 10^{-5}$
⁹⁰ Sr	$1,02 \cdot 10^4$	$6,86 \cdot 10^{-5}$
³ H(тритий)	$4,54 \cdot 10^3$	$1,52 \cdot 10^{-4}$

Периоды полураспада отдельных тяжелых изотопов, характерных для высокотоксичных стоков урановых (добывающих и перерабатывающих) производств, измеряются тысячами лет. Для многих из них характерен многоступенчатый распад, протекающий по схеме:



Так, треступенчатый распад



характеризуется временами $T_{1/2}$: $8,88 \cdot 10^7$, $2,80 \cdot 10^7$, $5,82 \cdot 10^5$ сут — соответственно, для урана-234, тория-230 и радия-226.

Скорость изменения объемного содержания в поровом растворе i -го дочернего продукта W_{si} определяется не только интенсивностью его распада, но и накоплением за счет распада материнского ($i-1$ -го) компонента [42]:

$$W_{si} = \lambda_{pi} n c_i - \lambda_{pi-1} n c_{i-1}. \quad (5.39)$$

Распад компонентов продолжается и на породе — в адсорбированном состоянии, что позволяет записать:

$$W_s = \lambda_p (nc + q) \text{ и } W_{si} = \lambda_{pi} (nc_i + q_i) - \lambda_{pi-1} (nc_{i-1} + q_{i-1}) \quad (5.40)$$

— для одно- и многоступенчатого распада, соответственно.

Основываясь на формулах (5.39), можно показать, что двухступенчатая деструкция в свободном неподвижном растворе описывается уравнениями [42]:

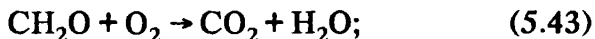
$$\bar{c}_1(t) = \bar{c}_1' e^{-\lambda_{p1}t}, \quad (5.41)$$

$$\bar{c}_2(t) = \bar{c}_2' e^{-\lambda_{p2}t} + \frac{\lambda_{p1}}{\lambda_{p2} - \lambda_{p1}} \bar{c}_1' (e^{-\lambda_{p1}t} - e^{-\lambda_{p2}t}), \quad (5.42)$$

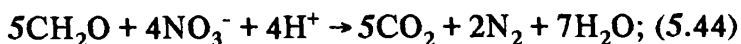
где $\bar{c}_i' = (\lambda_{pi}/\lambda_i) c_{i0} / [c_{i0} + (\lambda_{pi}/\lambda_{p1}) c_{20}]$; c_{i0} — начальная (в момент $t = 0$) концентрация i -го компонента.

Среди рассматриваемых процессов особое место занимают окислительно-восстановительные реакции, протекающие при микробиологическом посредничестве. К такого рода кинетическим взаимодействиям относятся:

- окисление органического вещества в аэробных условиях по формальной схеме:



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



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



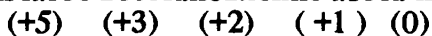
При совместном протекании реакций (5.44) и (5.45) возможно восстановление нитратов в присутствии HS^- (или H_2S):



На процессе денитрификации имеет смысл остановиться подробнее, ибо нитратные соединения являются наиболее распространенными антропогенными загрязнителями подземных вод. Различают два вида денитрификации [48] — гетеротрофную и автотрофную.

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

лородсодержащие азотные соединения [47,48], обеспечивая ступенчатое восстановление азота по схеме:



так что суммарную реакцию окисления органики можно представить в виде (5.44). Таким образом, в этом случае оказывается, что гетеротрофная реакция денитрификации контролируется диффузионно-дисперсионными и конвективными процессами, обеспечивающими связь различных зон водоносной толщи с зоной аэрации — главным поставщиком растворенного кислорода. Понятно, что вблизи зеркала грунтовых вод содержания нитратов должны быть максимальными.

Автотрофной денитрификацией объясняется термодинамическая нестабильность нитратов в зонах дефицита или отсутствия растворенных органических соединений. В этом случае донорами электронов для некоторых видов бактерий выступают восстановленные формы железа, марганца и серы (такие как Mn^{2+} , Fe^{2+} и HS^-) — см., например, реакцию (5.45,а). В этой связи можно отметить, что автотрофная денитрификация активно протекает в водоносных горизонтах с повышенным содержанием сульфидов [61]. Так как глинистые прослои обычно содержат сульфидные минералы в повышенных концентрациях, они также могут служить катализатором реакций денитрификации в геологических толщах [54].

Описание этих процессов в некоторых частных вариантах может также основываться на уравнении кинетики (5.38). Так, в работе [7] В.М.Гольдберг приводит значения констант деструкции (вызываемой процессами химического, биохимического и фотохимического окисления) целого ряда органических веществ — загрязнителей. По этим данным выделяются три их группы: «биологически мягкие» — $\lambda_p = 0,3-1,4 \text{ сут}^{-1}$ «промежуточные» — $\lambda_p = 0,06-0,5 \text{ сут}^{-1}$ и «биологически жесткие» — $\lambda_p = 0,006-0,05 \text{ сут}^{-1}$.

В последнюю группу попадают, в частности, многие пестициды [24]: DDT — $\lambda_p = (0,7-1,0) \cdot 10^{-3} \text{ сут}^{-1}$, ГХЦГ и ФОС — $\lambda_p = (1-2) \cdot 10^{-3} \text{ сут}^{-1}$, Севин — $\lambda_p = (4-6) \cdot 10^{-3} \text{ сут}^{-1}$. К низким значениям константы λ_p привела интерпретация данных полевых экспериментов по изучению природной дегградации ряда углеводородов ароматического ряда [50]: бензин ($0,007 \text{ сут}^{-1}$), П-ксилен ($0,0107 \text{ сут}^{-1}$), нафтаден ($0,0064 \text{ сут}^{-1}$) и О-дихлорбензин ($0,0046 \text{ сут}^{-1}$).

При изучении загрязнения подземных вод сельскохозяйственными стоками, содержащими азотные соединения, В.Г.Самойленко и Р.М.Забулисом [24,10] были получены значения константы денитрификации $\lambda_p = (1,0-2,2) \cdot 10^{-4} \text{ сут}^{-1}$. По данным авторов работы [40], константа сульфаторедукции λ_p , установленная в результате режимных наблюдений, имеет значение $1,9 \cdot 10^{-4} \text{ сут}^{-1}$.

В другой работе [48] проведена систематизация лабораторных и полевых данных раздельно для гетеротрофной и автотрофной денитрификации. Показано, что в том и другом случае скорость процесса варьирует в широком диапазоне значений — от сотых до единиц $\text{мгN}/(\text{л} \cdot \text{сут})$.

В то же время, существует и точка зрения, что для ряда процессов микробиологического разложения (при высоком содержании в растворах микроорганизмов) более надежные результаты дает обращение к уравнению кинетики «нулевого порядка»:

$$W_s = nK_0 = \text{const.} \quad (5.46)$$

В определенных условиях удовлетворительные результаты достигаются при описании деструкции уравнением Михаэлиса-Ментен:

$$W_s = -\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{n K_0 K_1 c}{1 + K_1 c}, \quad (5.47)$$

которое в предельных вариантах отражает закономерности кинетики первого (при низких концентрациях) и нулевого (при высоких концентрациях) порядков; здесь K_0 и K_1 — кинетические константы, причем $K_0 K_1 = \lambda_p$.

В общем случае описание кинетических окислительно-восстановительных процессов требует привлечения более сложных (многокомпонентных) моделей, в которых в явном виде учитывается активность (метаболизм) различных функциональных групп бактерий [49].

Концептуализация такого рода процессов — предмет интенсивных теоретических и экспериментальных проработок последнего времени. Потребность в них диктуется практической необходимостью обоснования мероприятий по реабилитации загрязненных подземных вод.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ К ГЛАВЕ 5

1. Алекин О.А. Основы гидрохимии. — Л.: Гидрометеиздат, 1970, 443 с.
2. Брилинг И.А. Нитратное загрязнение подземных вод удобрениями. — Обзор, Гидрогеология и инженерная геология. — М.: Геоинформ, 1985, 49 с.
3. Веницианов Е.В., Рубинштейн Р.И. Динамика сорбции из жидких сред. — М.: Наука, 1983, 237 с.
4. Веригин Н.Н. Методы прогноза солевого режима грунтовых вод. — М.: Колос, 1979, 337 с.
5. Гаррелс Р.М., Крайст Ч.Л. Растворы, минералы, равновесия. — М.: Мир, 1968, 368 с.
6. Гензель Г.Н., Карачевцев Н.Ф., Конасавский П.К., Кравчук С.В., Мироненко В.А., Румынин В.Г. Решение задач охраны подземных вод на численных моделях/ Под общей редакцией Мироненко В.А. — Недра, 1992, 240 с.
7. Гольдберг В.М., Газда С. Гидрогеологические основы охраны подземных вод от загрязнения. — М.: Недра, 1984, 262 с.
8. Драйвер Дж. Геохимия природных вод. — М.: Мир, 1985, 440 с.

9. Едигарова И.А., Красюков В.Н., Лапин И.А., Никаноров А.М. Комплексообразующая способность растворенного органического вещества природных вод. — Водные ресурсы, 1989, №4, с.122-129.
10. Забулис Р.М. Охрана подземных вод Литовской ССР от загрязнения в районах крупных животноводческих комплексов (методические рекомендации). — Вильнюс, 1988, 71 с.
11. Закутин В.П. Окислительно-восстановительные состояния хозяйственно-питьевых подземных вод. — Отечественная геология, 1992, №9, с.65-73.
12. Кивва С.Л., Колябина И.Л., Пашко С.В. и др. Моделирование процесса миграции радионуклидов в почвогрунтах. — Препринт НПО «Припять», Чернобыль, 1992, 51 с.
13. Коноплев А.В., Борзилов В.А., Бобовникова Ц.И. и др. Распределение радионуклидов, выпавших в результате аварии на Чернобыльской АЭС, в системе почва—вода. — Метеорология и гидрология, 1988, №12.
14. Крайнов С.Р., Закутин В.П. Геохимико-экологическое состояние подземных вод России (причины и тенденции изменения химического состава подземных вод). — Геохимия, 1994, №3, с.312-328.
15. Крайнов С.Р., Рыженко Б.Н. Пути и способы прогностического моделирования химического состава загрязненных подземных вод. — Геохимия, 1994, №5, с.739-754.
16. Крайнов С.Р., Фойгт Г.Ю., Закутин В.П. Геохимические и экологические последствия изменений химического состава подземных вод под влиянием загрязняющих веществ. — Геохимия, 1991, с.169-182.
17. Крайнов С.Р., Шваров Ю.В., Гричук Д.В. и др. Методы геохимического моделирования и прогнозирования в гидрогеологии. — М.: Недра, 1988, 254 с.

18. Крайнов С.Р., Швец В.М. Основы геохимии подземных вод. — М.: Недра, 1980, 285 с.
19. Крайнов С.Р., Швец В.М. Геохимия подземных вод хозяйственно-питьевого назначения. — М.: Недра, 1987, 237 с.
20. Лехов А.В. Физико-химические модели гидрогеодинамики массивов карбонатных карстующихся пород/ Автореф. докторской диссертации. — М., 1987, 31 с.
21. Лялько В.И. Тепломассоперенос в литосфере. — Киев: Наукова думка, 1985, 260 с.
22. Посохов Е.В. Общая гидрогеохимия. — Л.: Недра, 1975, 208 с.
23. Рыбальченко А.И., Пименов М.К., Костин П.П. и др. Глубинное захоронение жидких радиоактивных отходов. — М.: ИздАТ, 1994, 256 с.
24. Самойленко В.Г., Якубова Р.А., Кахаров А.С. Охрана подземных вод от загрязнения ядохимикатами. — Ташкент: «Махнат», 1987, 190 с.
25. Соботович Э.В., Ольховик Ю.А., Ольштынский Ю.А. Защитная способность грунтов в районах радиогеохимического влияния аварийных выпадений Чернобыльской АЭС. — Атомная энергия, 1991, т.70, вып. 6.
26. Спозито Г. Термодинамика почвенных растворов. — Л.: Гидрометеиздат, 1984, 240 с.
27. Тютюнова Ф.И. Физико-химические процессы в подземных водах. — М.: Наука, 1976, 128 с.
28. Тютюнова Ф.И. Гидрогеохимия техногенеза. — М.: Наука, 1987, 335 с.
29. Brusseau M.L. The effect of nonlinear sorption on transformation of contaminants during transport in porous media. — Journal of Contaminant Hydrology, 1995, v.17, №4, p.p.277-291.

30. Buddemeier R.W., Hunt J.R. Transport of colloidal contaminants in groundwater: Radionuclide migration at the Nevada test site. — Appl. Geochem., 1988, №3, p.p.535-548.
31. Calibration and Reliability of Groundwater Modeling. — Model CARE 90, IAHS Publication, The Hague, №195.
32. Castaing R. Un model simple pour la migration dans un milieu fracture. — Journ. Hydrol., 1993, v.125, №1-2, p.p.55-92.
33. Charbeneau R.I. Groundwater contaminant transport with adsorption and ion exchange: method of characteristics for the case without dispersion. — Water Res. Res., 1981, v.17, №3, p.p.705-713.
34. Cosby B.J., Hornberger G.M., Wright R.T., Gallaway J.N. Modeling the effects of acid deposition: Control long-term sulfate dynamics by soil sulfate adsorption. — Water Res. Res., 1986, v.22, №8, p.p.1283-1291.
35. Coupled Processes Associated with Nuclear Waste Repositories. Edited by C.-F. Tsang. Academic Press, Inc., 1987, 801 p.
36. Cramer J.J., Smellie J.A.T. Final Report of the AECL/SKB Cigar Lake Analysis Study. AECL Research, 1994, 393 p.
37. Cresser M., Edwards A. Acidation of freshwater. Cambridge University Press, 1987, 136 p.
38. Dutton A.R. Brackish water in unsaturated confining beds at a Texas lignite mine. — Ground Water, 1985, №1, p.p.42-51.
39. Emrek A.T. The influence of heterogeneous rock chemistry on the sorption of radionuclides in flowing groundwater. — Journal of Contaminant Hydrology, 1993, v.13, №1/4, p.p.131-141.
40. Frind E., Duynisveld W.H.H., Strebel O., Boettcher J. Modelling of multicomponent transport with microbial

transformation in groundwater: The Furthberg case. — *Water Res. Res.*, 1990, v.26, №8, p.p.1707-1719.

41. Grindrod P., Edwards M.S., Higgs J.W., Williams G.M. Analysis of colloid and tracer breakthrough. — *Journal of Contaminant Hydrology*, 1996, v.21, №1-4, p.p.243-253.

42. Gureghian A.B., Jansen G. One-dimensional analytical solutions for the migration of a three-member radionuclide decay chain in a multilayered geologic media. — *Water Res. Res.*, 1985, v.21, №5, p.p.733-742.

43. Hirsch D., Nir S., Banin A. Prediction of cadmium complexation in solution and adsorption to montmorillonite. — *Soil Sci. Soc. of Am. Journ.*, 1989, v.53, №3, p.p.716-721.

44. Kamineni D.C., Vandergraaf T.T., Ticknor K.V. Characteristics of radionuclide sorption on fracture-fillings minerals in the Bye-Dashwa Lakes Pluton, Atikokan, Ontario. *Canadian Mineralogist*, 1983, v.21, p.p.625-636.

45. Kargbo D.M. Chemical contaminant reactions and assessment of soil cleanup levels for protection of groundwater. — *Environmental Geology*, 1994, v.23, №2, p.p.105-113.

46. King K.L. and Killoy R.W.D. Chemical controls on subsurface radionuclide transport: A review of studies processes in sand and gravel aquifers: Field and Modelling Studies. Proceedings of the Int. Conf. and Workshop held in Ottawa, Canada, October 1-4, p.p.737-756.

47. Kinzelbach W., Schafer W., Herzer J. Numerical modeling of natural and enhanced denitrification processes in aquifer. — *Water Res. Res.*, 1991, v.27, №6, p.p.1123-1135.

48. Korom S.F. Natural Denitrification in the Saturated Zone: A review. — *Water Res. Res.*, 1992, v.28, №6, p.p.1657-1668.

49. Lensing H.J., Vogt M., Herrling B. Modeling of biologically mediated redox processes in the subsurface. — *Journal of Hydrogeology*, 1994, v.159, p.p.125-143.

50. Mac Intyre W.G., Boggs M., Antworth C.P., Stauffer B.T. Degradation kinetics of aromatic organic solutes introduced into a heterogeneous aquifer. — *Water Res. Res.*, 1993, v.29, №12, p.p.4045-4051.
51. March K.B., Tillman R.W., Syers J.K. Charge relationships of sulfate sorption by soils. — *Soil Sci. Soc. Am. Journal*, 1987, v.51, p.p.318-323.
52. Mc Dowell-Boyer L.M., Hunt J.R., Sitar N. Partical transport through porous media. — *Water Res. Res.*, 1986, v.22, №13, p.p.1901-1921.
53. Rainwater K.A. Cation exchange in groundwater solute transport. — *Journ. of Hydraulic Engineering*, 1988, v.114, №2, p.p.173-191.
54. Robertson W.D., Russel B.M., Cherry J.A. Attenuation of nitrate in aquitard sediments of southern Ontario. — *Journal of Hydrology*, 1996, v.180, №1-4, p.p.267-281.
55. Ruminin V.G., Mironenko V.A., Konosavsky P.K., Pereverzeva S.A. Development of Hydrogeological modelling approaches for assessment of consequences of Hazardous accidents at nuclear power plants. — *Report of Lawrence Berkeley Laboratory*, 1994, LBL-36211, UC-603, RAC-5, 44 p.
56. Siegel M.D., Leckie J.O., Park S.W., Phillips S.L., Sowards T. Studies of radionuclide sorption by clays in the Culebra Dolomite at the Waste Isolation Pilot Plant Site, Southeastern New Mexico. — *Sandia Report SAND89-2387*, UC-721, 1990, 16 p.
57. Shuman L.M. Effect of ionic strength and anions on zink adsorption by two soils. — *Soil Sci. Soc. of Amer. Journ.*, 1986, v.50, №6, p.p.1438-1442.
58. Transport and Mass-Exchange Processes in sand and Gravel Aquifers. *Proc. of the International Conference. AECL Research*, 1990, 1370 p.

59. Ticknor K.V., Vandergraaf T.T., Kamineni D.C. Radionuclide sorption on primary and fracture-filling minerals from the East Bull Lake Pluton, Massey, Ontario, Canada. *Applied Geochemistry*, 1989, v.4, p.p.163-176.
60. Torok J., Buckley L.P., Woods B.L. The Separation of radionuclide migration by solution and particle transport in soil. — *Journal of Contaminant Hydrology*, 1990, v.6, p.p.185-203.
61. Van Beek C.G.E.M., Van Puffelen J. Changes in the chemical composition of drinking water after well infiltration in an unconsolidated sandy aquifer. — *Water Res. Res.*, 1987, v.23, №1, p.p.69-76.
62. Van Cappellen P., Charlet L., Stimm W., Wersin P. A surface complexation model of the carbonate mineral aqueous solution interface. — *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 1993, v.57, p.p.3505-3518.
63. Van der Lee, Ledoux E., de Marsily G. Modeling of colloidal uranium transport in a fractured medium. — *Journ. of Hydrology*, 1992, v.139, p.p.135-158.
64. Vandergraaf T.T., Abry D.R.M. Radionuclide sorption in drill core material from the Canadian Shield. — *Nuclear Technology*, 1982, v.57, p.p.399-412.
65. Vandergraaf T.T., Ticknor K.V., George I.M. Reactions between technetium in solution and iron-containing minerals under oxic and unoxic conditions. *American Chemical Society. ACS Symposium Series*, 1984, v.246, p.p.26-43.
66. Vilks P., Dequelare C. Sorption behavior of Sr-85, I-131 and Cs-137 on colloids and suspended particles from the Grimsel Test Site, Switzerland. *Applied Geochemistry*, 1991, v.6, p.p.553-563.
67. Vilks P., Miller H.G., Doern D.C. Natural colloids and suspended particles in the Whiteshell Research Area, Manitoba, Canada, and their potential effects on radiocolloid formation. *Applied Geochemistry*, 1991, v.6, p.p.565-574.

68. Wan J., Wilson J.L. Visualization of the role of the gas-water interface on the fate and transport of colloids in porous media. — Water Res. Res., 1994, v.30, №1, p.p.11-23.
69. Yeh G.T., Tripathi V.S. A model for simulating of reactive multispecies component: model development and demonstration. — Water Res. Res., 1991, v.27, №12, p.p.3075-3094.

Роль процессов физико-химического взаимодействия при движении растворов в горных породах проявляется: 1) в полном или выборочном концентрировании растворенных веществ на поверхности минерального скелета, приводящем к снижению общего потенциала массопереноса (характерными примерами здесь служат физическая сорбция и осаждение), 2) в трансформации качественного состава фильтрующихся растворов за счет обмена компонентами между жидкой и минеральной фазами (такой эффект могут давать, например, процессы ионного обмена и растворения, способствующие обогащению растворов элементами обменного — солевого комплекса пород), а также 3) в реакциях физико-химического превращения, обуславливающих распад отдельных химических компонентов и соединений с образованием новых составляющих.

Придерживаясь ранее принятой схемы, рассмотрим вначале соответствующие модели массопереноса в гомогенных средах (разд. 6.1), а затем — более общие модели, отвечающие условиям миграции вещества в гетерогенных водоносных системах (разд. 6.2).

6.1. Миграция активных компонентов в гомогенных породах

6.1.1. Сорбционные и ионообменные взаимодействия

6.1.1.1. Равновесная сорбция

Сорбция из раствора по линейному или нелинейному — при выпуклой изотерме — законам не меняет

первоначальной формы концентрационного фронта поршневого вытеснения [3]. Составляя уравнение баланса вещества для любой ленты или трубки тока подобно тому, как это делается в работах [2,5], приходим к выражению для действительной скорости массопереноса:

$$u = \frac{v}{n + \Delta n} \left(\Delta n = \frac{\Delta q}{\Delta c} \right); \quad (6.1)$$

здесь $\Delta c = c_o - c^o$, $\Delta q = q_o - q^o$; q_o и q^o — концентрации компонентов на породе, равновесные граничной (c_o) и начальной (c^o) концентрациям в растворе ($c_o > c^o$). Таким образом, сорбция может быть учтена в расчетных зависимостях для схемы поршневого вытеснения заменой активной пористости (n) на эффективную емкость:

$$n_s = n + \Delta n. \quad (6.2)$$

Так, для линейной изотермы Генри (5.4) $\Delta n = K_d \rho$ (или $\Delta n = K_a S_b$ — в трещиноватых породах — см. 5.5), а для изотермы Лэнгмюра (5.6) $\Delta n = K Q_v / (1 + K c_o) (1 + K c^o)$ ($Q_v = Q_{\max} S_b$ — в трещиноватых породах — разд. 5.2.1.1).

В западной литературе для характеристики линейной сорбции чаще используется так называемый «retardation factor» (коэффициент сорбционной задержки) $R = 1 + \Delta n/n$:

$$R = 1 + \frac{K_d \rho}{n}, \quad (6.3)$$

$$R = 1 + \frac{K_a S_b}{n} \quad (6.3,a)$$

соответственно для пористых и трещиноватых пород.

По своему физическому смыслу эта величина отвечает степени замедления скорости переноса сорбируемого вещества (u_c) по сравнению со скоростью движения растворителя (воды) u_w : $R = u_w/u_c$.

Более сложны для описания нелинейные сорбционные процессы при заметном развитии в пласте дисперсионных (диффузионных) явлений. В этом случае целесообразно связать интенсивность поглощения компонентов из раствора W_s со скоростью изменения массового потока в порах через изотерму сорбции:

$$W_s = \frac{\partial q}{\partial t} = f' \frac{\partial c}{\partial t}, \quad (6.4)$$

где $f' = \frac{d}{dc} f(c)$ — производная от изотермы сорбции по концентрации в точке с равновесным содержанием компонента c . Подстановка выражения (6.4) в общее уравнение переноса (1.20) позволяет исключить из него переменную W_s :

$$n' \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla J = 0, \quad n' = n + f', \quad (6.5)$$

где n' — расчетный параметр, учитывающий увеличение емкости системы за счет сорбционных процессов. Так как при изотерме Генри (5.4) $f' = \Delta n = \rho K_d$, то во всех расчетных зависимостях для микродисперсии сорбция по линейному закону может быть учтена путем формальной замены параметра активной пористости n на эффективное значение n_s (6.2). Однако в более общем случае нелинейных изотерм сорбции емкость пород n' оказывается зависящей от текущей концентрации c компонентов в фильтрующемся растворе; в частности, для изотермы сорбции Лэнгмюра $f' = KQ_v / (1 + Kc)^2$.

Характер влияния сорбции на режим миграции во многом определяется типом нелинейности изотермы. Так, при *выпуклой изотерме* (производная f' уменьшается с ростом концентрации),

* В данном разделе делается предположение, что сорбция и дисперсия действуют на одном и том же характерном микроуровне.

емкость пород оказывается более высокой для точек концентрационного фронта с относительно низким содержанием компонента. В результате изолинии с повышенными значениями концентрации перемещаются относительно быстрее и ширина переходной зоны испытывает тенденцию к сокращению со временем. Таким образом, в противоположных направлениях действуют два фактора: первый — продольная дисперсия — направлен на размыв фронта, второй — сорбция — способствует сжатию фронта. Эти две тенденции позволили выдвинуть физическую предпосылку о возможности взаимной компенсации действия двух механизмов на некоторой стадии переноса, отвечающей асимптотическому режиму [3,39]: фронт перемещается параллельно самому себе (увеличение размера зоны рассеяния по времени не происходит) с постоянной скоростью

$$u = \frac{v}{n + \Delta n}, \quad \Delta n = \frac{K Q_v}{\beta^e \beta^r}, \quad (6.6)$$

где $\beta^e = 1 + Kc_0$, $\beta^r = 1 + Kc^0$. Значение концентрации c_* на фронте вытеснения рассчитывается по формуле [39]:

$$c_* = \frac{1}{K} (\sqrt{\beta^e \beta^r} - 1). \quad (6.7)$$

Нетрудно показать, что $c_* > 0,5c_0$.

Отсюда следует, что нелинейная сорбция рассматриваемого типа может оказывать важный благоприятный эффект при переносе загрязнений, опасных даже в малых концентрациях (например, радионуклидов): благодаря ей происходит подавление наиболее продвинутой части ореола загрязнения.

Полное описание квазистационарного фронта дается решением [39]:

$$\left(\frac{c_0 - c}{c_0 - c_*} \right)^{\beta^e} \left(\frac{c_* - c^0}{c - c^0} \right)^{\beta^r} = \exp \left[\frac{K Q_v (\beta^{-r} - \beta^{-e})}{n + \Delta n} \frac{vx}{D_L} \right]. \quad (6.8)$$

В соответствии с ним, размер переходной зоны Δx_n оценивается величиной

$$\Delta x_n \approx \delta_L (1 + n/\Delta n) \frac{\sqrt{\beta^e} + \sqrt{\beta^r}}{\sqrt{\beta^e} - \sqrt{\beta^r}}. \quad (6.9)$$

При *вогнутой изотерме* сорбции оба фактора — механическая дисперсия и нелинейная сорбция — действуют однонаправленно. Однако, учитывая, что дисперсия обуславливает растяжение фронта со скоростью, пропорциональной $\sqrt{t}$, а нелинейность сорбционного процесса обеспечивает рост размера переходной зоны со скоростью, пропорциональной t , можно предположить, что со временем вклад продольной гидродисперсии в суммарный процесс рассеяния станет незначительным [3]; поэтому на длительных этапах массопереноса общий размер переходной зоны составит:

$$\Delta x_n \approx \left[\frac{1}{n + f'(c^o)} - \frac{1}{n + f'(c_o)} \right] \cdot v \cdot t. \quad (6.10)$$

При десорбции ранее сорбированных компонентов характер развития концентрационных полей во времени для случаев выпуклой и вогнутой изотерм меняется на противоположный — в сравнении с только что рассмотренными закономерностями. Важно, что взаимное наложение сорбционных и десорбционных волн, происходящее, в частности, при смене граничной концентрации, способствует погашению суммарного концентрационного возмущения, причем значимость такого рода эффектов может быть выше, чем дисперсионное «сглаживание» максимальных концентраций.

При «нулевой» десорбции, т.е. при сорбционном осаждении водная концентрация начинает контролироваться растворимостью продуктов осаждения. При этом выпуклая изотерма постепенно переходит в вогнутую и, наконец, достигает предела, при котором осаждение доминирует в сорбционном процессе: грунт неограниченно «сорбирует» вещество из раствора, но концентрация последнего остается постоянной [52].

Например, трудно различимыми по внешним признакам являются сорбция комплексного соединения CdHCO^+ и осаждение минерала CdCO_3 .

6.1.1.2. Особенности проявления кинетики сорбционных процессов

Кинетика сорбционных процессов в простейшем варианте описывается в рамках линейной модели (5.27). Для одномерного переноса, когда допустимо пренебречь гидродисперсией и молекулярной диффузией, решение фундаментальной задачи, выраженное через специальные функции, имеет вид (3.39)^{*}, где

$$\eta = \frac{\alpha x}{v}, \quad \tau = \frac{\alpha}{\rho K_d} \left(t - \frac{x n}{v} \right). \quad (6.11)$$

Анализ этого решения [2,8] показывает, что, несмотря на отсутствие гидродисперсионных эффектов рассеяния, фронт переноса претерпевает размыв, проявляющийся на индикаторных графиках в постепенном изменении по потоку концентрации от значения $\bar{c} = 1$ до $\bar{c} = 0$. Такая форма графиков обусловлена кинетикой сорбционного процесса, интенсивность которого для разноименных точек фронта вытеснения меняется. При $t > 10K_f/\alpha$ ($K_f = \alpha K_d$) решение имеет асимптотику, близкую к решению уравнения одномерной микродисперсии (2.11), когда параметры n и D заменяются на эффективные коэффициенты

$$n_s = n + K_f, \quad D_{э\kappa} = \frac{K_f^2 v^2}{\alpha (n + K_f)^2}. \quad (6.12)$$

Более того, в ряде работ доказывается, что рассмотрение длительных асимптотических режимов переноса допускает объединение факторов рассеяния различной природы в обобщенном коэффициенте

* Полное решение данной задачи, учитывающее гидродисперсионное рассеяние, можно найти в работах [10,15].

$$D_3 = D_{3к} + D_{\Gamma} + D_m. \quad (6.12, a)$$

Таким образом, в гомогенных пористых породах влияние кинетики сорбции может быть более ощутимым, нежели микродисперсионное рассеяние. Это имеет место, когда $v/\alpha \delta_L > 0,1$.

Более сложно учитывается кинетика сорбционных процессов, дающих в статике нелинейные изотермы. Решение краевой задачи обычно отыскивается в виде функции распространяющейся («бегущей») волны, концентрационные точки которой перемещаются с постоянной скоростью:

$$u = v/(n + \Delta n), \Delta n = f(c_o)/c_o = q_o/c_o. \quad (6.13)$$

Такое — асимптотическое — поведение искомой функции возможно только на весьма длительных этапах массопереноса, когда кинетика межфазового процесса, направленная на размывание концентрационного фронта, компенсируется тенденцией к его сжатию, обусловленной нелинейностью процесса (выпуклая изотерма). Для случая изотермы Лэнгмюра (5.6) расчетная формула имеет вид:

$$\eta = r\tau - \ln [\varphi(\bar{c})] - 1, \quad (6.14)$$

$$\varphi(c) = \frac{\bar{c}^{(1+p)}}{(1 - \bar{c})^p}, p = (K c_o)^{-1}, r = \frac{1+p}{p K Q_v},$$

$$\eta = \frac{\alpha x}{v}, \tau = \alpha(t - t_o), \bar{c} = c/c_o.$$

Критерием применимости этого решения служит соотношение $\tau \geq \eta > 10$. Оно является необходимым, но недостаточным, поскольку возможность наступления асимптотической стадии процесса контролируется также степенью нелинейности изотермы; в известных нам литературных источниках этот вопрос не рассматривался.

Впрочем, изложенные выше соображения позволяют утверждать, что при изучении процессов длительного переноса в региональных масштабах усложнение моделей

переноса путем учета кинетического фактора чаще всего не оправдано: здесь является достаточным использование моделей равновесного обмена. По иному ведут себя процессы миграции в гетерогенных средах, где кинетика обмена обусловлена механизмами иного характера (разд. 6.2.2).

6.1.1.3. Ионообменные взаимодействия в потоке подземных вод

В настоящем разделе рассматриваются гидрохимические закономерности взаимного вытеснения (конвективного или конвективно-дисперсионного) в пласте с заметно выраженными ионообменными свойствами двух растворов, различающихся содержаниями доминирующих катионов c_1 и c_2 . Это — наиболее характерный для гидрогеохимии случай, отражающий подвижное взаимодействие основных (по катионному составу) генетических типов природных и техногенных вод. Например, он охватывает достаточно типичные условия загрязнения подземных вод кальциевого (магниевого) состава при интрузии концентрированных проточков существенно натриевого (калиевого) облика. В соответствующих оценках должны, конечно, приниматься во внимание и возможные колебания анионного состава мигрирующих растворов, а также диапазоны изменения общей минерализации (точнее, ионной силы) последних.

Разрабатываемые здесь приемы миграционных расчетов позволят в дальнейшем перейти к анализу более сложных трех-четырёхкомпонентных (по катионам) систем, хотя последние чаще всего могут быть сведены к рассматриваемым ниже упрощенным моделям.

В одномерном потоке без дисперсии процесс описывается уравнениями:

$$\begin{cases} n \frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial q_i}{\partial t} + v \frac{\partial c_i}{\partial x} = 0, & i = 1, 2, \\ n \frac{\partial c_o}{\partial t} + v \frac{\partial c_o}{\partial x} = 0 \end{cases} \quad (6.15)$$

(c_1 и c_2 — концентрации вытесняющего и вытесняемого катионов, c_o — концентрация анионов), дополненными соответствующими краевыми условиями, о которых речь пойдет ниже.

Так как анионы не участвуют в обменных реакциях, то скорость их продвижения по пласту определяется истинной скоростью фильтрации $u_o = v/n$. Это позволяет считать, что при однородных краевых условиях обмен в области $x < u_o t$ происходит при постоянном содержании в растворе анионов.

При *выпуклой изотерме* обмена (соответствующие критерии см. в разд. 5.2.1.3) со скоростью $u_2 = u_o$ должен перемещаться и передний фронт катионов, первоначально находящихся в составе поглощенного комплекса породы. Если задаться «нулевыми» начальными условиями, пренебрегающими содержанием вытесняющего катиона в пластовой воде,

$$c_1(x > 0, t = 0) = 0,$$

то концентрация катионов c_2 эквивалентна концентрации анионов: $z_2 c_2 = z_o c_{oo}$. Естественно, что ионообменная сорбция катионов внедряющегося раствора снижает интенсивность их миграции по пласту: единый концентрационный фронт сорбируемого и десорбируемого катионов перемещается со скоростью, определяемой эффективной емкостью n_3 (6.1), где $\Delta q / \Delta c = q_{10} / c_{oo}$. Предельная величина этого соотношения, независимо от заряда вытесняющего катиона, составляет

$$\Delta n_{l \max} = Q_v / z_o c_{oo}. \quad (6.16)$$

Отсюда следует, что даже для пород, обладающих низким обменным потенциалом ($Q_v = 10-20$ мг-экв/дм³), через которые фильтруются маломинерализованные растворы ($c_{oo} < 2-5$ мг-экв/л),

параметр $\Delta n_{1\max}$ может достигать значений, заметно превышающих величины активной пористости (n).

Весьма интересной иллюстрацией роли катионного обмена может служить длительный (2,5 года) полевой эксперимент (на площади примерно 100х20 м) по закачке в песчаный водоносный горизонт раствора KCl. При этом ионы K^+ , замещающие на минеральном скелете ионы Mg^{2+} и Ca^{2+} , мигрировали примерно в 10 раз медленнее ионов Cl^- , в то время как вытесненные катионы перемещались, практически не отставая от последних [18].

При *вогнутой изотерме* обмена и прежних исходных предположках система уравнений (6.15) преобразуется к виду

$$\begin{cases} (n + b_1) \partial c_1 / \partial t + v \partial c_1 / \partial x = 0 \\ Z_2 c_2 = Z_o c_o - Z_1 c_1 \end{cases}, \quad (6.17)$$

где $b_1 = \frac{dq_1}{dc_1} - \frac{Z_1}{Z_2} \frac{dq_1}{dc_1}$, $q_1 = q_1(c_1, c_2)$; используя аналитические выражения для изотерм обмена (5.23) — (5.24) [4], легко находим зависимости для функции b_1 .

Далее методом характеристик [3] ищется распределение концентраций в пределах переходной зоны, содержащей катионы как поглощенного комплекса, так и внедряющегося в пласт раствора.

На первый взгляд, изотермическое представление реакций ионного обмена позволяет учитывать их в моделях миграции аналогично сорбционным процессам. Вместе с тем, присутствие в поглощенном комплексе и в пластовой воде катионов и анионов, преобладающих в составе вытесняющих растворов («ненулевые» начальные условия), может привести к коренным изменениям в характере задаваемых концентрационных функций. Поэтому, в дополнение к традиционному анализу, нами в работе [4] рассмотрены основные закономерности формирования концентрационных фронтов вытесняющего катиона при начальных условиях ($t = 0, x > 0$), отличающихся от нулевых:

$$c_o = c_o^o, c_1 = c_1^o, c_2 = c_2^o, q_1 = q_1^o, q_2 = q_2^o.$$

Различие в значениях концентраций анионов вытесняющего раствора и раствора в пласте ($c_{oo} = c_o^o$) приводит к нарушению физико-химического равновесия (имевшего место до внедрения раствора в пласт) в пределах переходной зоны. Тогда часть катионов c_1 либо сорбируется, либо десорбируется до восстановления нового равновесия, контролируемого величиной c_{oo} . При этом новое равновесное значение c_1^p может быть определено из условия:

$$q_1(c_1^p, c_{oo}) = q_1(c_1^o, c_o^o). \quad (6.18)$$

Основываясь на соотношении (6.18), легко показать, что концентрация катионов c_1^p в пределах переходной зоны может колебаться в широком диапазоне значений — в зависимости от соотношения содержаний ионов в интрузивном и пластовом растворах, причем c_1^p может даже превышать значение входной концентрации c_{10} : последнее свидетельствует о том, что десорбция катиона может происходить и в том случае, когда его концентрация в вытесняющем растворе превышает фоновые значения. Например, равновесная концентрация при гетеровалентном обмене находится по формуле:

$$\frac{c_1^p}{c_{oo}} = \delta(Z) + \frac{Z}{2\alpha} [1 - \sqrt{1 + 4\alpha}] , \quad (6.19)$$

где

$$\alpha = c_{oo} \left[\frac{(c_1^o)^{Z_2}}{(c_2^o)^{Z_1}} \right]^Z, \quad Z = Z_1 - Z_2$$

$c_2^o = (Z_o c_o^o - Z_1 c_1^o) / Z_2$; единичная функция $\delta(Z)$ определяется так же, как и в формуле (5.24). Соответствующим образом

преобразуются и выражения для определения характеристик переходной зоны.

Как видно из полученных соотношений, ионообменные реакции, затрагивающие макрокомпонентный состав подземных вод, формируют подвижную гидрохимическую зональность, которая может контролировать закономерности перемещения в пласте токсичных микрокомпонентов [4,7].

Например, при вторжении соленых вод происходят изменения pH системы, и одно только это может вызвать мобилизацию (или, наоборот, осаждение) отдельных компонентов; в частности, перенос тяжелых металлов может полностью определяться значением pH , и тогда положение фронта их переноса будет зависеть от перемещения границы изменения pH -фронта вторгающихся соленых вод [52].

Использование численных методов позволяет заметно расширить класс рассматриваемых ионообменных задач — разд. 8.2.1.

6.1.2. Закономерности миграции компонентов, участвующих в процессах растворения-осаждения

Рассмотрение миграционных процессов целесообразно начать с упрощенных расчетных ситуаций в условиях растворения или кристаллизации солей (минералов), исключающих возможность их повторного переосаждения. Как правило, эти условия выполняются для растворов простого состава, содержащих ограниченное количество активных компонентов. Для многокомпонентных систем достаточно характерным является зональное концентрирование компонентов, обусловленное процессами переосаждения в фильтрационном потоке образованных ими солей.

6.1.2.1. Простейшие расчетные схемы

1°. Особенности равновесного растворения

Пусть в минеральном комплексе породы содержится в ограниченном количестве $\langle q_1 \rangle$ соль $\overline{M_1 A_2}$, растворяющаяся по схеме (5.28) при поступлении в пласт вод, недонасыщенных компонентами M_1 и A_2 (их входные концентрации $c_1^{(0)}$ и $c_2^{(0)}$ по отношению к этой соли. С термодинамических позиций это значит, что в рассматриваемой системе выполняется соотношение

$$[c_1^{(0)}]^{\nu_1} [c_2^{(0)}]^{\nu_2} < [c_1^{(1)}]^{\nu_1} [c_2^{(1)}]^{\nu_2} = K_{12}^{np}, \quad (6.20)$$

где $c_1^{(1)}$ и $c_2^{(1)}$ — начальные концентрации компонентов, равновесные $\overline{M_1 A_2}$; K_{12}^{np} — концентрационная константа равновесия, связанная с произведением растворимости PP_{12} соотношением $K_{12}^{np} = PP_{12}/(\gamma_1)^{\nu_1} (\gamma_2)^{\nu_2}$ (γ_1 и γ_2 — коэффициенты активности). Здесь и далее в обозначении $c_i^{(k)}$ нижний индекс отвечает номеру компонента, а верхний — номеру характерной зоны, где этот компонент концентрируется — см. график характеристик на рис. 6.1. Преположим также, что ионы M_1 и A_2 доминируют в составе граничного раствора, т.е. $c_1^{(0)} = c_2^{(0)}$.

В данных условиях миграционный процесс формирует зону $x < u_2 t$ полного растворения соли ($q_1 = 0$, $c_1 = c_1^{(0)}$, $c_2 = c_2^{(0)}$), граница — «фронт» растворения — которой, по мере поступления раствора в пласт, смещается по потоку со скоростью $u_2 < u_1$ (u_1 — действительная скорость переноса частиц воды). Образующиеся при этом компоненты идут на насыщение раствора в пределах второй концентрационной зоны $u_2 t < x < u_1 t$ (рис. 6.1), где $c_1 = c_1^{(2)}$, $c_2 = c_2^{(2)}$, $q = q_1$. Так как в составе входного раствора отсутст-

вуют ионы, которые могли бы повлиять на растворимость соли $M_1 A_2$, то по содержанию компонентов c_1 и c_2 эта волна не отличима от передовой волны вытесняемого раствора ($c_1^{(2)} = c_1^{(1)}$ и $c_2^{(2)} = c_2^{(1)}$).

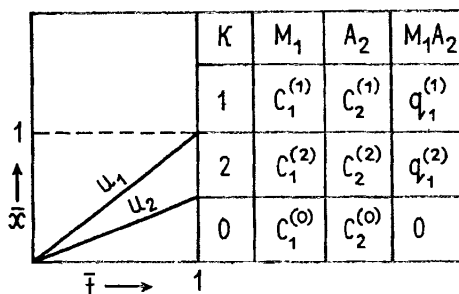


Рис. 6.1. Концентрационные характеристики зон растворения при внедрении в пласт недонасыщенного раствора

Для того, чтобы определить скорость u_2 , составим элементарное балансовое соотношение

$$q_1 u_2 t = n(c_1^{(2)} - c_1^{(0)}) (u_1 - u_2) t = n(c_2^{(2)} - c_2^{(0)}) (u_1 - u_2) t, \quad (6.21)$$

откуда легко показать, что скорость движения фронта волны растворения может быть рассчитана по значению эффективной емкости пород (6.2) при

$$\Delta n = \Delta q_1 / \Delta c_1 = \Delta q_1 / \Delta c_2 \quad (6.22)$$

$$(\Delta q = \Delta q_1, \Delta c_1 = c_1^{(2)} - c_1^{(0)}, \Delta c_2 = c_2^{(2)} - c_2^{(0)}).$$

Более общим является случай поступления в пласт растворов, существенно отличающихся своим гидрогеохимическим обликом от пластовых вод.

Например, присутствие в этих растворах нового аниона A_3 , который свободно (вследствие своей инертности) проникает в область второй концентрационной волны, изменяя в ее пределах соотношение концентраций $c_1^{(2)}$ и $c_2^{(2)}$. Тем самым меняется интенсивность растворения соли $\overline{M_1 A_2}$, контролирующая скорость движения u_2 .

Для расчета концентраций $c_1^{(2)}$ и $c_2^{(3)}$, которые обычно отличаются как от фоновых, так и от граничных содержаний компонентов M_1 и A_2 , используется система уравнений:

$$\begin{cases} [c_1^{(2)}]^{v_1} [c_2^{(2)}]^{v_2} = K_{12}^{np}, \\ Z_1 c_1^{(2)} = Z_2 c_2^{(2)} + Z_3 c_3^{(2)}. \end{cases} \quad (6.23)$$

Первое из них характеризует равновесную реакцию растворения, второе — условие электронейтральности раствора (Z_i — заряды ионов); очевидно, что $c_3^{(2)} = c_3^{(0)}$.

В качестве примера рассмотрим особенности миграции слабоминерализованного ($M \approx 30$ мг/л) хлоридного раствора, вытесняющего природные воды сульфатного состава, которые находятся в равновесии с сульфатом стронция ($SrSO_4$). Исходные данные для этого примера, характеризующие начальные и граничные условия задачи, приведены в табл. 6.1 (первая и последняя строки); примем также $PR_{12} = 10^{-6,5}$, $\gamma_1 \cdot \gamma_2 = 0,817$ (расчет согласно Дебаю-Гюккелю), скорость фильтрации $V = 1,8 \cdot 10^{-2}$ см/мин, пористость пород $n = 0,32$. Приведенные значения заимствованы из работы [53], где массоперенос, осложненный дисперсией солей ($\delta_L = 2/3$ см), исследовался на численной модели.

* Пока здесь считается, что он не может образовывать труднорастворимую соль $M_1 A_3$ — см. далее.

Решение системы (6.23) при $Z_1 = Z_2 = 2$, $Z_3 = 1$, $\nu_1 = \nu_2 = 1$ позволяет рассчитать концентрации ионов Sr^{2+} и SO_4^{2-} в пределах второй концентрационной волны (табл. 6.1). Подставляя их значения в формулу (6.22), находим $\Delta\eta = 0,166 \approx 0,17$. Графически решение задачи (в координатах c_1+x) для трех моментов времени представлено на рис. 6.2. На этот же график нанесены результаты численного моделирования. Как видно, гидродисперсия, несколько «размазывая» концентрационные фронты, одновременно сглаживает экстремумы функции c_1 , которые примерно на 15 % превышают фоновое значение $c_1^{(1)}$.

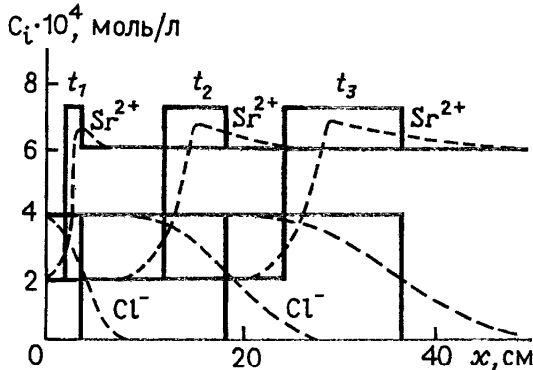
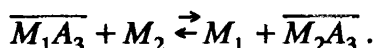


Рис. 6.2. Результаты расчета концентрационных волн Sr^{2+} и Cl^- при растворении $SrSO_4$ в процессе фильтрации $Sr-Cl$ раствора; сплошные и пунктирные линии отвечают оценкам по схеме поршневого вытеснения и микродисперсии ($t_1=62$ мин., $t_2=333$ мин., $t_3=667$ мин.)

Таблица 6.1

k	C ^(k) , моль/л			q ₁ , моль/л (SiSO ₄)
	i			
	1 (Sr ²⁺)	2 (SO ₄ ²⁻)	3 (Cl ⁻)	
1	6,22 · 10 ⁻⁴	6,22 · 10 ⁻⁴	0	8,82 · 10 ⁻⁵
2	7,3 · 10 ⁻⁴	5,3 · 10 ⁻⁴	4 · 10 ⁻⁴	8,82 · 10 ⁻⁵
3	2,0 · 10 ⁻⁴	0	4 · 10 ⁻⁴	0

В близкой постановке могут рассматриваться реакции метасоматического характера, протекающие путем химического замещения исходного минерала $\overline{M_1A_3}$ новым кристаллическим веществом $\overline{M_2A_3}$:



Соотношение между равновесными концентрациями насыщения $c_1^H = c_1^{(2)}$ и $c_2^H = c_2^{(2)}$ определяется тождеством:

$$\frac{c_1^H}{c_2^H} = K_{12}^M = \frac{K_{13}^{np}}{K_{23}^{np}}.$$

Развитие метасоматического процесса приводит к формированию трех зон: 1) $0 \leq x \leq u_2 t$ — зона полного замещения минерала $\overline{M_1A_3}$, где концентрации $c_2 = c_2^{(0)}$, $c_1 = 0$; 2) $u_2 t \leq x \leq u_1 t$ — зона равновесного раствора $c_1 = c_1^H$, $c_2 = c_2^H$; 3) зона пластовых вод $c_1 = c_1^{(1)}$, $c_2 = c_2^{(1)}$. Во всех зонах $q = q_1$.

Для описания процесса В.С. Голубев предлагает следующую систему уравнений баланса вещества в пределах выделяемых зон [5]:

$$\begin{cases} c_2^{(0)} v t = (n c_2^{(0)} + q_1) u_2 t + n c_2^H (u_1 - u_2) t, \\ u_2 q_1 t = n c_1^H (u_1 - u_2) t \end{cases}. \quad (6.24)$$

Ее решение дает:

$$u_2 = \frac{v}{n + (1 + 1/K_{12}^M) q_1 / c_2^{(0)}} = \frac{v}{n + \Delta n}, \quad (6.25)$$

$$\text{где } \Delta n = \frac{(1 + K_{12}^M) q_1}{K_{12}^M c_2^{(0)}}. \quad (6.25, a)$$

Если $K_{12}^M \gg 1$, то процесс мало чем отличается от простого растворения, закономерности которого были рассмотрены выше.

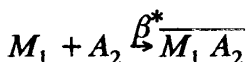
2°. Описание кинетики процессов растворения-осаждения

Подобие разнонаправленных процессов растворения и осаждения, протекающих по простейшей кинетической схеме (5.30), позволяет использовать для описания отдельных их стадий формально эквивалентные зависимости.

Так, первая (по Н.Н.Веригину) стадия процессов растворения



или осаждения



характеризуется экспоненциальным изменением концентрационных функций:

$$c_i = c_i^H - (c_i^H - c_{i0}) \exp \left(-\frac{\beta^* x}{v} \right), \quad x < u_1 t, \quad (6.26)$$

где $c_i^H = c_i^{(2)}$ — предельная концентрация насыщения раствора i -м компонентом, рассчитываемая термодинамическими методами (в простейшем случае — по данным о растворимости соли S_{12}); $c_{i0} = c_i^{(0)}$ — граничная концентрация; при $c_{i0} < c_i^H$ происходит растворение, при $c_{i0} > c_i^H$ — осаждение соли; β^* — кинетический коэффициент.

Для процессов осаждения, если они не приводят к существенным изменениям проницаемости пород, данная стадия протекает неограниченно долгое время и имеет, как следует из (6.26), стационарную (при $t > t_a = (3+4)n/\beta^*$) асимптотику. То же самое можно сказать и о процессах растворения пород, содержащих растворяющиеся соединения (такие, например, породообразующие минералы, как кальцит, гипс и т.п.) в весьма высоких концентрациях.

При ограниченном насыщении ($q_1 = q^H$) твердой фазы солями, через определенное время $t_1 = q^H / (c_i^H - c_{i0})\beta^*$ вблизи входной границы пласта ($X = 0$) начинает формироваться зона полного выщелачивания, где $c_1 = c_{i0}$, $q = 0$ (вторая стадия процесса). Очевидно, что скорость смещения фронта этой зоны u_2 контролируется дополнительной емкостью породы Δn (6.2). При этом в пределах крайних границ передовой зоны $(t - t_2)u_2 < x < (t - t_1)u_1$, концентрации компонентов растут по потоку, подчиняясь закону:

$$c_i = c_i^H - (c_i^H - c_{i0}) \exp \left[-\frac{x - u_2(t - t_1)}{u_2 t_1} \right]. \quad (6.27)$$

Отсюда можно показать, что рассмотрение кинетики процессов растворения в пределах зоны смешения имеет смысл только в период $t < (20+30)t_1$. По прошествии этого периода достаточной характеристикой процесса является положение фронта полного выщелачивания $x^0 = u_2 t$.

6.1.2.2. Процессы равновесного растворения-осаждения вещества применительно к растворам сложного состава на подвижных гидрогеохимических барьерах

1°. Общее уравнение массового баланса

Миграция раствора, в котором каждый из i -х химических элементов существует в нескольких связанных формах (в жидкой или твердой фазах), описывается (при $D_i = 0$) системой дифференциальных уравнений [25,31,32,54]:

$$n \frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial q_i}{\partial t} + v \frac{\partial c_i}{\partial x} = 0, \quad i = 1, \dots, I, \quad (6.28)$$

где

$$c_i = \sum_{j=1}^J h_{ij} c_j, \quad i = 1, \dots, I \quad (6.28, a)$$

— суммарная концентрация i -го элемента, образующего J видов растворенных соединений (компонентов) в концентрациях c_j ; h_{ij} — стехиометрический коэффициент для i -го элемента в j -ом соединении:

$$q_i = \sum_{s=1}^S g_{is} q_s, \quad i = 1, \dots, I \quad (6.29)$$

— суммарная концентрация i -го элемента, образующего S видов солей (осадков, минералов) с текущими концентрациями q_k ; g_{ik} — стехиометрический коэффициент для i -го элемента в k -ой соли.

Система (6.28) дополняется условием минерального равновесия,

$$\prod_{i=1}^I c_i^{v_i} = \Pi P, \quad (6.30)$$

рассматриваемым совместно с условием электронейтральности раствора.

Накопление элемента в жидкой фазе при растворении осадка (или, наоборот, концентрирование его в твердой фазе) контролирует скорость миграции вещества в фильтрационном потоке:

$$u_i = \frac{v}{n + \left(\partial \sum_{s=1}^S g_{is} q_s / \partial c_i \right)}. \quad (6.31)$$

Последнее выражение является характеристической формой представления исходной системы дифференциальных уравнений (6.28). Отталкиваясь от него, можно получить конечные соотношения, описывающие

распространения волн (зон) растворения-осаждения вещества в пористых средах.

2°. Описание волнового режима переноса компонентов, участвующих в реакциях растворения-осаждения

Начнем с рассмотрения наиболее простого случая, отвечающего закономерностям массопереноса при внедрении в пласт раствора, недонасыщенного в исходном состоянии ионами M_1 , M_2 и A_3 по отношению к одной из минеральных составляющих породы $\overline{M_1A_3} (c_1^{(0)} \cdot c_3^{(0)} = K_{13}^{np})$, где $c_1^{(0)}$ и $c_3^{(0)}$ — концентрации компонентов M_1 и A_3 на границе) — см. рис. 6.3,а и рис. 6.4. Это создает предпосылки для растворения соединения $\overline{M_1A_3}$ (его начальное содержание в породе $q_1^{(1)}$). Поэтому вслед за передовой («солевой») волной, отвечающей концентрационным распределениям $c_1^{(1)}$, $c_2^{(1)}$, $c_3^{(1)}$ в зоне вытесненного раствора — с одной стороны, и в зоне насыщения вытесняющего раствора продуктами растворения (здесь $c_1^{(2)}$, $c_2^{(2)}$ и $c_3^{(2)}$, причем $c_1^{(2)} c_3^{(2)} = K_{13}^{np}$) — с другой, формируется вторая волна. Поскольку раствор во второй зоне — насыщенный, концентрация минерала $\overline{M_1A_3}$ в ней остается неизменной $q_1^{(2)} = q_1^{(1)}$, т.е. отвечает исходному содержанию.

Скорость распространения второй волны $u_2 < u_1$, что обусловлено насыщением раствора компонентами при растворении соединения $\overline{M_1A_3}$.

Концентрирование раствора в области $u_2 t < x < u_1 t$ до значений $c_3^{(2)} > c_3^{(0)}$ препятствует свободному переходу через границу катиона M_2 , имеющего при содержаниях $c_2 = c_2^{(0)}$ потенциально более высокую (по сравнению с u_2)

скорость переноса. Поэтому часть вещества при переходе через вторую концентрационную волну, выполняющую роль подвижного гидрогеохимического барьера, выпадает в осадок в виде соли $\overline{M_2A_3}$ (замещающей соединения $\overline{M_1A_3}$): формируется новая — третья — концентрационная зона, характеризующаяся распределением концентраций $c_1^{(3)}$, $c_2^{(3)}$ и $c_3^{(3)}$ (причем $c_2^{(3)} c_3^{(3)} = K_{23}^{np}$) — в растворе и $q_2^{(3)}$ — на породе.

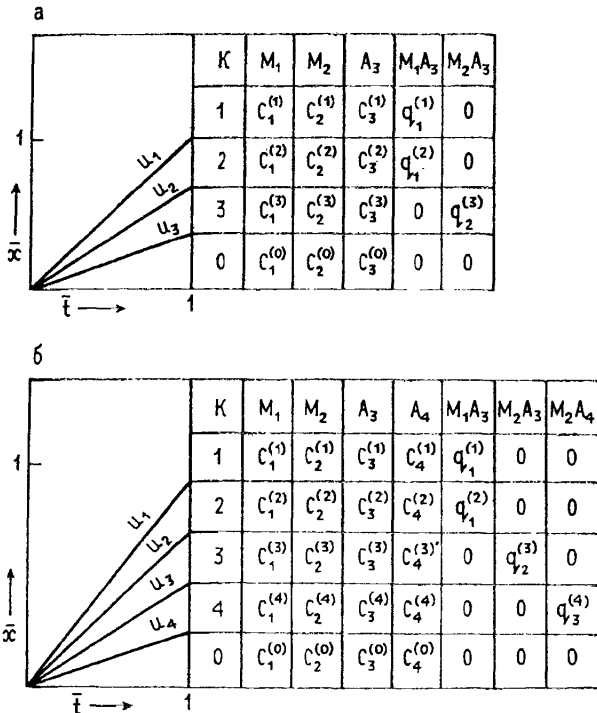


Рис. 6.3. Закономерности формирования концентрационных волн растворения-осаждения при миграции трех-(а) и четырех-(б)-компонентных растворов

Если же вещество $\overline{M_2A_3}$ и граничный раствор равновесны ($c_2^{(0)} \cdot c_3^{(0)} = K_{23}^{np}$), то процесс в целом приобретает метасоматический характер: происходит замещение минерала $\overline{M_1A_3}$ на минерал $\overline{M_2A_3}$, причем в этом случае из выражения (6.21), справедливого при $c_1^{(0)} = 0 = 0$, легко установить скорость u_2 .

Очевидно, что в более общем случае недонасыщенного раствора ($c_2^{(0)} \cdot c_3^{(0)} < K_{23}^{np}$) вблизи входной границы постепенно образуется зона полного выщелачивания солей катионов M_1 и M_2 , где $c_1 = c_1^{(0)}$, $c_2 = c_2^{(0)}$ и $c_3 = c_3^{(0)}$. Скорость смещения соответствующей концентрационной волны будет $u_3 < u_2$ (рис. 6.3, а).

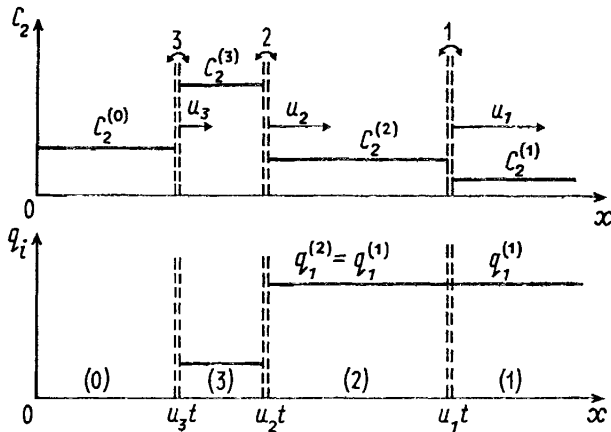


Рис. 6.4. Закономерности концентрирования одного из растворенных компонентов в пределах подвижных гидрогеохимических зон (а) и накопления твердых солей ($S=1,2$) на породе в этих зонах (б)

Рассуждая подобным образом, можно определить последовательность осаждения солей при наличии в растворе других активных компонентов.

Пусть, например, в составе раствора присутствует анион A_4 , дающий с катионом M_2 труднорастворимое соединение M_2A_4 . Тогда, как видно из характеристического графика на рис. 6.3,б, перед зоной полного выщелачивания (скорость распространения ее фронта $u_4 < u_3$) формируется еще одна концентрационная волна растворения-осаждения (выше по потоку от которой $c_2^{(4)} \cdot c_4^{(4)} = K_{24}^{np}$ — гидрохимический барьер для компонента A_4 (при $c_2^{(3)} \cdot c_4^{(4)} = K_{24}^{np}$). Здесь, на этом барьере, происходит растворение минерала M_2A_3 и его замещение минералом M_2A_4 (содержание его в породе $q_3^{(4)}$).

Итак, в фильтрационном потоке формируется волновой (зональный) режим переноса компонентов, концентрация которых как в растворе, так и на породе сложным образом перераспределяется между отдельными зонами, способствуя разубоживанию или концентрированию в них веществ. Последовательно сменяющие друг друга волны осаждения-растворения (например, тяжелых металлов) резко замедляют перенос, но могут приводить к образованию новых токсичных соединений, даже если исходный раствор был нетоксичным [52]. Поэтому, наряду с качественным описанием рассмотренного процесса, особую значимость приобретают количественные оценки, которые могут быть получены, если придерживаться правил, сформулированных в работе [25]:

1) равновесные концентрации компонентов в жидкой фазе какой-либо из фиксированных зон контролируются как величиной растворимости (произведением растворимости — K_{ij}^{np}) соли, осаждающейся из раствора в пределах данной зоны, так и значением аналогичного параметра для соли, осажденной в пределах концентрационной зоны выше по потоку;

2) состав ионов в зоне, расположенной ниже по потоку, определяется осажденными в ее пределах солями, а

также компонентами (в жидкой и твердой фазах) предшествующей, расположенной выше по потоку, зоны;

3) концентрация соли в твердой фазе зоны, расположенной выше по потоку, контролируется содержанием твердых солей в пределах ниже расположенной зоны и концентрацией компонентов в жидкой фазе обеих зон;

4) волновые скорости миграции на границе двух смежных зон всех i -ых компонентов равны.

Последнее правило, выражающее так называемый принцип «когерентности», имеет следующее математическое представление:

$$u_k = \frac{v}{n + \Delta n_1^{(k)}} = \frac{v}{n + \Delta n_2^{(k)}} = \dots = \frac{v}{n + \Delta n_i^{(k)}}, \quad (6.32)$$

где $\Delta n_i^{(k)}$ — дополнительная емкость пород, контролирующая скорость движения всех i -ых компонентов k -ой волны:

$$\Delta n_i^{(k)} = \frac{(g_{is} q_s)^k - (g_{is} q_s)^{k+1}}{c_i^k - c_i^{k+1}}, \quad (6.33)$$

g_{is} — стехиометрический коэффициент; при $k = 1$ $q_s^{(1)} = q_s^{(2)}$, и тогда $n_i^{(1)} = 0$, а $u_1 = v/n$.

Соотношение (6.33) остается справедливым и при осаждении в пределах любой концентрационной волны нескольких ($s = 1, \dots, s$) солей i -го элемента, причем в этом варианте:

$$\Delta n_i^{(k)} = \frac{\left(\sum_{s=1}^s g_{is} q_s\right)^k - \left(\sum_{s=1}^s g_{is} q_s\right)^{k+1}}{c_i^k - c_i^{k+1}}. \quad (6.33, a)$$

Из условия когерентности (6.32) следуют балансовые соотношения

$$\Delta n_1^{(k)} = \Delta n_2^{(k)} = \dots = \Delta n_i^{(k)} = \Delta n^{(k)}, \quad (6.34)$$

позволяющие рассчитывать концентрации солей q_s в каждой $(k+1)$ -й зоне при известных значениях $q_s^{(k)}$ и $c_i^{(k)}$, $c_i^{(k+1)}$.

Рассмотрим последовательность расчетов для гидрогеохимической системы, представленной на рис. 6.3, а. Так как здесь во второй зоне происходит осаждение соли M_1A_3 , то следует записать:

$$\begin{cases} [c_2^{(3)}]^{\nu_2} [c_3^{(3)}]^{\nu_3} = K_{23}^{np}, \\ Z_1 c_1^{(3)} + Z_2 c_2^{(3)} = Z_{\Sigma} c_{\Sigma} + Z_3 c_3^{(3)}, \\ c_1^{(3)} = c_1^{(0)}, \end{cases} \quad (6.35)$$

где $Z_{\Sigma} c_{\Sigma} = Z_1 c_1^{(0)} + Z_2 c_2^{(0)} + Z_3 c_3^{(0)}$ — эквивалентная концентрация избыточного иона. Отсюда находим значения $c_2^{(3)}$ и $c_3^{(3)}$. Другая система уравнений, описывающих равновесие в первой зоне, имеет вид:

$$\begin{cases} [c_1^{(2)}]^{\nu_1} [c_2^{(2)}]^{\nu_2} = K_{12}^{np}, \\ [c_2^{(2)}]^{\nu_2} [c_3^{(2)}]^{\nu_3} = K_{23}^{np}, \\ Z_1 c_1^{(2)} + Z_2 c_2^{(2)} = Z_{\Sigma} c_{\Sigma} + Z_3 c_3^{(2)}. \end{cases} \quad (6.36)$$

Ее решение дает еще три неизвестных величины $c_1^{(2)}$, $c_2^{(2)}$ и $c_3^{(2)}$. Таким образом, концентрационное поле по жидкой фазе определено. Теперь, воспользовавшись соотношениями (6.33а) и (6.34) при $g_{is} = 1$, получаем:

$$\frac{q_1^{(2)}}{c_1^{(2)} - c_2^{(3)}} = - \frac{q_2^{(3)}}{c_2^{(2)} - c_2^{(3)}} = \frac{q_1^{(2)} - q_2^{(3)}}{c_3^{(2)} - c_3^{(3)}}. \quad (6.37)$$

Отсюда легко находится $q_2^{(3)}$ при заданном содержании $q_1^{(2)} = q_1^{(1)}$. Окончательное решение миграционной задачи определяют эффективные параметры:

$$\Delta n^{(2)} = \frac{q_1^{(1)}}{c_1^{(2)} - c_1^{(3)}}, \quad \Delta n^{(3)} = \frac{(c_2^{(2)} - c_2^{(3)}) q_1^{(1)}}{(c_2^{(3)} - c_2^{(0)}) (c_1^{(2)} - c_1^{(3)})}. \quad (6.38)$$

3°. Примеры миграционных расчетов

Достаточно характерными минералами, находящимися в водоносных породах в рассеянном состоянии, являются гипс $Ca(SO_4) \cdot 2H_2O$ и кальцит ($CaCO_3$). Внедрение техногенных растворов нередко приводит к растворению и пересотложению этих минералов, которые замещаются слаборастворимыми солями компонентов-загрязнителей.

Таблица 6.2

k	$M_1(Ca^{2+})$	$M_2(Pb^{2+})$	$A_3(SO_4^{2-})$	$\frac{M_1 A_3}{(CaSO_4)}$	$\frac{M_2 A_3}{(PbSO_4)}$
	$c_1^{(k)}$	$c_2^{(k)}$	$c_3^{(k)}$	$q_1^{(k)}$	$q_2^{(k)}$
2	$10,9 \cdot 10^{-3}$	$0,56 \cdot 10^{-5}$	$2,24 \cdot 10^{-3}$		0
3	$9,0 \cdot 10^{-3}$	$3,99 \cdot 10^{-3}$	$0,316 \cdot 10^{-3}$	0	$1,76 \cdot 10^{-2} \cdot q_1^{(1)}$
0	$9,0 \cdot 10^{-3}$	$2,41 \cdot 10^{-3}$	$0,30 \cdot 10^{-3}$	0	0

$$K_{13}^{np} = 2,45 \cdot 10^{-5}; \quad K_{23}^{np} = 1,26 \cdot 10^{-8}.$$

Так, в качестве примера, в табл. 6.2 приведены результаты расчетов загрязнения водоносного пласта ионами свинца Pb^{2+} (M_2), выпадающими в осадок на подвижном гидрогеохимическом барьере между водами SO_4^{2-} (A_3) — Ca^{2+} (M_1) состава в виде минерала англизита $PbSO_4$ ($M_2 A_3$) $n^{(2)} = 0,52 \cdot 10^3 \cdot q_1^{(1)}$ и $\Delta n^{(3)} = 1,1 \cdot 10^3 \cdot q_1^{(1)}$ (c_i, q_i — в моль/л). Обратим внимание на накопление свинца в третьей зоне

до концентрации $c_2^{(3)} = 3,99 \cdot 10^{-5}$ моль/л (8,3 мг/л) — при концентрациях его в граничном растворе $c_2^{(0)} = 2,41 \cdot 10^{-5}$ моль/л (5 мг/л).

Другой пример касается анализа процесса вытеснения $Ca(M_1) - SO_4(A_2)$ - раствора, находящегося в равновесии с гипсом $(CaSO_4) 2H_2O (M_1A_3)$, содовыми водами, содержащими в повышенных концентрациях ионы $CO_3^{2-} (A_2)$. В этом случае исходный минерал на отрезке $u_2 t < x < u_3 t$ замещается кальцитом $CaCO_3 (M_1A_3)$. Закономерности процесса характеризуются расчетными величинами, приведенными в табл. 6.3.

Таблица 6.3

k	$M_1(Ca^{2+})$	$A_2(SO_4^{2-})$	$A_3(CO_3^{2-})$	$M_1A_2(CaSO_4)$	$M_1A_3(CaCO_3)$
	$c_1^{(k)}$	$c_2^{(k)}$	$c_3^{(k)}$	$q_1^{(k)}$	$q_2^{(k)}$
2	$4,475 \cdot 10^{-3}$	$5,474 \cdot 10^{-3}$	$7,39 \cdot 10^{-3}$		0
3	$2,299 \cdot 10^{-6}$	0	$1,0033 \cdot 10^{-3}$	0	$0,183 q_1^{(1)}$
0	0	0	10^{-3}	0	0

$$K_{12} = 2,45 \cdot 10^{-5}; K_{13} = 3,31 \cdot 10^{-9}.$$

Для определения скоростей движения гидрогеохимических границ u_2 и u_3 в соответствии с зависимостями (6.38), получены значения эффективных параметров $\Delta n^{(2)} = 1,83 \cdot 10^2 q_1^{(1)}$ и $\Delta n^{(3)} = 5,55 \cdot 10^4 q_1^{(1)}$.

Наконец, сошлемся на пример численного моделирования более сложного кинетического процесса растворения известняков в зоне внедрения морских вод на побережье [41]. Показано, что даже когда пресные и соленые воды в каждой зоне находятся в равновесии с кальцитом, раствор в зоне смешения может быть недонасыщенным или перенасыщенным. Растворение пропорционально скорости фильтрации (удельному расходу) и идет поэтому наиболее интенсивно в верхней части переходной зоны, где имеют место максимальные скорости возвратного движения воды к морю. Кинетика растворения

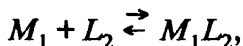
существенно проявляется в течение суток — десятков суток. При этом в трещиноватых породах скорость растворения намного меньше, чем гранулярных. Сопутствующие изменения проницаемости идут гораздо медленнее, чем наступает химическое и гидродинамическое равновесие; изменения пористости (от 0,3 до 0,35 — за 10 тыс лет) максимальны в зонах смешения, содержащих более пресную воду, и они здесь существенно сильнее выражены, чем это следует из модели простого смешения.

6.1.3. Влияние внутрифазовых реакций на интенсивность массопереноса и характер концентрационных фронтов

6.1.3.1. Расчетные схемы, учитывающие роль комплексобразования в сорбционных и ионообменных процессах

Основные закономерности переноса сорбирующегося компонента (иона), участвующего в образовании растворенных комплексных соединений, вытекают из анализа следующих модельных ситуаций.

Пусть ион металла M_1 (его суммарная концентрация c_1^T) мигрирует в составе раствора, содержащего лиганд L_2 (суммарная концентрация c_2^T). Геохимически значимой является комплексная форма M_1L_2 , образующаяся в результате реакции (5.31):



причем L_2 и M_1L_2 — инертные ионы.

Очевидно, что сорбционное удаление из раствора иона M_1 приводит к нарушению химического равновесия на фронте поршневого вытеснения. Происходящее при этом разрушение комплекса M_1L_2 способствует восполнению запасов ионов M_1 в растворе, что предопределяет ускорение фронтального их перемещения (по сравнению

с соответствующей величиной, определяемой для ионов M_1 в отсутствии комплексообразователя). Поскольку распад комплексов дает дополнительное количество лигандов L_2 (переносимых со скоростью движения частиц воды), то их концентрация за зоной осаждения ионов M_1 возрастает — см. рис. 6.5.

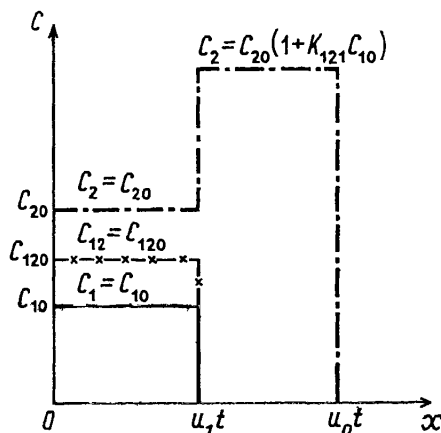


Рис. 6.5. График распределения $c(x)$ концентраций ионов металла c_1 , лиганда c_2 и лигандного комплекса c_{12} (c_{10} , c_{20} и c_{120} — граничные концентрации)

Для определения скорости продвижения границы зоны исходного раствора составим уравнение баланса массы компонента M_1 :

$$v \Delta c_1^T dt = (n \Delta c_1^T + \Delta q_1) dl. \quad (6.39)$$

Отсюда находим $u_1 = dl/dt = v/n_{s1}$; $n_{s1} = n + \Delta q_1/\Delta c_1^T$.

Считая, что начальные содержания компонента в растворе и на породе незначительны ($\Delta n_1 =$

$\Delta q_1 / \Delta c_1^T = q_1 / c_1^T$, для линейной изотермы Генри (5.4) получаем:

$$\Delta n_1 = K_{r1} \Delta \bar{n}_1, \Delta \bar{n}_1 = \frac{c_1}{c_1^T} = \frac{1}{1 + K_{121} c_2} (K_{r1} = K_{d1} \rho), \quad (6.40)$$

где K_{121} — константа устойчивости комплекса $M_1 L_2$ (см. разд. 5.3.1).

К сходному выражению приходим при участии в комплексообразовании нескольких лигандных комплексов $M_1 (L_j)_k$ (см. 5.31 при $j = 2; k = 1, \dots, k_1$):

$$\Delta \bar{n}_1 = \frac{1}{1 + \sum_j \sum_k K_{1jk} c_j^k}. \quad (6.41)$$

Аналогично находим уменьшение дополнительной емкости пород по отношению к компонентам, сорбирующимся по нелинейной изотерме Лэнгмюра (5.6):

$$\Delta n_1 = \frac{K_1 Q_v}{1 + \Delta \bar{n}_1 K_1 c_1^T} \Delta \bar{n}_1. \quad (6.42)$$

Представленные зависимости дают качественное объяснение имеющему место расхождению в расчетных значениях констант распределения K_d , определяемых в идеализированных (лабораторных) и полевых условиях. Так, в работе [21] отмечается более чем 200-кратное уменьшение величины K_d , найденной в полевых условиях для кадмия в органических комплексах — по сравнению со значением K_d для ионной формы этого металла (лабораторные определения).

Таким образом, задача о влиянии процессов комплексообразования на общий потенциал массопереноса сводится к нахождению величины $\Delta \bar{n}_1 (< 1)$, отвечающей степени закомплексованности элемента. Для этого, по-

существу, достаточными являются представления об исходном термодинамическом состоянии системы.

Последние экспериментальные исследования [13] свидетельствуют о вполне ощутимой сорбции положительно заряженных комплексных форм M_1L_2 и $M_1(OH)$, где M_1 — ион тяжелого двухвалентного металла. Запишем соответствующее балансовое уравнение в виде:

$$vc_1^T dt = (nc_1^T + q_1 + q_{12} + q_1^{OH}) dl \quad (6.43)$$

(нулевые начальные условия). Полагая далее, что изотермы сорбции всех частиц линейные —

$$q_1 = K_{Г1}c_1, q_{12} = K_{Г12}c_{12}, q^{OH} = K_{Г1}^{OH} c_1^{OH} \quad (K_{Гi} = K_{di}\rho),$$

приходим к выражению для дополнительной сорбционной емкости породы:

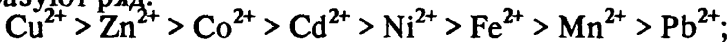
$$\Delta n_1 = \frac{K_{Г1} + K_{Г12} K_{121} c_2 + K_{Г1}^{OH} K_{Г1} a_{OH}}{1 + K_{121} c_2 + K_{Г1}^{OH} a_{OH}}. \quad (6.44)$$

Как видно, эффективный параметр Δn_1 в этом случае сложным образом связан с парциальными коэффициентами распределения ионов и зависит от термодинамических констант равновесия и pH раствора.

В табл. 6.4 приведены данные, заимствованные из работы [13], по сорбционным константам $K_{Г1}$, $K_{Г12}$ и $K_{Г1}^{OH}$ ($K_{Г} = K_d\rho$) некоторых тяжелых металлов для двух характерных литологических комплексов пород.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что:

1) интенсивность сорбции свободных катионов возрастает с ростом потенциала ионизации, так что они образуют ряд:



2) за некоторыми исключениями, комплексные формы сорбируются слабее, чем их катионные основания;

3) во всех вариантах наблюдается уменьшение констант сорбционного равновесия с ростом ионной силы растворов (минерализации подземных вод).

Таблица 6.4

Значения коэффициентов распределения ионов
тяжелых металлов ($K_{Г1}$), их хлоридных ($K_{Г12}$)
и гидроксильных ($K_{Г1}^{ОН}$) комплексов для супеси и песка
(статические эксперименты)

M_1	Ионная сила	Супесь мелкопесчаная			Песок		
		$K_{Г1}$	$K_{Г12}$	$K_{Г1}^{ОН}$	$K_{Г1}$	$K_{Г12}$	$K_{Г1}^{ОН}$
1	2	3	4	5	6	7	8
Pb^{2+}	0,01	453	-	3019	74	-	428
	0,25	287	-	-	38	-	-
	0,5	-	200	-	-	16	-
	1,0	141	-	-	20	-	-
	5,0	-	89	-	-	8	-
Cu^{2+}	0,01	1025	-	1640	294	-	246
	0,25	510	-	-	64	-	-
	0,5	-	22	-	-	4,5	-
	1,0	418	-	-	49	-	-
	5,0	-	18	-	-	3,4	-
Zn^{2+}	0,01	932	-	161	180	-	47
	0,25	456	-	-	81	-	-
	0,5	-	12	-	-	4,8	-
	1,0	308	-	-	31	-	-
	5,0	-	5	-	-	1,6	-
Ni^{2+}	0,01	705	-	546	125	-	79
	0,25	444	-	-	50	-	-
	0,5	-	34	-	-	6,3	-
	1,0	200	-	-	37	-	-
	5,0	-	24	-	-	2,5	-

Продолжение табл. 6.4

1	2	3	4	5	6	7	8
Mn^{2+}	0,01	525	-	209	63	-	60
	0,25	331	-	-	32	-	-
	0,5	-	15	-	-	4,2	-
	1,0	151	-	-	20	-	-
	5,0	-	11	-	-	2,5	-
Co^{2+}	0,01	832	-	159	126	-	53
	0,25	437	-	-	63	-	-
	0,5	-	-	-	-	-	-
	1,0	224	-	-	28	-	-
	5,0	-	-	-	-	-	-
Cd^{2+}	0,01	692	-	-	100	-	-
	0,25	417	-	-	53	-	-
	0,5	-	-	-	-	-	-
	1,0	204	-	-	25	-	-
	5,0	-	-	-	-	-	-
Fe^{2+}	0,01	562	-	1380	76	-	159
	0,25	363	-	-	40	-	-
	0,5	-	24	-	-	6,0	-
	1,0	166	-	-	21	-	-
	5,0	-	17	-	-	3,9	-

Таким образом, на ряде примеров мы убедились, что независимые термодинамические оценки форм существования комплексов в подземных водах являются необходимым элементом анализа миграционных процессов. Полученные результаты указывают на значительные колебания эффективной емкости пород — в зависимости от состава, минерализации и показателей $pH-Eh$ техногенных растворов. Однако ясно, что обособленное рассмотрение гидродинамической и гидрогеохимической частей миграционной задачи оказывается допустимым лишь благодаря наличию единого поршневого фронта вы-

теснения. Поэтому при дальнейшем анализе разумно оценить роль факторов, переводящих процесс в дисперсионную область. Поскольку степень закомплексованности компонентов на различных участках концентрационной волны, испытывающей дисперсионное «растяжение», является переменной величиной, процесс становится нелинейным. Строгое решение такой задачи можно получить численными методами.

Некоторые результаты подобного моделирования представлены нами в разд. 8.2.2 и 8.3.2. Там же приводятся расчеты по программе SATRA-CHEM [34], при разработке алгоритма которой авторам удалось свести к минимуму проявление эффектов численной дисперсии. Из результатов моделирования следует, что фронт поршневого вытеснения почти точно совпадает с положением точки $\bar{c}_1 = 0,5$ дисперсионной волны. Такой же результат дает сопоставление численных и аналитических оценок для других модельных условий, характеризующихся относительно низкими числами Пекле ($Pe = 10-20$). Все это говорит об относительно слабом влиянии гидродисперсии лигандов на точность определения положения фронта сорбирующегося компонента по простейшим балансовым формулам. Поэтому последние могут рекомендоваться для практических расчетов одномерного массопереноса.

6.1.3.2. Модель миграции радиоактивных растворов, содержащих коллоидные частицы

Для понимания роли коллоидов в миграции радионуклидов важное значение имеют три аспекта, связанные с физико-химическими особенностями поведения этих частиц в водонасыщенных средах: 1) слабая сорбируемость коллоидных форм миграции элементов минеральной поверхностью; 2) перераспределение веще-

ства между сорбирующими поверхностями трещин и мигрирующими коллоидами в пользу последних, и 3) весьма низкая диффузионная проницаемость тонкопористых материалов для коллоидных частиц; последний аспект имеет принципиальное значение для анализа миграции в комплексах трещиновато-пористых пород (разд. 6.2.3.2).

В то же время исследования показывают [33], что даже в гомогенных трещиноватых породах должны наблюдаться довольно сильные различия в скоростях переноса и масштабах дисперсии между ионными и коллоидными миграционными формами, что связано с наличием вторичных минеральных отложений на стенках трещин: эти отложения увеличивают буферность системы по отношению к растворенному веществу, а кинетика их молекулярно-диффузионного насыщения увеличивает суммарную дисперсию фронтов — в сравнении с чисто механической дисперсией коллоидов. Кроме того, авторы работ [29,30] напоминают, что коллоиды, как более тяжелые частицы, концентрируются в средней плоскости трещин, где имеют место повышенные скорости движения воды. Определенную роль может играть и исключение трещин ограниченного раскрытия из процесса миграции коллоидов, что также приводит к их перемещению со скоростями, превышающими средние действительные скорости движения подземных вод ($u = v/n$).

Физически понятно, что при движении раствора в гомогенной пористой (трещиноватой) среде вынос частиц M_1M_2 (разд. 5.2.3.2) за границу фронта сорбции ионов M_1 приводит к нарушению равновесия и распаду соединения M_1M_2 (коллоид теряет ион радионуклида). Образовавшаяся порция ионов M_1 идет на насыщение сорбционной емкости породы, что вынуждает единый фронт двигаться с повышенной скоростью, зависящей от устойчивости соединения M_1M_2 и концентрации в растворе формирующих его частиц.

Составляя уравнение баланса для элементарной трубки тока, подобное (6.43), приходим к выражению для скорости перемещения границы радиоактивного раствора:

$$u = \frac{dl}{dt} = \frac{v}{n + \Delta n}, \quad \Delta n = \frac{\rho K_d}{1 + K_d Fc_2}. \quad (6.45)$$

Величина Δn контролирует степень сорбционной задержки переносимых радионуклидов при наличии в растворе коллоидов. Соответствующее выражение для «фактора сорбционной задержки (R)» имеет вид:

$$R = 1 + \frac{\rho K_d}{n(1 + K_d Fc_2)}. \quad (6.45,a)$$

Несколько отличным путем к такому же выражению пришли ранее авторы работы [51], в которой одновременно отмечается возможность необратимого характера реакции (5.32), что, естественно, сместит оценки по формулам (6.45) и (6.45a). С этих позиций, особый интерес представляет экспериментальная оценка констант образования (λ_1) и распада (λ_2) частиц M_1M_2 (глинистый коллоид — $K_d = 79 \text{ см}^3/\text{г}$), выполненная в работе [45]: $\lambda_1 = 720 \text{ сут}^{-1}$, $\lambda_2 = 2,4 \text{ сут}^{-1}$. Эти значения свидетельствуют о достаточной строгости равновесной модели (5.32), предназначенной для полевого масштаба исследований (прогноза).

Из соотношений (6.45) и (6.45a) видно, что коллоидообразование становится значимым процессом при $FK_d c_2 > 0,2-0,5$. По оценкам авторов тех же работ [51], величина FK_d может достигать $N \cdot 10^4 \text{ см}^3/\text{г}$, т.е. коллоидный перенос играет заметную роль в транспорте радионуклидов лишь при довольно высоких содержаниях коллоидных частиц в подземных водах ($c_2 > 10 \text{ мг/л}$), особенно, если сорбция на коллоидах существенно необратима.

Аналогичным образом можно показать, что для альтернативной модели (5.37) параметр R зависит от формы нахождения радионуклидов в различных диапазонах насыщенности раствора:

$$R(c^T) = \begin{cases} 1 + \frac{K_d^s \rho}{n}, \\ 1 + \frac{K_d^c \rho}{n}, \end{cases} \quad (6.46)$$

где K_d^s и K_d^c — коэффициенты сорбционного распределения для растворенных и коллоидных форм миграции радионуклидов.

6.1.3.3. Деструкция мигрантов

Дифференциация моделей проводится в соответствии с порядком кинетических реакций, описывающих деструкцию вещества.

1°. Кинетические реакции первого порядка

Эти модели получили наиболее широкое распространение, что связано с возможностью достаточно обобщенного рассмотрения разнообразных физико-химических процессов и радиоактивного распада, которые формально удовлетворяют предпосылке о пропорциональности интенсивности распада вещества и его собственной текущей концентрации — см. (5.38). Таким образом, поведение любого из неустойчивых компонентов рассматривается независимо от нахождения в системе других компонентов, т.е. расчетные модели являются однокомпонентными.

Представленные в настоящем разделе аналитические решения получены в основном для условий фундаментальной краевой задачи, предполагающей, в частности, постоянство граничной концентрации ($c = c_0 = \text{const}$). Однако часто приходится иметь дело с так называемыми

«затухающими» источниками загрязнения, в которых не происходит накопления радионуклидов и постепенно отмечается падение их концентраций по экспоненциальному закону. В этом случае искомые решения могут быть представлены в обобщенном виде:

$$c |_{\lambda_p > 0} = e^{-\lambda_p t} c |_{\lambda_p = 0}, \quad (6.47)$$

т.е. они получаются путем умножения функций $c |_{\lambda_p = 0}$ отвечающих известным решениям задач переноса без распада, на «фактор распада» — временную функцию $e^{-\lambda_p t}$.

Одномерный массоперенос без дисперсии при постоянной граничной концентрации ($\bar{c}_x=0 = 1$) описывается хорошо известным решением:

$$\bar{c} = \exp \left(-\frac{\lambda_p x n}{v} \right), \quad (6.48)$$

которое справедливо для участка концентрационной волны $X \leq vt/n$; при $X > vt/n$ $c = 0$. В соответствии с этим решением, за фронтом переноса концентрация остается постоянной в течение всего периода миграции. На фронте поршневого вытеснения в расчетный момент времени t значение относительной концентрации $\bar{c} = e^{-\lambda_p t}$, откуда следует, что при $t > (2-3)/\lambda_p$ концентрация на фронте вытеснения близка к фоновой: наступает стационарный режим переноса, при котором границы ореола остаются стабильными весьма длительное время (при постоянной входной концентрации) — см. рис. 6.6,а. В соответствии с формулой (6.48), длина переходной зоны, в пределах которой концентрация падает от $\bar{c} = 0,99$ до $\bar{c} = 0,01$, составляет $4,6v/\lambda_p n$.

Соответствующее решение для «затухающего» источника имеет вид:

$$c = \begin{cases} c_0 \exp(-\lambda_p t) & \text{при } t > xn/v, \\ 0 & \text{при } t \leq xn/v. \end{cases} \quad (6.49)$$

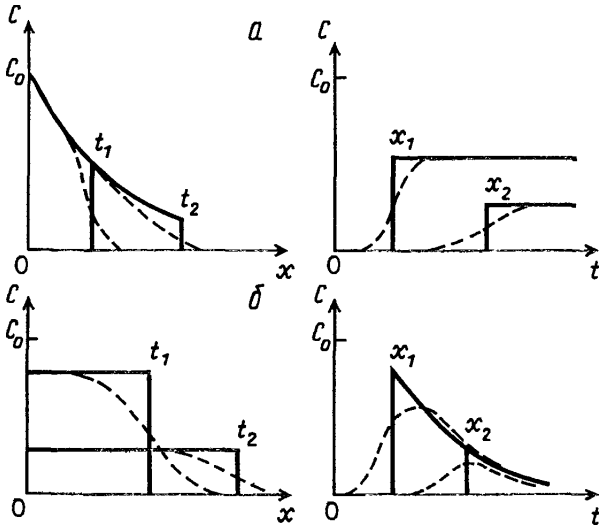


Рис. 6.6. Характерные графики распределения $c(x, t)$ компонента, подверженного распаду; а и б отвечают различным граничным условиям: а - $c(0, t) = c_0$, б - $c(0, t) = c_0 e^{-\lambda_p t}$. Сплошные и пунктирные линии отвечают расчетным схемам поршневого вытеснения и микродисперсии

Интересно отметить, что, как следует из этого решения, концентрация вещества во всей области $x < vt/n$ имеет одинаковое значение, изменяющееся во времени в диапазоне $c = c_0 \exp(-xn \lambda_p / v)$ до $c = 0$. Характер концентрационных распределений показан на рис. 6.6, б.

Приведем также обобщенное решение задачи одномерного массопереноса с продольной дисперсией для случая, когда интенсив-

ность деструкции в граничном растворе контролируется показателем $\lambda_p^r = \lambda_p$ [50]:

$$c = \frac{c_0}{2} \exp(-\lambda_p^r t) \times \\ \times \left\{ \exp \left[\frac{x(v-\mu)}{2D_L} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{x-\mu t/n}{2\sqrt{D_L t/n}} \right] + \right. \\ \left. + \exp \left[\frac{x(v+\mu)}{2D_L} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{x+\mu t/n}{2\sqrt{D_L t/n}} \right] \right\}, \quad (6.50)$$

где $\mu = \sqrt{v^2 + 4D_L(\lambda_p - \lambda_p^r)n}$.

Полезно обратить внимание, что с граничным условием $c(x=0, t) = c_0 \cdot e^{-\lambda_p^r t}$, для которого получено решение (6.50), может ассоциироваться процесс разбавления какого-либо компонента после его кратковременного («аварийного») сброса в поверхностный бассейн, приведшего к подъему концентрации до значения c_0 , т.е. $\lambda_p^c \approx Q_B/W_B$, где Q_B и W_B — расход воды, поступающей в инфильтрационный бассейн, и его объем. В случае кратковременного поступления в бассейн разлагающегося компонента, $\lambda^r \approx \lambda_p + Q_B/W_B$.

В работе [28] приведены графики решения (6.50) при $\lambda_p^r = 0$, позволяющие найти время регистрации на расстоянии L от источника загрязнения фиксированных концентраций $\bar{c} = 10^{-2}$, 10^{-4} и 10^{-6} при различных значениях безразмерных параметров $Pe = vL/D_L$, $L_D = \lambda_p L^2/D_L$. В качестве примера на рис. 6.7 воспроизведен один из такого рода графиков ($\bar{c} = 10^{-4}$), который может быть полезен при оценке защитной роли различных техногенных или геологических барьеров, оконтуривающих участки складирования высокотоксичных отходов.

Приведем также базовые решения задач объемного рассеяния в одномерном фильтрационном потоке для случая, когда источник имеет ограниченные в плане размеры [24]:

$$c(x, y, t) = \frac{c_0}{4} \Psi_1 \Psi_2 \quad (6.51)$$

— двумерное рассеяние;

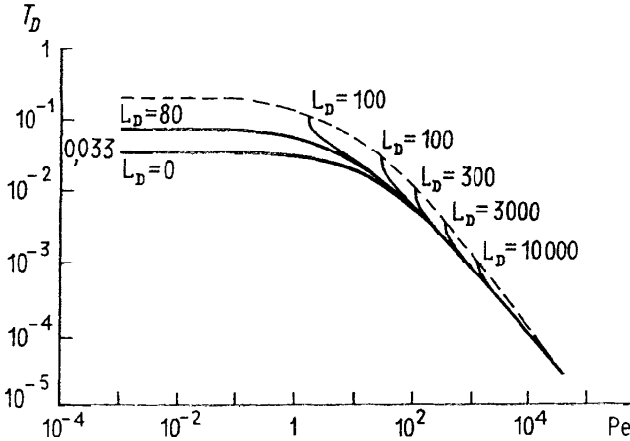


Рис. 6.7. Типовые кривые для оценки безразмерных времен ($T_D = D_L t / n_z L$) фиксации концентрации $c = 10^{-4}$ на расстоянии L (плоская одномерная задача); $Pe = vL/D_L$, $L_D = \lambda_p L^2/D_L$

$$c(x, y, z, t) = \frac{c_0}{8} \Psi_1 \Psi_2 \Psi_3 \quad (6.51, a)$$

— трехмерное рассеяние;

$$\begin{aligned} \Psi_1 = & \exp \left[\frac{x(V - \mu)}{2D_L} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{x - \mu t/n}{2\sqrt{D_L t/n}} \right] + \\ & + \exp \left[\frac{x(v + \mu)}{2D_L} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{x + \mu t/n}{2\sqrt{D_L t/n}} \right], \\ \Psi_2 = & \operatorname{erf} \left[\frac{y + b_0}{2\sqrt{D_{T_y} x/v}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{y - b_0}{2\sqrt{D_{T_y} x/v}} \right], \end{aligned} \quad (6.51, b)$$

$$\Psi_3 = \Psi_2 \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{Z + d_o}{2 \sqrt{D_{T_z}} x / v} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{z - d_o}{2 \sqrt{D_{T_z}} x v} \right] \right\}.$$

Здесь b_p — половина ширины источника, d_o — глубина источника, $\mu = \sqrt{v^2 + 4 \lambda_p n D_L}$. При $D_L \rightarrow 0$ (т.е. когда дисперсией в продольном направлении можно пренебречь) функция Ψ_1 редуцируется к виду:

$$\Psi_1 = 2 \exp \left(-\frac{\lambda_p n x}{v} \right), \quad x \leq vt/n \quad (6.51, \text{в})$$

Если пренебречь также поперечной дисперсией ($D_{T_{y,z}} = 0$), то формулы (6.51) переходят в соотношение (6.48).

В принципе, если известно решение задачи микродисперсии $c'(\Theta)$, описывающее миграцию стабильного компонента, всегда можно получить решение более общей задачи распада в интегральной форме [12]:

$$c = \int_0^t \frac{\partial c'(\Theta)}{\partial \Theta} H_o(t, \Theta) d\Theta; \quad (6.52)$$

здесь функция $H_o(t, \Theta)$ играет роль некоторой «функции влияния распада».

Другое представление результирующего решения получается после интегрирования формулы (6.52) по частям:

$$c = c'(\Theta) H_o(t, \Theta) \Big|_0^t - \int_0^t c'(\Theta) \frac{\partial H_o(t, \Theta)}{\partial \Theta} d\Theta, \quad (6.53)$$

где $\frac{\partial H_o(t, \Theta)}{\partial \Theta} = -\lambda_p e^{-\lambda \Theta}$. Отсюда находим решение

$$c = c'(t) e^{-\lambda_p t} + \lambda_p \int_0^t c'(\Theta) e^{-\lambda_p \Theta} d\Theta, \quad (6.54)$$

довольно удобное для численно-аналитических расчетов. Например, для простейшего случая поршневого вытеснения [$c'(t) = 0$ при $t < t_0 = \chi n / v$ и $c'(t) = 1$ при $t > t_0 = \chi n / v$]:

$$c_i|_{t>t_0} = e^{-\lambda_p t} + \lambda_p \int_{t_0}^t e^{-\lambda_p \Theta} d\Theta = e^{-\lambda_p t_0}, \quad (6.55)$$

т.е. приходим к хорошо известному соотношению.

2°. Кинетические реакции второго порядка

В этой предпосылке модель становится двухкомпонентной; ей соответствует система дифференциальных уравнений (при $D_L = 0$):

$$n \frac{\partial c_i}{\partial t} + v \frac{\partial c_i}{\partial x} + n \lambda_{12} \nu_i \prod_{j=1}^2 c_j = 0, \quad (6.56)$$

где λ_{12} — кинетический коэффициент, ν_i — стехиометрический коэффициент реакции.

Для решения этой системы введем новую функцию c_x , которая отвечает остаточной концентрации компонентов, прореагировавших к моменту времени t , причем

$$c_i = c_{i0} = \nu_i c_x$$

(c_{i0} — граничная концентрация i -го компонента). Тогда интегрирование уравнения (6.56), трансформированного в систему подвижных координат x' , t' ($x' = x$, $t' = t - xn/v$), дает общее решение задачи:

$$\int_0^{c_x} \frac{dc_x}{\prod (c_{i0} - \nu_i c_x)} = \frac{\lambda_{12} n x}{v} (t' > 0). \quad (6.57)$$

Отсюда:

$$\frac{c_1}{c_{10}} = \frac{\nu_2 c_{10} - \nu_1 c_{20}}{\nu_2 c_{10} - \nu_1 c_{20} A}, \quad \frac{c_2}{c_{20}} = \frac{(\nu_2 c_{10} - \nu_1 c_{20}) A}{\nu_2 c_{10} - \nu_1 c_{20} A}, \quad (6.58)$$

где

$$A = \exp [-(v_2 c_{10} - v_1 c_{20}) \lambda_{12} x n / v], \quad \frac{c_1}{c_2} = \frac{c_{10}}{c_{20}} A.$$

3°. Некоторые обобщенные решения

Пусть кинетика деструкции вещества описывается уравнением Микаэлиса-Ментена (5.47), которое, как известно, включает в себя параметры реакций нулевого и первого порядков ($\lambda_p = K_0 K_1$). Тогда решение миграционной задачи можно представить в форме:

$$\ln \bar{c} + K_1 c_0 (1 - \bar{c}) = -K_0 K_1 x n / v \quad (6.59)$$

— в области $x < vt/n$; естественно, перед фронтом вытеснения ($x \geq vt/n$) $\bar{c} = 0$.

При одновременном участии компонентов в реакциях, описываемых уравнениями кинетики первого и второго порядков, процесс описывается решением

$$c_1 = \frac{c_{10} (v_2 c_{10} - v_1 c_{20}) e^{-\lambda_p x n / v}}{v_2 c_{10} - v_1 c_{20} B},$$

$$v_1 c_2 = v_2 c_1 - (v_2 c_{10} - v_1 c_{20}) e^{-\lambda_p x n / v}, \quad (6.60)$$

где $B = \exp [\lambda_{12} (v_2 c_{10} - v_1 c_{20}) (e^{-\lambda_p x n / v} - 1) / \lambda_p]$. При $\lambda_{12} \rightarrow 0$ или $\lambda_p \rightarrow 0$ приходим к частным решениям уравнения (6.60) в формах (6.49) или (6.58).

6.2. Модели миграции неконсервативных компонентов в гетерогенных водоносных системах

Модельные представления о физико-химических взаимодействиях в гетерогенных средах еще недостаточно разработаны. Трудности соответствующего анализа обусловлены многоуровненным характером миграционного

* Физическая химия. Под ред. К.С.Краснова. М.: Высшая школа, 1982, 687 с.

процесса в целом: зачастую с каждым уровнем проявления гетерогенности связаны свои акты химического взаимодействия, требующие индивидуального отражения в расчетной схеме. Так как процесс контролируется масштабными эффектами, введение обобщенных макрохарактеристик должно проводиться с особой осторожностью (например, при сорбции или растворении скоплений углеводородов). Остается неясным, как получать экспериментальные оценки для таких процессов, часто требующих более детального (локального) описания гетерогенности, т.е. не допускающих осреднения на тех же уровнях гетерогенности, что и механический перенос.

Немалые трудности связаны с выбором приоритетных термодинамических форм миграции вещества в потоках, характеризующихся большим диапазоном изменения ионной силы (минерализации) вод под влиянием макродисперсии, что сужает возможности использования однокомпонентных моделей. Одновременно эффекты макродисперсии смещают описание процесса в нелинейную область: расчетные параметры физико-химического взаимодействия меняются в зависимости от текущих значений концентрационных функций. Все эти эффекты требуют широкого привлечения численного моделирования.

Тем не менее, некоторые упрощенные оценки могут быть получены при анализе процессов в асимптотическом режиме, что, несмотря на ограниченную применимость такого анализа, представляет несомненный практический интерес.

6.2.1. Сорбция в стратифицированных пластах

Рассматривая миграцию инертных компонентов в стратифицированных толщах (разд. 3.1), мы считали, что флуктуация поля истинных скоростей фильтрации обус-

ловлена только профильной изменчивостью фильтрационных свойств. Однако из общих соображений ясно, что чередование слоев с различной степенью дисперсности (глинистости) пористого материала, обладающих различными показателями емкости поглощения вещества, является для сорбируемых компонентов фактором, осложняющим их профильное перераспределение. В ряде случаев для его нахождения в качестве базовых* могут использоваться известные модели макродисперсии.

Так, *равновесная* сорбция в слоистом пласте, допускающем *детерминированное* представление параметров, учитывается посредством введения в расчетные зависимости величины дополнительной емкости поглощения $\Delta n_i = K_{di} \rho \equiv K_{Fi}$ для каждого i -го слоя. При анализе процесса в асимптотическом режиме (весьма длительные этапы массопереноса) допустимо введение обобщенного (эффективного) параметра $\Delta n^* = K_e^*$ для всей слоистой системы, т.е., по аналогии с (6.1-6.2), конвекция описывается выражением:

$$u^* = \frac{v^*}{n_s^*}, \quad n_s^* = n^* + K_F^*, \quad (6.61)$$

где все характеристики определяются как средневзвешенные по мощности (m) пласта [47,48]:

$$v^* = \frac{1}{m} \int_0^m v \, dz, \quad n^* = \frac{1}{m} \int_0^m n \, dz, \quad K_F^* = \frac{1}{m} \int_0^m K_F \, dz. \quad (6.62)$$

Например, истинная скорость миграции в двухслойном пласте составляет

* При этом сорбционные процессы соответственно смещают временные диапазоны применимости различных расчетных схем.

$$u^* = \frac{v_1 m_1 + v_2 m_2}{n_1 + n_2 + K_{r1} + K_{r2}}. \quad (6.63)$$

Аналогичным образом корректируются значения коэффициента макродисперсии (D); в случае двухслойного пласта имеем:

$$D_L^* = D_s^* \frac{(n_{s1} n_{s2} m_1 m_2)^2}{3 \delta_{Tz} (m_1 + m_2)^3 (n^* + K_r^*)^2} \left(\frac{m_1}{v_1} + \frac{m_2}{v_2} \right) \left(\frac{v_1}{n_{s1}} - \frac{v_2}{n_{s2}} \right)^2 \quad (6.64)$$

В дополнение к сказанному, можно отметить, что *кинетика сорбционного процесса* дает рост расчетного коэффициента макродисперсии [11,47]:

$$D_L^* = D_s^* + D_k^*, \quad (6.65)$$

где

$$D_k^* = \frac{(v^*)^2}{(n^* + K_r^*)^2 m} \int_0^m \frac{K_r^2}{\alpha(z)} dz, \quad (6.66)$$

α — константа скорости сорбции — см. (5.27). Для двухслойного пласта получаем выражение:

$$D_k^* = \frac{(v^*)^2}{(m_1 + m_2) (n^* + K_r^*)^2} \left[\frac{m_1 K_{r1}^2}{\alpha_1} + \frac{m_2 K_{r2}^2}{\alpha_2} \right], \quad (6.67)$$

которое при равенстве всех параметров (однородный пласт) вырождается в формулу (6.12).

Стохастическая модель равновесной сорбции в стратифицированном пласте, характеристики которого заданы коррелированными функциями v_z и $K_r(z)$, исследовалась в работе [1]: было показано, что режим послойного переноса описывается эффективными параметрами:

$$n_s = \frac{n + K_r}{\gamma} \text{ и } D_s = D(t) = \frac{v^2 t}{n + K_r} \varphi_{v,r}^2, \quad (6.68)$$

где

$$\gamma = \left[1 + \bar{K}_r^2 W_r^2 - \frac{\rho_{v,r}}{\nu(n + K_r)} \right], \quad \varphi_{v,r}^2 = \frac{\beta^2}{\gamma^2} - 1, \quad (6.68, a)$$

$$\beta^2 = [1 + W_k^2 + 3\bar{K}_r^2 W_r^2 - 4\rho_{v,r}/\nu(n + K_r)] ;$$

здесь W_r и W_k — коэффициенты вариации параметра сорбционного распределения (его среднее значение — K_r) и скорости фильтрации (среднее значение ν), $\rho_{v,r}$ — коэффициент корреляционной связи между ν и $\bar{K}_r = K_r/(n + K_r)$. На первых этапах миграции, вследствие отклонений эффективных коэффициентов распределения от средних значений, система демонстрирует псевдокинетическое поведение [20].

Из анализа представленных асимптотических зависимостей следует, что флуктуация сорбционных свойств вызывает снижение «невозмущенной эффективной пористости» $n + K_r$ в ураз [1]; это приводит к некоторому сокращению разрыва между адсорбционным фронтом и фронтом поршневого вытеснения инертных частиц. Так как в природе наблюдается обычно отрицательная корреляция ($\rho_{v,r} < 0$) между параметрами ν и K_r (глинистым прослоям с повышенной адсорбционной способностью свойственны, как правило, пониженные значения проницаемости), то вариации K_r должны одновременно увеличивать значение параметра дисперсии D — в сравнении со случаем, характеризующимся постоянством сорбционных свойств ($W_r = \rho_{v,r} = 0$) — см. формулу (3.25), в которой необходимо параметр n заменить на эффективное значение $n + K_r^*$. Таким образом, эффекты рассеяния окажутся разными для различных веществ.

* С другой стороны, ранее полученная для стратифицированного пласта формула (3.25) может рассматриваться как частный случай зависимости (6.68).

Очевидно рассмотренный подход можно распространить и для описания макродисперсии на весьма длительных этапах массопереноса; по аналогии с (3.20) и (3.26), имеем:

$$D_L^* = \rho_L^* v, \quad \delta_L^* \approx \frac{l_z^2}{3 \delta_{T_z}} \varphi_{v,g}^2, \quad (6.69)$$

где l_z — характерный масштаб корреляционной функции проницаемости.

6.2.2. Сорбция в стохастически неоднородных системах

В ранее рассмотренных моделях миграции консервативных компонентов (разд. 3.3) считалось, что дисперсия вещества является исключительно следствием изменчивости проницаемости массивов. Для неконсервативных компонентов, участвующих в сорбционном взаимодействии с породой, дополнительные эффекты рассеяния связаны с пространственными вариациями параметров, характеризующих изменчивость физико-химических свойств, в частности, коэффициента распределения K_d . Если в первом случае принято говорить о физической гетерогенности пород, то в последнее время, в связи с развитием стохастических моделей миграции неконсервативных компонентов, все чаще встречается термин «химическая гетерогенность» [16,20]. В современных модельных построениях [22] поля, отражающие физическую и химическую гетерогенность, описываются с помощью пространственных стохастических функций с заданной корреляционной структурой. Такого рода поля могут быть как хорошо коррелированными, так и полностью некоррелированными.

Представленные в работах [16,20] результаты анализа миграционных процессов в средах, описание которых

велось с привлечением геостатистических параметров распределения функций $\ln [K(\bar{x})]$ и $\ln [K_d(\bar{x})]$ (линейная изотерма сорбции), свидетельствуют:

1) об усилении продольного рассеивающего эффекта в случае существования наиболее реальной для природных условий отрицательной корреляционной связи между проницаемостью пород и сорбируемостью на них веществ; таким образом, проявляется так называемый эффект *псевдокинетической сорбции*, которая обусловлена не временем релаксации системы при установлении химических равновесий, а корреляционной структурой свойств среды; в модельных экспериментах, а также в полевых условиях отмечается влияние этих свойств и на расчетные значения сорбционных параметров, в частности, отмечается заметный рост расчетной величины K_d во времени;

2) об ослаблении продольной макродисперсии в более редком случае существования положительной корреляционной связи между полями параметров $\ln [K(\bar{x})]$ и $\ln [K_d(\bar{x})]$; описание такого эффекта в рамках гомогенной модели могло бы потребовать привлечения представлений (в данном случае — необоснованных) о нелинейном характере сорбции;

3) о существовании асимптотических режимов и параметров макродисперсии, подобных описанным для случая миграции инертных компонентов;

4) о сокращении масштабов поперечной дисперсии с ростом показателей, ответственных за интенсивность сорбционного поглощения вещества.

Авторы утверждают, что перечисленные выводы сохраняют свою силу и в случае миграции в гетерогенных средах неконсервативных компонентов, сорбция которых подчиняется нелинейным изотермам Фрейндлиха (5.7, $0 < N < 1$) [19] и Лэнгмюра (5.6) [17]. Однако при этом в работе [19] отмечается, что нелинейность сорбции приводит к некоторому подавлению дисперсивности

процесса, что понятно в свете аналогий с влиянием такой сорбции на гидродисперсию фронтов в однородных породах (разд. 6.1.1.1).

Интересно отметить, что в рамках подобных стохастических моделей собственно кинетический фактор также никак не влияет на асимптотическое положение боковых границ ореолов рассеяния в гетерогенных средах (т.е. предельные масштабы поперечной дисперсии остаются, согласно этим моделям, теми же, что и для инертных компонентов), о чем свидетельствует анализ работы [22]. В то же время, асимптотическая продольная дисперсивность возрастает и при выполнении временных критериев $t/t_h \gg 1$ ($t_h = l_x n/\nu$) и $t/t_r \gg 1$ [$t_r = K_f/\alpha (1 + K_f/n)$] принимает значение [22]:

$$\delta_L^* = \frac{K_f^2 \nu}{\alpha (n + K_f)^2} + \sigma_Y^2 l_x, \quad (6.70)$$

т.е. возрастает на величину первого члена в формуле (6.70) — в сравнении со случаем миграции консервативного компонента в эквивалентном гетерогенном пласте (3.53). В этом отношении, вклад кинетического фактора в общее продольное рассеяние компонентов — точно такой же, как и в гомогенных средах — см., например, структуру формулы (6.12).

Полученные в рамках аналитических представлений выводы были в целом подтверждены численным моделированием [42] для двумерного случая. В дополнение к сказанному было, однако, отмечено, что неопределенность прогнозов миграции кинетически сорбируемого вещества в стохастически неоднородных системах падает с ростом начального объема инъецируемого вещества (исходной площади загрязнения пласта).

В целом, значимость рассматриваемых эффектов возрастает при обосновании систем реабилитации качества подземных вод на загрязненных участках: кинетика десорбционных процессов в неоднородных пластах может оказаться решающим фактором, снижающим эффективность экстракции из водоносного горизонта загрязненных вод или его промывку чистыми водами [38].

6.2.3. Миграция в трещиновато-пористых породах

6.2.3.1. Особенности межфазовых взаимодействий

В расчетных зависимостях учитываются два вида взаимодействий — на поверхности пористых блоков и в их поровом пространстве. При рассмотрении линейной сорбции соответствующие параметры трещиноватости и пористости получают приращение

$$\Delta n = K_a S_b, \quad \Delta n_o = K_{Go}, \quad (6.71)$$

где K_a — коэффициент сорбционного распределения вещества на стенках трещин (разд. 5.1), $K_{Go} = K_d \rho$ — коэффициент Генри для внутрипорового пространства (безразмерный параметр). Значимость этих двух процессов обычно заметно меняется в пространстве и во времени: сорбция на стенках трещин особенно важна на первых этапах миграций и в передовой зоне продвижения внедряющегося раствора [26]. Сорбция в пористой матрице контролируется комплексным параметром $K_{do} D_M$ (или $K_{do} D_M^o n_o$, где D_M^o — коэффициент молекулярной диффузии в свободном растворе). При этом в экспериментальных исследованиях отмечается тенденция корреляции величин K_a и $K_{do} D_M$ [26].

Для описания дисперсионных эффектов используются массообменные параметры (λ_M или α_M), численные значения которых корректируются с учетом величин n_o^2 и D_M^2 , определенных для реальных сорбируемых веществ. Таким образом, зоны макродисперсии для различных

* Здесь не рассматриваются процессы растворения/осаждения: в средах с двойной пористостью они могут быть реально описаны в рамках численных моделей [37].

компонентов могут сильно различаться — в зависимости от комплексного параметра $K_{do} D_M^2 n_o$ [26].

Для описания нелинейной сорбции, подчиняющейся изотерме Лэнгмюра, в задачах прогнозного характера (когда реализуется квазистационарный режим массообмена между трещинами и блоками) можно воспользоваться асимптотическим решением (6.14), положив в нем

$$\tau = \alpha_M t, r = (1 - q_o/c_o n_o)^{-1}, p = (Kc_o)^{-1}, n \ll n_o. \quad (6.72)$$

Из этого решения, в частности, следует, что при достаточно больших (> 10) η и τ средняя точка индикаторной волны ($\bar{c} = 0,5$) перемещается с постоянной скоростью $u = v/(n_o + q_o/c_o)$. При этом фиксируется постоянная длина переходной зоны $\Delta X_n = X_{0,01} - X_{0,99} = 4,6(1 + 2p)v/\alpha_M n_o$.

Особенно сложными для анализа являются ионообменные процессы. Взаимодействие между взаимовытесняемыми катионами в обменном комплексе пористой матрицы приводит к дополнительной нелинейности процесса, обусловленной изменением расчетного коэффициента молекулярной диффузии по мере насыщения блоков веществом [8,36]. Если массоперенос рассматривается в рамках предпосылки сосредоточенной емкости, что это находит отражение в непостоянстве величины α_M [36].

Интересно отметить, что численные значения α_M зависят не только от состава трещинного и порового растворов, но и от направленности процесса (гистерезис). Это, в частности, означает, что «засоление» и «рассоление» гетерогенного водоносного горизонта будет протекать с различной интенсивностью: последний процесс обычно занимает гораздо больше времени.

6.2.3.2. Коллоидный транспорт вещества в трещиновато-пористых породах

В связи с возможностью интенсивного усвоения загрязнителей пористой матрицей на фоне миграции коллоидов, «исключенных» из этого процесса, роль последних в переносе загрязнений потенциально выглядит наиболее значимой именно в типичных трещиновато-пористых породах [27,29,30,43].

Как и прежде (разд. 6.1.3), построение соответствующих моделей будем связывать с необходимостью оценки транспорта радионуклидов, для которых коллоидные формы переноса традиционно считаются заслуживающими серьезного внимания.

При миграции «двухфазных» (содержащих ионные и связные коллоидные формы радионуклидов) растворов в гетерогенных трещиновато-пористых средах происходит нарушение исходного физико-химического равновесия за счет диффузии из трещин в пористую матрицу. Это приводит к «потере» части радионуклидов коллоидными частицами («сорбционная» модель) или растворению части радиокolloидов (модель «предельного насыщения»). И в том, и в другом случаях образовавшиеся свободные радионуклиды интенсивно сорбируются поверхностями трещин.

Для описания миграции радионуклидов в составе растворов, содержащих коллоидные частицы, способные адсорбировать радионуклиды на своей поверхности, необходимо обратиться к системе дифференциальных балансовых уравнений вида:

$$n \frac{\partial c_1}{\partial t} + n \lambda_p c_1^T + \frac{\partial \bar{c}_1}{\partial t} + \lambda_p \bar{c}_1 + W_s = L(c_1^T), \quad (6.73)$$

$$n \frac{\partial c_2^T}{\partial t} = L(c_2^T),$$

где c_1^T и c_2^T — суммарные концентрации растворенного вещества и коллоидов ($c_1^T = c_1 + c_{12}$, $c_2^T = c_2 + c_{12}$, $c_{12} = K_{12}c_1c_2$); $\bar{c}_1$ — концентрация радионуклида на породе; $L(.)$ — линейный дифференциальный оператор для конвективно-дисперсионного массопереноса — разд. 1.2.1, функция W_s определяется в соответствии с выражением (6.80) при $c = c_1$ (см. далее).

Нелинейные уравнения (6.73) легко преобразуются [34] к виду, удобному для численных расчетов методом конечных разностей. Нами осуществлена компьютерная реализация соответствующего алгоритма для одномерного случая.

Результаты математического моделирования, пример которого представлен на рис. 6.8, свидетельствуют о заметном влиянии коллоидообразования на характер концентрационных распределений. Наиболее существенно, что, в сочетании с гидродисперсией, коллоидообразование приводит к сильному росту концентраций (в сравнении со случаем $K_{12} = 0$) в области их низких значений — на переднем фронте массопереноса. Эти различия могут достигать одного и более порядков (см. рис. 6.8). Данное обстоятельство может принципиально повлиять на выводы о последствиях радиоактивного загрязнения водоносных горизонтов при характерных высоких граничных концентрациях радионуклидов, превосходящих на несколько порядков ДКБ, ибо в этом случае ожидаемое превышение фоновых значений весьма существенно.

К аналогичному, если не более жесткому, выводу пришли авторы работы [29], исследовавшие процесс коллоидного транспорта в единичных трещинах на базе более полной математической модели (учитывающей возможность сорбции загрязнителя на коллоидных частицах как по линейной, так и по нелинейной схеме (5,36), а также кинетический фактор этого процесса). Ими показана исключительная значимость данного процесса для сред с повышенной матричной пористостью, причем подчеркивается важность коллоидного транспорта загрязняющих компонентов в диапазоне низких значений их концентраций при хорошо выраженной кинетике сорбции/десорбции. Расчеты выполнялись при достаточно

умеренных значениях параметров $K'_d \equiv FK_d = 8,5 \cdot 10^2 \text{ см}^2/\text{г}$ (линейная модель), $D_M/n_0 = 7,8 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{сут}$, $n_0 = 0,05-0,3$; константа скорости сорбции варьировала в интервале $0,0013-13,0 \text{ сут}^{-1}$. При этом, однако, задавались достаточно высокие исходные содержания коллоидов в источнике загрязнения $c_{20} = 100 \text{ мг/л}$.

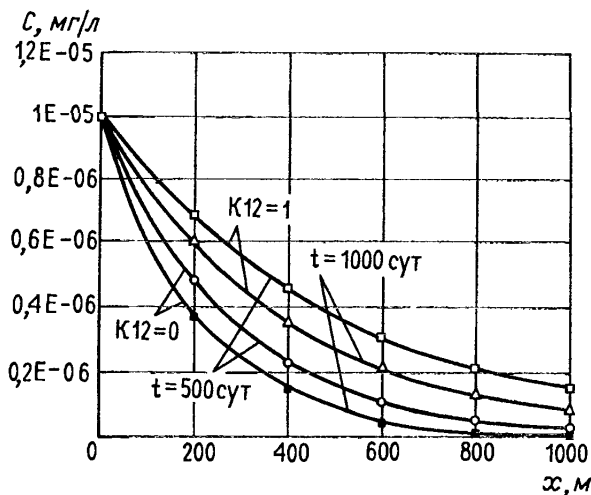


Рис. 6.8. Влияние коллоидного транспорта на концентрационные распределения радионуклидов в трещиновато-пористой среде. Модельные параметры: $v = 0,05 \text{ м/сут.}$, $n = 0,001$, $K_a S_b = 0,005$, $\lambda_M = 0,0001 \text{ сут.}^{-1}$, $c_{j0} = 0,00001 \text{ мг/л}$, $c_{20} = 1 \text{ мг/л}$ ($\Delta x = 5 \text{ м}$; $\Delta t = \text{сут.}$, $L = 1000 \text{ м}$)

Наконец, теми же авторами [30] показано, что в случае стохастически неоднородной трещиноватой среды (представленной системой взаимопересекающихся ортогональных трещин) надежность прогнозов распределения компонентов, переносимых коллоидами, резко падает в сравнении со случаем миграции вещества в простейших ионных формах. Это связано с повышенной чувствительностью коллоидного транспорта к индивидуальным параметрам трещин, в то время как соответствующие флуктуации скоростей переноса растворенных форм вещества сглаживаются матричной диффузией. Вместе с тем данные работы [30] показывают, что в

глубокозалегающих водоносных формациях, связанных с трещиноватыми породами, содержания коллоидов обычно не превышают 1 мг/л, так что отношение $K'_d c_2 \ll 1$. В этом случае значимость коллоидного транспорта радионуклидов невелика.

В дополнение к сказанному, можно заметить, что приближенный анализ рассматриваемого процесса может осуществляться и на базе известных аналитических соотношений — в случае избыточной концентрации коллоидов в растворе ($c_2 \gg c_1$ — наиболее практически важная ситуация). В этом случае система (6.73) вырождается в линейное уравнение, для которого справедливо решение, представленное в работе [44]. В нем, однако, должны быть скорректированы параметры, контролирующие трещинную емкость и интенсивность массообмена между трещинами и блоками. Для модели равномерно-трещиноватого пласта эта коррекция в наших обозначениях имеет вид:

$$\begin{aligned} n &\rightarrow n_{эф} = n + \frac{K_a S_b}{1 + F K_d c_{20}}, \\ \lambda_M &\rightarrow \lambda_{Mэф} = \frac{\lambda_M}{(1 + F K_d c_{20})^2} \end{aligned} \quad (6.74)$$

т.е., согласно аналитическим зависимостям (6.74), присутствие в растворе коллоидов активизирует конвекцию по трещинам и ослабляет обменные процессы.

Некоторые полезные оценки, иллюстрирующие влияние коллоидообразования на массоперенос в трещиновато-пористых породах, были получены с помощью метода «интегрального баланса». Так, если положить, что движение передового фронта вытесняющего

* Castaing R. Un model simple pour la migration dans un milieu fracture. Journ. Hydrol., 1993, v.125, №1-2, p.p.55-92.

раствора определяется характеристикой $t_f = t_f(x)$, контролирующей интенсивность насыщения ионами пористых блоков

$$W_s \approx \frac{\sqrt{\lambda_M}}{\sqrt{\pi}(t - t_f)} c_{20} \quad (t > t_f), \quad (6.75)$$

то интегрирование уравнения (1.20) при $\nabla J = v \partial c / \partial x$ и $\lambda_p = 0$ дает:

$$t_f = \frac{n + K_a S_b / (1 + K'_d c_{20})}{v} x + \left[\frac{\sqrt{\pi \lambda_M}}{2v (1 + K'_d c_{20})} \right]^2 x^2. \quad (6.76)$$

Отсюда хорошо видно, что высокие значения константы $K'_d = K_d F$ снижают не только сорбционный потенциал поверхностей трещин, но и уменьшают демпфирующую роль пористой матрицы; в пределе $t_f = \frac{nx}{v} \equiv t_o$, что отвечает переносу инертных компонентов в гомогенных средах.

Для описания всего концентрационного фронта предлагается следующая аппроксимация:

$$\bar{c} = \frac{2}{\pi} \arccos(\xi), \quad (6.77)$$

$$\xi = \sqrt{\frac{t_f - t'_o}{t - t'_o}}, \quad t'_o = \frac{n + K_a S_b / (1 + K'_d c_{20})}{v} x.$$

Перенос радиоактивных растворов на коллоидах, сформировавшихся из пересыщенных растворов, описывается в рамках модели [49]:

$$n_s(c^T) \frac{\partial c^T}{\partial t} + \lambda_p n_s(c^T) + W_s = L(c^T), \quad (6.78)$$

где c^T определяется согласно (5.37), а эффективный емкостной параметр $n_s(c^T)$, по аналогии с (6.46), дается функцией вида:

$$n_s(c^T) = \begin{cases} n + K_a^s S_b & \text{при } c^T < c_o, \\ n + K_a^c S_b & \text{при } c^T \geq c_o, \end{cases} \quad (6.78, a)$$

где K_a^s и K_a^c — коэффициенты поверхностной сорбции растворенных и коллоидных форм.

Численные решения уравнения (6.78) применительно к случаю миграции урана в трещиновато-пористом коллекторе приведены в работе [49].

6.2.3.3. Описание деструкции вещества в трещиновато-пористых породах

В гетерогенных трещиновато-пористых породах деструкция (распад) протекает не только в трещинах, но и в объеме раствора, насыщающего диффузионным путем пористую матрицу. Перепишем исходное дифференциальное уравнение баланса вещества (1.20) в трещинах в виде:

$$n \frac{\partial c}{\partial t} + n \lambda_p c + W_s + v \frac{\partial c}{\partial x} - D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0. \quad (6.79)$$

Как и ранее (разд. 3.2), будем рассматривать ситуации для двух основных законов массообмена между подвижным раствором, заполняющим трещины, и неподвижной поровой влажой:

для расчетной схемы неограниченной емкости —

$$W_s = -\lambda_M^{1/2} [\lambda_p^{1/2} (\operatorname{erfc} \sqrt{\lambda_p t} - 1) - e^{-\lambda_p t / \sqrt{\pi t}}] c; \quad (6.80)$$

для расчетной схемы сосредоточенной емкости —

$$\begin{cases} W_s = n_o \frac{\partial c_b}{\partial t} \\ \frac{\partial c_b}{\partial t} = \alpha_M (c - c_b) - \lambda_p c_b \end{cases} \quad (6.81)$$

Трансформировав эти соотношения в область изображений по Лапласу, приходим к обыкновенному дифференциальному уравнению:

$$\frac{v}{n} \frac{d\tilde{c}}{dx} + \chi(p) \tilde{c} - \frac{D_L}{n} \frac{d^2 \tilde{c}}{dx^2} = 0, \quad (6.82)$$

где функция $\chi(p)$ имеет два основных представления

$$\chi = p + \lambda_p + \frac{\sqrt{\lambda_M(p + \lambda_p)}}{n} \quad \text{и} \quad (6.83)$$

$$\chi = p + \lambda_p + \frac{\alpha_M n_o p}{(p + \alpha_M + \lambda_p) n} \quad (6.83, a)$$

— соответственно, для расчетных схем неограниченной и сосредоточенной емкости.

Уравнение (6.82) при постоянных граничном $c(t, 0) = c_o$ и начальном $c(0, t) = 0$ условиях имеет следующее решение:

$$\tilde{c} = \frac{c_o}{p} \exp\left(\frac{vx}{2D_L}\right) \exp\left(-\frac{vx}{2D_L} \sqrt{1 + \frac{4D_L n}{v^2} \chi}\right). \quad (6.84)$$

При поршневом характере движения индикатора в пласте ($D_L \rightarrow 0$) решение (6.84) упрощается:

$$\tilde{c} = \frac{c_o}{p} \exp(-t_o \chi). \quad (6.85)$$

Переход в область оригинала функции $\tilde{c}$ (6.85) для расчетной схемы неограниченной емкости выполнен в статье [44]:

$$\bar{c} = \frac{1}{2} e^{-\lambda_p t_o} [e^{-\eta} \operatorname{erfc}\left(\frac{\eta}{2\sqrt{\tau}} - \sqrt{\tau}\right) + e^{\eta} \operatorname{erfc}\left(\frac{\eta}{2\sqrt{\tau}} + \sqrt{\tau}\right)], \quad (6.86)$$

где $\bar{c} = c/c_o$, $\eta = \frac{t_o}{n} \sqrt{\lambda_p \lambda_M}$, $\tau = \lambda_p (t - t_o)$. В этой же работе приводится и более общее решение ($D_L > 0$). При $t \rightarrow \infty$ формула (6.86) дает стационарное распределение концентрации:

$$\bar{c} = c^{-(\eta + \lambda_p t_o)}. \quad (6.87)$$

Таким образом, как и в гомогенных породах, процесс распада приводит к формированию квазистационарных ореолов загрязнения. Однако, благодаря обмену веществом между трещинами и блоками, степень локализации ореолов выше: длина переходной зоны Δx_λ сокращается по сравнению с гомогенным пластом в $[1 + \sqrt{\lambda_M/\lambda_p}/n]$ раз.

Для нахождения соответствующих решений для расчетной схемы сосредоточенной емкости перепишем формулу (6.84) в виде

$$\begin{aligned} \bar{c} = e^{-\eta \left\{ \frac{c_o}{p} e^{-t_o(p+\lambda_p)} \right\}} + e^{-\eta \left\{ \frac{c_o}{p} e^{-t_o(p+\lambda_p)} \right\}} \times \\ \times \left\{ \exp \left[\frac{(\alpha_M + \lambda_p) \eta}{p + \alpha_M + 1} \right] - 1 \right\} \end{aligned} \quad (6.88)$$

($\eta = \alpha_M n_o x/v$). В этом случае для каждого сомножителя в фигурных скобках существует табличный оригинал. Тогда, используя дополнительно для второго слагаемого в (6.88) теорему интегральной свертки, окончательно получаем:

$$\bar{c} = e^{-\lambda_p t_o} e^{-\eta} \left\{ 1 + \int_0^\tau e^{-z} \sqrt{\frac{\eta}{z}} I_1(2\sqrt{\eta z}) dz \right\}, \quad (6.89)$$

где $I_1(y)$ модифицированная функция Бесселя;

$$\tau = (\alpha_M + \lambda_p)(t - t_o), \quad \eta = \alpha_M x n_o / v \equiv \alpha_M t_o n_o / n.$$

Замена в формуле (6.89) функции $I_1(y)$ на соотношение $(\partial I_0(y)/\partial y)(1/y)$ (где $y = 2\sqrt{\tau z}$) и последующее интегрирование по частям трансформирует решение (6.89) к виду:

$$\bar{c} = e^{-\lambda_p t_o} e^{-\eta} \left[e^{-\tau} I_0(2\sqrt{\eta \tau}) + \int_0^\tau e^{-z} I_0(2\sqrt{\eta z}) dz \right] \quad (6.90)$$

Дальнейшие преобразования дают формулу:

$$\bar{c} = e^{-\lambda_p t_0} J(\eta, \tau), \quad (6.91)$$

где $J(\eta, \tau) = 1 - e^{-\tau} \int_0^{\eta} e^{-z} I_0(2\sqrt{\tau z}) dz$ — хорошо известная функция, графики которой приводятся на рис. 3.4, а.

Таким образом, мы пришли к интересному результату: для описания распада вещества в гетерогенном трещиновато-пористом пласте, массообмен в котором между трещинами и блоками носит регулярный (квазистационарный — см. зависимости 6.81) характер, можно использовать известные базовые решения для консервативного компонента, в которых безразмерная переменная $\tau = \alpha_M (t - t_0)$ заменяется на $\tau \equiv \tau' = (\alpha_M + \lambda_p) (t - t_0)$, а само значение концентрационной функции домножается на величину $\exp(-\lambda_p t_0)$, т.е.

$$c|_{\lambda > 0} = c|_{\substack{\lambda_p = 0 \\ \tau = \tau'}} e^{-\lambda_p t_0}. \quad (6.92)$$

Дисперсионное рассеяние может быть учтено решениями (6.52) или (6.53), для которых F.T.Lindstrom и L.Boersma [35] получили следующие выражения функции $H_0(t, \Theta)$ и ее производной:

$$H_0(t, \Theta) = e^{-\eta} \left\{ e^{-\tau} J_0(2\sqrt{\eta\tau}) + \int_0^{\tau} e^{-z} J_1(2\sqrt{\eta z}) dz \right\}, \quad (6.93)$$

$$\frac{\partial H_0(t, \Theta)}{\partial \Theta} = -e^{-(\eta+\tau)} \left\{ \beta I_0(2\sqrt{\eta\tau}) + \gamma \sqrt{\eta/\tau} I_1(2\sqrt{\eta\tau}) \right\}, \quad (6.94)$$

$$c'(\Theta) H_0(t, \Theta) \Big|_0^t = c'(t) e^{-\beta t},$$

так как $c'(0) = 0$, $H_0(t, 0) = 1$, $H_0(t, t) = e^{-\beta t}$, $\gamma = \alpha_M + \lambda_p$, $\beta = \frac{\alpha_M n_0}{n}$,
 $\tau = \gamma(t - \Theta)$, $\eta = \beta \Theta$, $J_\nu(y)$ — обыкновенная функция Бесселя.

Стационарное решение ($t \rightarrow \infty$) имеет форму:

$$\bar{c} = e^{-\lambda_p t_0}. \quad (6.95)$$

В заключение несколько слов о пространственно-временных рамках применимости рассмотренных предельных моделей. Очевидно, что протекание деструкции в пористых блоках существенно расширяет диапазон применимости расчетной схемы неограниченной емкости (в сравнении со схемой сосредоточенной емкости), ибо за счет этого процесса снижается степень насыщения веществом пористых блоков. При выполнении ориентировочного критерия

$$\frac{S_b^2 D_M}{\lambda_p n_0} < 0,5 \div 1,0, \quad (6.96)$$

данная расчетная схема имеет практически неограниченное применение, поскольку в пористых блоках формируется стационарное концентрационное распределение, охватывающее лишь приповерхностную их область. Для хорошо сорбируемых радионуклидов (таких, например, как цезий-137 и стронций-90), когда емкость пористой матрицы контролируется эффективным параметром $n_s^0 = n_0 + K_d \rho$, конкурентноспособность модели неограниченной емкости еще более возрастает.

6.2.3.4. Обобщенный аналитический подход к исследованию миграции в гетерогенных системах

На примере слоистых и однородных трещиновато-пористых (гетерогенных) пород становятся достаточно очевидными сложности

одновременного учета многообразных физических и химических взаимодействий, особенно когда речь пойдет о пространственных процессах. Оставляя здесь главные роли за численным моделированием, необходимо, в то же время, попытаться расширить и возможности аналитических методов. Достаточно эффективный подход такого рода к сложным *линейным* системам предложен в работе [40]; он хорош еще и тем, что позволяет исследовать поведение пространственных (правда, упрощенных) процессов на базе анализа одномерных решений.

Удобной мерой неопределенности изучаемого миграционного процесса может служить распределение времен нахождения (РВН) индикатора в пласте на различных траекториях движения. Такой подход особенно эффективен для линейных систем, пренебрегающих локальной дисперсией (внутри отдельных трубок тока стационарного фильтрационного поля) [40], когда пространственные вариации представляются сетью подсистем, каждая из которых имеет свои свойства. Например, для модели среды с застойными зонами

$n_o \frac{\partial c_o}{\partial t} = \lambda_o (c - c_o)$, где λ_o — коэффициент массообмена между проточными и застойными зонами (характерное время массообмена $t_M = n_o / \lambda_o$). Если характерное время конвективного переноса $t_v = Ln/v$, то среднее время миграции $t_{cp} = t_v(1 + \bar{n}_o)$ (где $\bar{n}_o = n_o/n$) — оказывается не зависящим от дисперсии и кинетики обмена; последние два процесса представлены характерными временами:

$$t_\theta = t_v / Pe \text{ и } t_M^k = \frac{\bar{n}_o}{(1 + \bar{n}_o)^2} t_M. \quad (6.97)$$

При $t_\theta \gg t_M^k$ в рассеянии доминирует дисперсия, а при $t_M^k \gg t_\theta$ — кинетика обмена. При этом кривые РВН во втором случае — симметричны, а в первом — резко асимметричны, с сильно растянутой правой частью, так что объединение обоих процессов через общий расчетный коэффициент дисперсии может привести к качественно неверным представлениям. Наконец, для неконсервативных индикаторов

$$t_r = t_v(1 + \bar{M}) \text{ и } t_M^k = \frac{\bar{M}}{(1 + \bar{M})} t_M, \quad (6.98)$$

где $\bar{M}$ — отношение количеств вещества в застойных и подвижных зонах в стационарном состоянии; иначе говоря, характерное время t_r не зависит от дисперсионных и кинетических параметров, а кинетика аддитивна с дисперсией независимо от типа процесса. Далее, на тех же основаниях в работе рассмотрена внешняя и внутренняя диффузия с кинетической сорбцией и показано, что характерные времена всех этих процессов аддитивны. В рамках той же модели с застойными зонами может быть рассмотрена и кинетика первого порядка в растворе (например, радиоактивный распад), но тогда характерное время t_r оказывается зависящим от процесса переноса (дисперсии).

В несколько иных терминах, все эти выводы легко переносятся и на трещиновато-пористые породы, в первую очередь — в рамках предпосылки сосредоточенной емкости.

Вместе с тем, предположение о линейности процесса может в ряде случаев явиться очень важным ограничением на применимость сделанных выводов, особенно когда разные его составляющие имеют различный характерный масштаб проявления.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ К ГЛАВЕ 6

1. Алексеев В.С., Коммунар Г.М., Шержуков Б.С. Массо-перенос в водонасыщенных горных породах. — Итоги науки и техники. Гидрогеология и инженерная геология. — М., 1989, 144 с.
2. Бочеввер Ф.М., Лапшин Н.Н., Орадовская А.Е. Защита подземных вод от загрязнения. — М.: Недра, 1979, 254 с.
3. Веницианов Е.В., Рубинштейн Р.И. Динамика сорбции из жидких сред. — М.: Наука, 1983, 237 с.
4. Гензель Г.Н., Карачевцев Н.Ф., Конасавский П.К., Кравчук С.В., Мироненко В.А., Румынин В.Г. Решение задач охраны подземных вод на численных моделях/ Под общей ред. Мироненко В.А. — М.: Недра, 1992, 240 с.
5. Голубев В.С. Динамика геохимических процессов. — М.: Недра, 1981, 208 с.

6. Крайнов С.Р., Шваров Ю.В., Гричук Д.В. и др. Методы геохимического моделирования и прогнозирования в гидрогеологии. — М.: Недра, 1988, 254 с.
7. Лукнер Л., Шестаков В.М. Моделирование миграции подземных вод. — М.: Недра, 1986.
8. Мироненко В.А., Румынин В.Г. Опытнo-миграционные работы в водоносных пластах. — М.: Недра, 1986.
9. Мироненко В.А., Румынин В.Г., Учаев В.К. Охрана подземных вод в горнодобывающих районах. — Л.: Недра, 1980, 320 с.
10. Николаевский В.Н., Бондарев Э.А., Миркин М.И. Движение углеводородных смесей в пористой среде. — М.: Недра, 1968, 192 с.
11. Рошаль А.А. Полевые методы определения миграционных параметров. — В кн.: Гидрогеология и инженерная геология. Обзор ВИЭМС. — М., 1980, 62 с.
12. Румынин В.Г. О теоретических моделях миграции в гетерогенных средах. — В кн.: Моделирование в гидрогеологии и инженерной геологии. — Новочеркасск, 1983, с.34-46.
13. Тютюнова Ф.И. Гидрогеохимия техногенеза. — М.: Наука, 1987, 335 с.
14. Тютюнова Ф.И. Физико-химические процессы в подземных водах. — М.: Наука, 1976, 127 с.
15. Шержуков Б.С. Геохимическая гидродинамика в промышленной гидротехнике. Автореф. докторской диссертации. — М., 1991, 51 с.
16. Bellin A., Rinaldo A., Bosma W.J.P. et al. Linear equilibrium adsorbing solute transport in physically and chemically heterogeneous porous formations: 1. Analytical solutions. — Water Res. Res., 1993, v.29, №12, p.p.4019-4030.

17. Berlung S. The effect of Langmuir sorption on pump-and-treat remediation of a stratified aquifer. — *Journ. of Contaminant Hydrology*, 1995, v.18, p.p.199-220.
18. Bjerg P.L., Christensen T.H. A field experiment on cation exchange — affected multicomponent solute transport in sandy aquifer. — *Journal of Contaminant Hydrology*, 1993, v.12, №4, p.p.269-290.
19. Bosma W.J.P., Van der Zee E.A.T.M. Dispersion of a continuously injected, nonlinearly adsorbing solute in chemically and physically heterogeneous porous formation. — *Journal of Contaminant Hydrology*, 1995, v.18, №2, p.p.181-198.
20. Burr D.T., Sudicky E.A., Naff R.L. Nonreactive and reactive solute transport in three-dimensional heterogeneous porous media: Mean displacement, plume spreading, and uncertainty. — *Water Res. Res.*, 1994, v.30, №3, p.p.791-815.
21. Christensen T.H. Cadmium soil sorption at low concentrations. VII: Effect of stable solid waste leachate complexes. — *Water, Air and Soil Pollution*, 1989, v.44, №1-2, p.p.43-56.
22. Dagan G., Cvetcovic V.D. Spatial moments of a kinetically sorbing solute plume in heterogeneous aquifers. — *Water Res. Res.*, 1993, v.29, №12., p.p. 2905-2911.
23. De Smedt F., Wierenga P.J. A generalized solution for flow in soils with mobile and immobile water. — *Water Res. Res.*, 1979, v.15, №5, p.p.1137-1141.
24. Domenico P.A. An analytical model for multidimensional transport of a decaying contaminant species. — *Journal of Hydrology*, 1987, v.96, p.p.47-58.
25. Dria J.A., Bryant S.L., Schechter R.S., Lake L.W. Interacting precipitation dissolution waves: the movement of inorganic contaminants in ground water. — *Water Res. Res.*, 1987, v.23, №11, p.p.2076-2090.

26. Fujikawa Y., Fukui M., Drew D.L., Vandergaaf T.T. Analysis of the migration of instantaneously injected cesium in artificial fractures of Lac du Bonnet granite, Manitoba, Canada. — *Journal of Contaminant Hydrology*, 1993, v.14, №3/4, p.p.207-232.
27. Grindrod P. The impact of colloids on the migration and dispersal of radionuclides within fractured rock. — *Journal of Contaminant Hydrology*, 1993, v.13, №1/4, p.p.167-181.
28. Guyonnet D., Come B., Sauty J.-P. Type curves for estimating break-through times of pollutants with first order decay. — *Hydrogeology Journal*, 1995, v.3, №4, p.p.95-102.
29. Ibaraki M., Sudicky E.A. Colloid-facilitated contaminant transport in discretely fractured porous media: 1. Numerical formulation and sensitivity analysis. — *Water Res. Res.*, 1995, v.31, №12, p.p.2945-2960.
30. Ibaraki M., Sudicky E.A. Colloid-facilitated contaminant transport in discretely fractured porous media: 2. Fracture network examples. — *Water Res. Res.*, 1995, v.31, №12, p.p.2961-2969.
31. Jennings A. Critical chemical reaction for multicomponent groundwater contamination models. — *Water Res. Res.*, 1987, v.23, №9, p.p.1775-1784.
32. Jennings A.A., Kirkner D.J., Theis T.L. Multicomponent equilibrium chemistry in groundwater quality models. — *Water Res. Res.*, 1982, v.18, №4, p.p.1084-1096.
33. Kessler J.M., Hunt J.R. Dissolved and colloidal contaminant transport in a partially clogged fracture. — *Water Res. Res.*, 1994, v.30, №4, p.p.1195-1206.
34. Lewis F.M., Voss C.I., Rubin J. Numerical simulation of advective-dispersive multisolute transport with sorption, ion exchange and equilibrium chemistry. — *Water Res. Inv. Report*, №86-4022, Reston, Virginia, 1986, 165 p.
35. Lindstrom F.T., Oberhettinger F. A note on a Laplace transform pair associated with mass transport in porous media

and heat transport problems. — SIAM Journ. of Appl. Math., 1975, v.19, p.p.288-292.

36. Nicould R.M., Schweich D. Solute transport in porous media with solid-liquid mass transfer limitation: Application to ion exchange. — Water Res. Res., 1989, v.25, №6, p.p.1071-1082.

37. Novak C.F. Modeling mineral dissolution and precipitation in dual-porosity fracture-matrix systems. — Journal of Contaminant Hydrology, 1993, v.13, №1/4, p.p.91-115.

38. Rabideau A.J., Miller C.T. Two-dimensional modeling of aquifer remediation influenced by sorption non-equilibrium and hydraulic conductivity heterogeneity. — Water Res. Res., 1994, v.30, №5, p.p.1457-1470.

39. Rhee H.-K., Aris R., Amundson N.R. First-order partial differential equations. — V.1 Prentice-Hall, 1986, 543 p.

40. Sandin M., Schweich D. Modeling the non-equilibrium transport of linearly interacting solutes in porous media: A review. — Water Res. Res., 1991, v.27, №9, p.p.2287-2307.

41. Sanford W., Konikov L. Simulation of calcite dissolution and porosity changes in saltwater mixing zones in coastal aquifer. — Water Res. Res., 1989, v.25, p.p.655-665.

42. Selroos J.-O., Cvetkovic V. Mass flux statistics of kinetically sorbing solute in heterogeneous aquifers: Analytical solution and comparison with simulations. — Water Res. Res., 1994, v.30, №1, p.p.63-69.

43. Smith P.A., Degueldre C. Colloid-facilitated transport of radionuclides through fractured media. — Journal of Contaminant Hydrology, 1993, v.13, №1/4, p.p.143-166.

44. Tang D.H., Frind E.O., Sudicky E.A. Contaminant transport in fractured porous media: Analytical solution for a single fracture. — Water Res. Res., 1981, v.17, №3, p.p.555-564.

45. Torok J., Buckley L.P., Woods B.L. The separation of radionuclide migration by solution and partial transport in soil.

- Journ. of Contaminant Hydrology, 1990, №6, p.p.185-203.
46. Transport and mass-exchange processes in sand and gravel aquifers. Proc. of the International Conference. AECL Research, 1990, 1370 p.
47. Valocchi A.J. Theoretical analysis of deviations from local equilibrium during sorbing solute transport through idealized stratified aquifers. — Journ. of Contaminant Hydrology, 1988, v.2, №3, p.p.191-207.
48. Valocchi A.J. Spatial moment analysis of the transport of kinetically adsorbing solutes through stratified aquifers. — Water Res. Res., 1989, v.25, №2, p.p.273-279.
49. Van der Lee, Ledoux E., de Marsily G. Modeling of colloidal uranium transport in a fractured medium. — Journ. of Hydrology, 1992, v.139, p.p.135-158.
50. Van Genuchten Th. Analytical solution for chemical transport with simultaneous adsorption, zero-order production and first-order decay. — Journal of Contaminant Hydrology, 1981, v.49, p.p.213-233.
51. Vilks P., Dequellere C. Sorption behavior of Sr-85, I-131 and Cs-137 on colloids and suspended particles from the Grimsel Test Site, Switzerland. — Applied Geochemistry, 1991, №6, p.p.553-563.
52. Walter A.L., Frind E.O., Blowes D.W., Placek C.J., Molson J.W. Modeling of the multicomponent reactive transport in groundwater. — Water Res. Res., 1994, v.30, №11, p.p.3137-3158.
53. Willis C., Rubin V. Transport of reacting solutes subject to a moving dissolution boundary: numerical methods and solutions. — Water Res. Res., 1987, v.23, №8, p.p.1561-1574.
54. Yeh G.T., Tripathi V.S. A model for simulating of reactive multispecies component: model development and demonstration. — Water Res. Res., 1991, v.27, №12, p.p.3075-3094.

Численное моделирование процессов загрязнения подземных вод

Изложенные выше теоретические основы массопереноса в подземных водах были разработаны многими исследователями, преимущественно, на базе аналитических методов. Вместе с тем, давно уже стало понятно, что из-за значительной сложности конкретных гидрогеологических условий получить конечные аналитические решения часто не удастся; кроме того, масштабы и ответственность задач предъявляют повышенные требования к точности и достоверности гидрогеологических исследований, связанных с изучением техногенных воздействий на подземные воды. Важно также подчеркнуть, что особая сложность процессов миграции и их медленное развитие во времени во многом затрудняют, а иногда вообще исключают их физическое моделирование или натурное изучение.

Все эти обстоятельства объективно обусловили все более широкое использование в практике гидрогеомиграционных исследований методов численного моделирования на ЭВМ. Возможность широкого применения ЭВМ в настоящее время стимулируется наличием мощных технических вычислительных средств, развитостью математического обеспечения численных расчетов, а также повышением уровня математической подготовки гидрогеологов.

Разработка методов математического моделирования миграционных процессов, как правило, осуществлялась на основе апробированных ранее методов моделирования задач фильтрации и теплопереноса. Это дало хорошую основу для быстрого внедрения математического моделирования в рассматриваемую область исследований. Тем не менее, ряд особенностей, присущих процессам массопереноса, приводит к необходимости разработки методов, максимально учитывающих эти особенности. Важным представляется также обоснование возможности применения математического моделирования для исследования (метод численного эксперимента) сложных процессов, слабо поддающихся физическому моделированию или натурному изучению.

Распространенным заблуждением стало представление о принципиальной завершенности научно-методических основ ЧМ гидрогеологических процессов, что находит косвенное отражение в широком рекламировании и некритичном использовании довольно «разношерстного» программного обеспечения. Между тем подобная эйфория по поводу возможностей ЧМ, часто не оправданная даже применительно к фильтрационным задачам (особенно с учетом отечественной специфики компьютерного хозяйства), вообще не имеет под собой оснований, коль скоро речь заходит о миграционных процессах. Можно, в частности, утверждать, что мы во многом не готовы к решению широкого круга практических задач охраны подземных вод, связанных с исследованием переноса загрязнений в подземных водах; объясняется это как объективными трудностями ЧМ миграционных процессов, так и субъективными слабостями наших разработок в этой области, во

многим уступающих современным зарубежным достижениям (по крайней мере, в том, что касается программных реализаций).

7.1. Общие представления о численных методах решения задач массопереноса и принципах построения численных схем

7.1.1. Краткая характеристика методов конечных разностей и конечных элементов

В настоящее время для численного решения задач массопереноса в подземных водах наиболее широко применяются методы конечных разностей (МКР) и конечных элементов (МКЭ), причем последний используется в модификации Галеркина и считается, по крайней мере теоретически, более универсальным и эффективным. Главные преимущества МКЭ (перед МКР) таковы [19]:

1) элементы легче вписываются в геометрию фильтрационного потока, чем можно снизить влияние поперечной численной дисперсии (см. ниже);

2) метод более приспособлен к концепции тензора дисперсии, особенно в случае несовпадения главных осей последнего с фильтрационной сеткой;

3) легче аппроксимируются границы изучаемой области;

4) лучше интерполируются значения компонент скорости фильтрации, особенно когда фильтрационная часть задачи решается на той же сетке.

Из всех этих достоинств наиболее весомым на практике является последнее: погрешности моделирования массопереноса обычно в максимальной степени определяются качеством построения фильтрационного поля.

Вместе с тем, нельзя забывать и о недостатках МКЭ, таких как малая физическая наглядность, необходимость больших программистских усилий, повышенные требования к памяти ЭВМ. Кроме того, использование МКЭ для построения фильтрационного поля мало совместимо с методом характеристик, который проще сочетается с ортогональной сеткой. В целом, «возможности применения МКЭ для широкого класса задач преувеличены, что, без сомнения, обусловлено энергичной деятельностью исследователей, занимающихся конечными элементами» [1].

Наряду с МКЭ и МКР, для решения гидрогеологических задач применяется также метод граничных интегральных уравнений (ГИУ). Он позволяет, исходя из известного тождества Грина, представить решение в любой внутренней точке области в виде интегралов от граничных значений решения и комбинации его производных, входящих в краевые условия. Для ряда уравнений эллиптического типа тем самым можно заменить интегрирование по области интегрированием по границе и понизить таким образом мерность задачи (в частности, двумерная задача сводится к одномерной), что резко облегчает численное решение. Однако для уравнений с конвективным членом метод ГИУ не несет ощутимых преимуществ, поскольку все равно частично сохраняется необходимость интегрирования по области.

В настоящей работе для решения задач массопереноса широко используется МКР, получивший в практике гидрогеологических расчетов наибольшее распространение, что связано с его относительной простотой и наглядностью. К тому же выигрыш в математической точности аппроксимации исходных дифференциальных уравнений часто оказывается значительно меньше погрешностей схематизации и определения параметров процесса.

При конечно-разностном решении задач массопереноса необходимо:

1) заменить область непрерывного изменения независимых переменных (в пространстве и времени) некоторой дискретной (сеточной) областью;

2) аппроксимировать исходные дифференциальные операторы, а также начальные и граничные условия их разностными аналогами;

3) для получения конечно-разностных (КР) аналогов (схем) установить критерии их устойчивости, сходимости и точности;

4) выбрать метод решения полученной системы алгебраических КР уравнений;

5) разработать алгоритм и программу решения рассматриваемой задачи на ЭВМ;

6) выполнить отладку программы и оценить точность численного решения на тестах.

На всех этапах решения необходим внимательный учет специфических особенностей массопереноса, обусловленных сложностью поля скоростей фильтрации, наличием больших градиентов искомой функции (концентрации) вблизи фронта загрязнения и сочетанием существенно разномасштабных эффектов (например, диффузия и конвективный перенос) и др.

7.1.2. Построение поля напоров

При описании массопереноса в подземных водах основным исходным элементом являются уравнения фильтрации, так что исследование процессов переноса требует привлечения таких разностных схем, которые позволяют строить поле скоростей фильтрации с повышенной точностью. В противном случае при реализации моделей переноса, когда на ошибки решения гидродинамической (фильтрационной) задачи накладывается численная дисперсия, суммарные погрешности резко возрастают, хотя конечный результат может выглядеть физически вполне правдоподобным. При этом особо

следует отметить трудности моделирования длинных тонких ореолов загрязнения, когда очень сильное поперечное «размазывание» ореола получается за счет не только численной дисперсии (поперечной), но и ошибок поля скоростей фильтрации. Традиционные методы его аппроксимации, которые исходят из построения поля напоров, имеют целый ряд недостатков. В частности, при решении матричных уравнений операции умножения и последующего вычитания приводят к большим погрешностям округления в областях с малыми значениями градиента. В этом смысле, более качественные результаты дают формулировки в терминах функции тока: операции вычитания значений напоров проводятся до матричного решения, так что значение погрешностей округления оказывается меньшим.

Поэтому рекомендуется строить поле скорости дважды — и по значениям напоров, и с помощью функций тока — для последующих контрольных сопоставлений. Второй из названных путей обычно дает существенно более предпочтительные результаты и сразу сводится к удобным графическим представлениям. Однако он менее универсален и не столь удобен в программировании, в частности, источники-стоки приходится рассматривать как границы области.

7.1.3. Свойства конечно-разностных аппроксимаций одномерных уравнений переноса

Рассмотрим в качестве модельного одномерный массоперенос химически нейтрального компонента при постоянных параметрах:

$$D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} = n \frac{\partial c}{\partial t}. \quad (7.1)$$

Произведем замену дифференциального уравнения (7.1) его конечно-разностным аналогом. Эту процедуру можно выполнить бесчисленным множеством способов. В частности, на шеститочечном шаблоне можно получить:

$$\begin{aligned} \frac{n}{\tau} (c_i^{j+} - c_i^j) = D \Lambda_c [\sigma c_i^{j+1} - (1 - \sigma) c_i^j] - \\ - \frac{\nu}{h} \{ \sigma [\sigma_1 (c_{i+1}^{j+1} - c_i^{j+1}) + (1 - \sigma_1) (c_i^{j+1} - c_{i-1}^{j+1})] + \\ + (1 - \sigma) [\sigma_1 (c_{i+1}^j - c_i^j) + (1 - \sigma_1) (c_i^j - c_{i-1}^j)] \}, \quad (7.2) \end{aligned}$$

где $\Lambda_c = \frac{1}{h^2} (c_{i-1} - 2c_i + c_{i+1})$ — вторая разностная производная в точке x ; σ, σ_1 — весовые коэффициенты ($0 \leq \sigma_i \leq 1$), $h \equiv \Delta x$, $\tau \equiv \Delta t$.

Из уравнения (7.2) как частные случаи получаются: при $\sigma = 1$ — неявные схемы, при $\sigma = 0$ — явные схемы; при $\sigma = 1$ и $\sigma_1 = 0$ — неявная схема с левой разностью для $\frac{\partial c}{\partial x}$ (конвективного члена); при $\sigma = 1$ и $\sigma_1 = 1$ — неявная схема с правой разностью для $\frac{\partial c}{\partial x}$; при $\sigma = 1$ (или $\sigma = 0$) и $\sigma_1 = 0,5$ — неявная (или явная) схема с центральной разностью для $\frac{\partial c}{\partial x}$.

При решении миграционных задач численными методами принципиальное значение имеет поведение различных КР схем в процессе вычисления, в частности их устойчивость и сходимость [7]. Так, схема (7.2) является устойчивой для любых Δx и Δt при $\sigma \geq 0,5$. Следует отметить, что аналитические подходы к оценке устойчивости КР схем довольно трудоемки, поэтому весьма эффективным методом оценки поведения схем является численный эксперимент. Особенно велика роль численного

эксперимента при изучении вычислительных свойств КР схем, аппроксимирующих дифференциальные уравнения с переменными или разрывными коэффициентами.

С понятием «порядок аппроксимации» тесно связана точность численного решения задачи. Рассмотрим этот вопрос на примере неявной КР схемы с центральной разностью для $\frac{\partial c}{\partial x}$, которая имеет в безразмерной форме вид:

$$\frac{c_{i-1}^{j+1} - 2c_i^{j+1} + c_{i+1}^{j+1}}{\Delta \xi^2} - \frac{c_{i+1}^{j+1} - c_{i-1}^{j+1}}{2\Delta \xi} = \frac{c_i^{j+1} - c_i^j}{\Delta \theta} \quad (7.3)$$

$$\text{где } \Delta \xi = \frac{v \Delta x}{D}; \Delta \theta = \frac{v^2 \Delta t}{n \cdot D}.$$

Из анализа [2] следует, что порядок аппроксимации исходного уравнения массопереноса неявными схемами с центральной и левой разностью для конвективного члена составляет соответственно 0 ($h^2 + \tau$) и 0 ($h + \tau$), т.е. неявная схема с центральной разностью имеет более высокую точность аппроксимации. Однако это обстоятельство не может считаться единственным критерием для выбора эффективных КР схем. В частности, для практических расчетов важно знать точность численного решения в некоторых характерных точках, прежде всего на фронте поршневого вытеснения; здесь справедлива оценка [2]:

$$\Delta_1 = \frac{\Delta \xi^4 \Delta \theta}{24 \sqrt{\pi} (2 \Delta \theta + \Delta \xi^2) \theta \sqrt{\theta}}, \Delta_2 = 0, \quad (7.4)$$

где $\Delta_{1,2}$ — погрешности для КР схем, соответственно с центральной и левой разностью для $\frac{\partial c}{\partial x}$. Следовательно, неявная схема с левой разностью практически точно передает положение фронта поршневого вытеснения, что является ее важным достоинством при численном решении задач массопереноса. Для явных и явно-неявных схем иногда прибегают к компенсации погрешностей конечно-разностных аппроксимаций посредством дополнительной (положительной или

отрицательной) численной дисперсии. Например, оптимальная реализация схемы Кранка-Николсена для моделирования миграции достигается введением искусственной дисперсивности (δ_n):

$$\delta = \frac{|v| \Delta t}{2n} - \delta_n - \frac{D_{\kappa}}{|v|} \text{ — для тех точек области, где необходи-}$$

$$\text{мый критерий } \left(\delta \geq \frac{|v| \Delta t}{2n} - \frac{D_{\kappa}}{|v|} \right) \text{ не выполняется.}$$

Не вдаваясь далее в подробности по поводу достоинств и недостатков КР схем, подчеркнем, что, в конечном счете, выбор оптимальной схемы для конвективного переноса связан прежде всего с компромиссом между подавлением осцилляций решения («выбросов» значений концентрации), с одной стороны, и снижением численной дисперсии (искусственного «размазывания» фронта переноса) — с другой [19].

Для устранения осцилляций можно ориентироваться на условие [19]: $Pe_{\Delta} = \frac{v \Delta x}{D} \approx \frac{\Delta x}{\delta} \leq 2$, хотя нередко приемлемые результаты получаются и при увеличении этого критерия до 10. В первую очередь, последнее замечание справедливо для блоков с малыми градиентами концентрации. Часто, однако, и такая сетка не годится по экономическим соображениям, и тогда выход из ситуации дает так называемое «взвешивание вверх по потоку» (ВВП) [19]. При этом член $\frac{\partial (cv)}{\partial x}$ представляется концентрациями, взвешенными асимметрично по соседним узлам таким образом, что основной вес придается значениям концентрации в узлах, расположенных вверх по потоку. Такая операция тем более эффективна (по

* По крайней мере, если речь идет о консервативных аппроксимациях, соблюдающих условие сохранения массы.

сравнению с симметричным взвешиванием), чем сильнее выражено доминирование конвекции над дисперсией: она учитывает то обстоятельство, что в течение данного расчетного интервала концентрация в расчетном блоке испытывает преобладающее влияние конвективного привноса вещества из смежного блока, расположенного выше по потоку. Если направление координатных осей совпадает с направлениями компонент скорости фильтрации, то ВВП сводится к так называемой «левой» разности:

$$\frac{\partial}{\partial x} (c v) \approx \frac{1}{\Delta x} [(c v)_i - (c v)_{i-1}]. \quad (7.5)$$

В более общем случае ВВП дает:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} (c v) \approx \frac{1}{\Delta x} \{ v_i [\alpha c_i + (1 - \alpha) c_{i+1}] - \\ - v_{i-1} [\beta c_{i-1} + (1 - \beta) c_i] \}, \end{aligned} \quad (7.6)$$

где α и β — весовые коэффициенты, определяемые по знаку скоростей v_i и v_{i-1} в виде

$$\begin{cases} \alpha = \frac{1 + \text{sign}(v_i)}{2} \\ \beta = \frac{1 + \text{sign}(v_{i-1})}{2} \end{cases}$$

ВВП не только устраняет осцилляции, но для многих ситуаций гарантирует и сходимость счета. Кроме того, ВВП существенно подавляет влияние эффекта ориентации сетки, которое в противном случае нередко оказывается очень сильным.

Главным недостатком ВВП является численная дисперсия, приводящая к ряду искусственных эффектов: «размыву» фронта переноса, снижению концентрационных «пиков» и неравномерному (скачкообразному) их изменению, постепенному возрастанию исходной концентрации загрязнителя по полю и др. С численной дисперсией, которая в целом пропорциональна размерам блоков, можно бороться, в частности, изменением параметров сетки вблизи фронта переноса. Вместе с тем, при слишком малых размерах сетки введение ВВП

нерационально и, более того, ухудшает счетную ситуацию. Отметим, что ВВП используется обычно лишь для конвективного члена, а для дисперсионного сохраняется симметричное взвешивание.

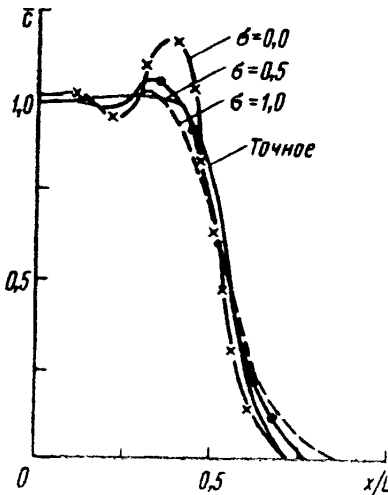


Рис. 7.1 Эффекты числовой осцилляции в зависимости от веса неявной части σ при $\sigma_1 = 0,5$; $Re = 200$; $F_0 = 0,003$; $h = 1$ м; $\tau = 0,25$ сут.

Анализ материала численных экспериментов позволяет сделать следующие выводы [2].

1. Сеточные решения, полученные с помощью КР схем второго порядка аппроксимации по пространственной переменной, характеризуются числовой осцилляцией (рис. 7.1). Иными словами, решение колеблется около максимального значения функции концентрации, причем явные схемы дают большие амплитуды осцилляций по сравнению с неявными.

* В зависимости от того, насколько сдвинут «пик» относительно узловой точки.

2. Неявные схемы с левой разностью для конвективного члена, имеющие первый порядок аппроксимации по пространственной переменной, дают выположенный фронт дисперсии, однако они полностью лишены эффекта осцилляций и практически точно передают положение фронта поршневого вытеснения (рис. 7.2 и 7.3), что делает их конкурентноспособными со схемами, имеющими более высокий порядок аппроксимации. В неоднородных средах, особенно с разрывными коэффициентами, неявные схемы с левой разностью являются более предпочтительными. Причина значительного выполаживания фронта дисперсии заключается в погрешности аппроксимации первой пространственной производной, из-за которой коэффициент гидродисперсии увеличивается на $\nu \Delta x/2$ (численная дисперсия [19]).

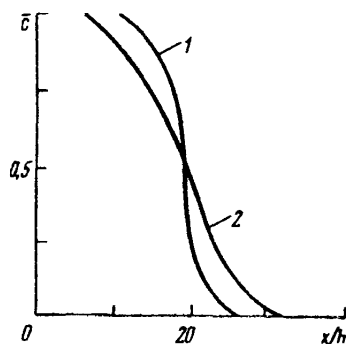


Рис. 7.2. Численное решение (2) по неявной схеме с левой разностью для $\frac{\partial c}{\partial x}$ (1 - точное решение) при $Pe = 200$; $F_0 = 0,0025$; $h = 0,5$ м; $\tau = 0,5$ сут.

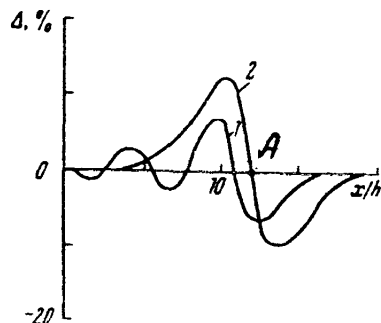


Рис. 7.3. Кривые относительных погрешностей для неявных схем с центральной (1) и левой (2) разностями при $Pe = 200$; $F_0 = 0,003$; $h = 1$ м; $\tau = 0,25$ сут; А - положение фронта $\bar{c} = 0,5$

3. Влияние численных эффектов на поведение КР схемы можно регулировать весовыми коэффициентами, однако улучшение одного показателя схемы (амплитуда осцилляций) сопровождается ухудшением другого (численная дисперсия), и наоборот. С увеличением

параметра дисперсии аппроксимационные погрешности уменьшаются, а с ростом Δx и Δt — увеличиваются.

4. При миграции в неоднородных средах наличие разрывов по скорости переноса $u = v/n$ значительно увеличивает численные погрешности. Обращение в этих случаях к схемам повышенного порядка аппроксимации не только не повышает точность решения на фронте вытеснения, а снижает ее.

Отмеченная зависимость точности решения от пространственных изменений скорости фильтрации чрезвычайно важна, так как при моделировании пространственных задач, в силу дискретности области, скорости фильтрации в соседних узловых точках практически всегда будут отличаться друг от друга. В этих условиях может нарушаться устойчивость или монотонность КР схемы.

5. Скачкообразное изменение коэффициента дисперсии практически не влияет на аппроксимационную погрешность разностной схемы.

Приведенные свойства стандартных КР схем, аппроксимирующих уравнение массопереноса с разрывными коэффициентами, частично объясняются нарушением консервативности схем. С использованием интегроинтерполяционного метода представляется возможным построить консервативные КР схемы, обеспечивающие сохранение баланса вещества на сеточной области. Нетрудно показать, что консервативная КР схема, аппроксимирующая одномерное уравнение массопереноса, имеет вид:

$$\begin{aligned} & \frac{D_{i+1/2} F_{i+1/2}}{x_{i+1} - x_i} (c_{i+1}^{j+1} - c_i^{j+1}) - \frac{D_{i-1/2} F_{i-1/2}}{x_i - x_{i-1}} (c_i^{j+1} - c_{i-1}^{j+1}) - \\ & - V_{i+1/2} F_{i+1/2} c_i^{j+1} - V_{i-1/2} F_{i-1/2} c_{i-1}^{j+1} = \\ & = \frac{n V}{\Delta t} (c_i^{j+1} - c_i^j), \end{aligned} \quad (7.8)$$

где F — площадь поперечного сечения рассматриваемого фильтрационного потока; V — объем расчетного i -го блока.

Легко убедиться, что приведенная консервативная КР схема идентична рассмотренной выше неявной схеме с левой разностью для конвективного члена. Следовательно, схеме (7.8) также присущи эффекты «размазывания» фронта дисперсии (численная диффузия), однако данная схема абсолютно устойчива и не дает осцилляций даже в задачах с разрывными коэффициентами. Консервативная КР схема (7.8) легко модифицируется для пространственных задач.

Численный анализ подтверждает, что удовлетворительная точность решения инженерных задач достигается при пространственной дискретизации области, удовлетворяющей условию

$$Pe_{\Delta} = \frac{v \Delta x}{D} \leq 2 \text{ или } \Delta x \leq 2 \delta_L, \quad (7.9)$$

где δ_L — параметр гидродисперсии.

Это условие фактически диктует необходимый уровень разбивки области переноса по пространству; оно является чрезвычайно жестким: напомним, что в большинстве случаев параметр гидродисперсии не превышает первых метров.

7.1.4. Поперечная численная дисперсия

При решении на математических моделях двумерных и трехмерных уравнений массопереноса необходимо считаться и с поперечной численной дисперсией, особенно — профилейной. Наличие больших градиентов концентрации

* Допустимость его некоторого превышения — в пределах порядка — должна в каждом конкретном случае обосновываться численным экспериментом.

по вертикали исключает применение плановых моделей. С другой стороны, малые значения вертикальной дисперсивности приводят к тому, что на грубых сетках в профильных моделях возникают сильно преувеличенные переходные зоны, приводящие подчас даже к качественным несоответствиям (например, вместо зоны с анаэробными условиями появится аэробная зона). Роль этого фактора при моделировании массопереноса явно недооценивается, хотя появились работы [12, 27], ставящие под сомнение многие из ранее опубликованных результатов, — именно из-за недостаточного внимания к контролю численной поперечной дисперсии. В конечном счете, она приводит к завышению эффектов рассеяния (не только в поперечном, но и в продольном направлении) и искусственному занижению интенсивности конвективного переноса вдоль линий тока, особенно в передовой зоне малых концентраций. Наиболее сильно все эти ошибки сказываются при построении профилей ореолов загрязнения, часто характеризующихся резкими различиями размеров в продольном и поперечном направлениях.

Опыт моделирования показал, что гарантированное подавление поперечной численной дисперсии достигается лишь при условии $\Delta y < 2 \delta_T$, хотя путем дополнительных численных тестов во многих конкретных ситуациях удавалось получать приемлемые результаты и при увеличении поперечных размеров сетки примерно на порядок ($\Delta y < 10 \delta_T$). На более грубой сетке численное решение оказывалось нечувствительным к величине δ_T , так как действительная значимость (истинной) поперечной дисперсии полностью искажалась. При этом, наоборот, очень большое влияние на поперечную численную дисперсию оказывают погрешности аппроксимации функции источника [12].

Важно подчеркнуть, что, в отличие от продольной численной дисперсии, ее поперечный аналог не только

сохраняет, но чаще всего увеличивает свою роль с ростом масштабов и времени переноса. Тому же способствует и дополнительное численное рассеяние конвективного характера, возникающее при несовпадении направления фильтрационного потока с координатными осями («угловая» численная дисперсия, или эффект ориентации сетки).

Отсюда следует необходимость крайне дробной дискретизации области в направлении, ортогональном направлению основного (конвективного) переноса. Допустимость отхода от этого требования в каждом конкретном случае требует дополнительных численных или аналитических обоснований. При этом реально численная поперечная дисперсия может контролироваться лишь при координатной (криволинейной) сетке, совпадающей с направлением потока: в противном случае значений концентрации в четырех соседних узлах недостаточно для вычислений дисперсионного потока, поскольку необходимо еще учитывать диагональные элементы тензора дисперсии. Заметим также, что предпочтение всегда должно отдаваться центровым схемам — вопреки узловым (в которых расчетные точки совпадают с узлами сетки).

7.1.5. Аппроксимация временной производной

При численной реализации миграционных процессов представление временной производной осуществляется аналогично фильтрационным задачам, т.е. для этого используются явные, неявные и явно-неявные схемы.

Для явных схем необходимо выполнение следующих условий устойчивости:

1) Куранта

$$\frac{v_x \Delta t}{n \Delta x} \leq 1, \quad \frac{v_y \Delta t}{n \Delta y} \leq 1, \quad (7.9)$$

или для ВВП

$$\frac{(v_x + v_y) \Delta t}{n \Delta x} \leq 1; \quad (7.10)$$

смысл этого критерия в том, что за время Δt из данного блока не может вытечь больше воды, чем находилось в нем к началу временного интервала;

2) Ноймана

$$\frac{D_x \Delta t}{n \Delta x^2} + \frac{D_y \Delta t}{n \Delta y^2} \leq 0,5 \quad (7.11)$$

— для случая совпадения координатной оси с направлением потока; физический смысл его заключается в том, что направление градиента концентрации не может быть изменено одной лишь дисперсией;

3) для блоков с источниками-стоками интенсивностью Q дополнительный критерий устойчивости имеет вид:

$$n m \Delta x \Delta y > Q \Delta t. \quad (7.12)$$

Смысл его в том, что за время Δt из блока не может быть отобрано больше вещества, чем находилось в нем на начало временного интервала. Невыполнение этого критерия для блоков с источниками часто приводит к плохим результатам — осцилляциям для схем, «хороших» по критерию Pe_{Δ} , и поэтому для сглаживания осцилляций приходится перераспределять расход источника на соседние узлы. Аналогичный критерий записывается для процессов физико-химических взаимодействий или превращений.

Неявные схемы безусловно устойчивы, причем сходимость их тем лучше, чем в меньшей степени проявляется преобладание конвекции над дисперсией. Однако и для неявных схем качество счета существенно зависит от

* В условиях центральных схем этот эффект «разносится» вверх по потоку от источника.

дискретизации — ввиду проявления осцилляций и численной дисперсии (см. выше).

Естественно, возникает вопрос об относительной значимости ограничений на временную и пространственную дискретизацию. Так, в работе [9] сопоставлялась роль критериев Pe_{Δ} и Куранта (K). Оказалось, что на первых этапах процесса критерий Pe_{Δ} играет относительно большую роль в случае МКР, а критерий K — в случае МКЭ. Погрешности постепенно убывают с ростом числа временных шагов, причем доминирующую роль начинает играть объединенный критерий

$$K \cdot Pe_{\Delta} = \frac{v \Delta t}{n \cdot \delta_L}, \quad (7.13)$$

который не зависит от Δx^* . Следовательно, по крайней мере в одномерных задачах налицо тенденция к снижению значимости пространственной дискретизации со временем, когда, наоборот, все большую роль играет выбор временного шага.

7.1.6. Особенности задания граничных условий

Главные трудности возникают при реализации на моделях граничных условий (ГУ) второго и третьего рода (где дисперсионный поток не равен нулю), поскольку градиент концентрации заранее неизвестен. Здесь существует несколько возможностей [19]:

- 1) принять область такой большой, что концентрации на границах не будут зависеть от развития ореола загрязнения, т.е. можно задать граничные условия $c = 0$;
- 2) вообще пренебречь дисперсией потока на границе;

* В работе [9] приведены дополнительные рекомендации для выбора длины временного интервала из этого критерия, причем Δt оказывается функцией от Dt/n , т.е. ширины переходной зоны.

3) принять градиент на границе совпадающим со значением в соседнем (внутреннем) узле.

Конвективный поток через границу изнутри области автоматически учитывается по схеме ВВП, но конвективный поток внутрь области требует задания граничной (входной) концентрации. Важно, что при задании ГУ третьего рода малые ошибки в представлении скорости фильтрации дают больше погрешности по концентрациям, причем они не «выбираются» с ростом числа временных шагов.

7.1.7. Принципы решения матричных уравнений

В заключение остановимся на анализе методов решения матричных уравнений, отвечающих упомянутому выше сеточным аппроксимациям — в рамках не только МКР, но и МКЭ.

Для решения системы матричных уравнений используются прямой метод исключения Гаусса или итеративные процедуры, в частности, типа неявного метода переменных направлений, широко применяемого в фильтрационных расчетах. Этот вариант блочных итерационных методов особенно эффективен при криволинейной координатной сетке (см. ниже), поскольку в противном случае велика роль диагональных составляющих переноса. Чем больше число узлов, тем относительно эффективнее итерационные методы [13] — ввиду все возрастающих требований к оперативной памяти в прямых методах. Например, для МКЭ при числе узлов 100×100 требуется 16 мегабайт только для хранения коэффициентов ленточной матрицы. Кстати, в этом смысле, падает и эффективность МКЭ (в сравнении с МКР), поскольку он требует многочисленных предварительных операций с матрицами для приспособления к оптимальным итерационным процедурам (блочным итерационным методам).

Методы симметризации матриц, эффективные в фильтрационных задачах, оказываются непригодными из-за наличия конвективного члена: в общем случае матрицы эти — не положительно определенные и к ним неприменимы известные ускоряющие процедуры. Поэтому решение может оказаться несходящимся — при матрицах, не имеющих должного диагонального преобладания (необходимого для успешного применения блочных итерационных методов). В частности, в работе [13] показано, что для МКЭ метод сверхрелаксации непригоден, а лучшие результаты дает метод слабой релаксации.

Эффективность итерационных процедур может быть существенно повышена за счет их зонального выполнения [28], что эквивалентно расширению принципа блочных итераций: уравнение решается отдельно для каждой из зон, которые связываются друг с другом через условия Дирихле на их границах. При этом требования к памяти резко сокращаются, как и счетное время.

Развитие принципов расщепления разностного оператора* на уравнения массопереноса (а также, при необходимости, и на граничные условия) приводит к методу главных направлений [12], причем в общем случае он может сочетаться с криволинейной координатной сеткой, учитывающей направление фильтрационного потока. Очевидным преимуществом этого метода является «разомкнутость» системы уравнений по направлениям, чем, в частности, устраняется доминирование — в смысле интенсивности переноса — одного направления над другим, т.е. доминирование одних членов над другими в рамках одной матрицы. Ошибки округления при решении матричных уравнений резко снижаются из-за уменьшения размеров матриц.

Так, при числе узлов $N \times M$ ($N > M$) для процедуры исключения Гаусса общее число необходимых вычислительных операций по методу главных направлений (N_0) и по «нерасщепленному» варианту N соотносятся как [13] $N_0/N = 12/[M(M/K + 2)]$, т.е., как правило, $N_0 \ll N$, хотя с увеличением числа временных шагов K эта разница сокращается. Кроме того, дополнительный выигрыш счетного времени обусловлен меньшими требованиями к точности

* Для аналогии еще раз сошлемся на неявный метод переменных направлений, широко используемый при исследовании геофильтрационных задач [3].

счета (ошибкам округления) и меньшим объемом хранимой информации.

В конечном итоге метод главных направлений, давая значительный выигрыш по времени счета, обеспечивает высокую точность прогноза как для фронта переноса, так и для дисперсионной компоненты (в частности, поперечной дисперсии). Это делает его особенно эффективным для расчета сильно вытянутых, в том числе и трехмерных, ореолов в стационарном фильтрационном потоке при резких контрастах параметров в продольном и поперечном направлениях. Нужно, однако, помнить, что само расщепление разностного оператора вносит те или иные погрешности и нуждается в специальных поверочных тестах.

В целом, эффективность итерационных методов по сравнению с прямыми растет с увеличением числа узлов: считается, что при достаточно больших сетках — порядка первых тысяч узлов для двумерных задач и нескольких сотен для трехмерных — они уже оказываются предпочтительными. При этом среди итерационных методов также существует своя иерархия предпочтений, которая в последнее время ставит на первое место — в решении задач на больших сетках — метод сопряженных градиентов. В отличие от таких широко используемых итерационных методов, как SOR (метод верхней релаксации) или SIP («сильно неявная процедура»), этот метод не требует диагонального преобладания для матриц, мало чувствителен к направленной, регулярно ориентированной неоднородности, не требует эмпирического подбора счетных параметров и является, в конечном итоге, наиболее универсальным, сравнительно мало зависящим от характера конкретной задачи. Именно методом сопряженных градиентов и решаются сейчас, как правило, наиболее трудоемкие задачи — на сетках во многие тысячи — десятки тысяч узлов.

7.1.8. Основы метода характеристик и метода случайных блужданий

Трудности использования МКР и МКЭ, обусловленные необходимостью ограничения численных осцилляций, с одной стороны, и численной дисперсии, с другой, привели к поискам иных возможностей для моделирования массопереноса. Такие возможности многими авторами связываются с методом характеристик (МХ), позволяющим хотя бы частично снять упомянутые трудности аппроксимации конвективной составляющей.

При использовании МХ моделируемая область разбивается на блоки прямоугольной сеткой (неподвижная, опорная сетка), кроме того, в пределах области вводятся подвижные контрольные частицы жидкости (контрольные объемы жидкости), которые переносятся вместе с потоком подземных вод по линиям тока с действительной скоростью фильтрации. Первоначально контрольные точки равномерно распределяются по сетке — по P точек в каждом неподвижном блоке, т.е. с каждой контрольной точкой связывается $1/P$ часть блока. После перемещения всех контрольных точек за время Δt проводят подсчет числа контрольных точек, находящихся в данное время в каждом из неподвижных блоков, и вычисление концентрации в них как среднего значения по всем подвижным точкам в данном блоке. Затем полученные значения концентрации используются как начальные условия для решения диффузионной части уравнения переноса.

Метод характеристик использует расчетные частицы повсеместно — в пределах загрязненной и незагрязненной областей, причем каждой частице отвечает своя концентрация; дисперсия моделируется «передачей» концентрации от загрязненных частиц менее загрязненным на промежуточном временном шаге, требующем сеточных расчетов. Сочетание МХ с

расщеплением разностного оператора позволяет моделировать дисперсионную составляющую конечными разностями, используя для этого более эффективные (при таком расщеплении) центрально-разностные явные схемы. Гораздо менее значимы также погрешности аппроксимации источников-стоков малых размеров.

Основные ограничения на выбор сетки определяются критериями Куранта (7.9) и Ноймана (7.11).

При поступлении вод с иной концентрацией из источника с удельной интенсивностью ε должно выполняться дополнительное условие

$$\Delta t \leq \left(\frac{n m}{\varepsilon} \right)_{\min}. \quad (7.14)$$

К недостаткам МХ нужно отнести связанные с ним трудности программной реализации метода. Кроме того, при небольшом числе счетных «частиц» поле концентрации испытывает дополнительные численные флуктуации — в зависимости от изменчивости «сглаживающего» эффекта усредняющих процедур (по частицам, находящимся в данном расчетном блоке) при переходе от одного блока к другому. Наконец, полезно отметить, что при несовпадении основных направлений тензора дисперсии и фильтрационного поля по-прежнему сохраняется возможность значительных погрешностей в представлении эффектов рассеяния, для устранения которых необходимо специальное координатное преобразование тензора дисперсии [26]. Алгоритм МХ требует существенного усложнения при моделировании многокомпонентных систем, когда в системе участвуют элементы, взаимодействующие с породой с различной интенсивностью.

В целом же, как показали специальные сопоставительные оценки (см. например [14]), МХ оказывается существенно эффективнее МКР и МКЭ для задач с резко

* Для устранения таких скачков рекомендуется [20, 26] распределять концентрацию каждой частицы и на соседние блоки с учетом времени ее пребывания в них.

доминирующей конвекцией, особенно в том, что касается определения малых относительных концентраций (разд. 8.3.1). Улучшение МХ возможно путем учета непостоянства скорости в пределах каждого блока [14].

Еще одной модификацией характеристических решений уравнений переноса является метод случайных блужданий (МСБ), который, как и МХ, использует «меченые» частицы, однако дисперсия здесь моделируется иначе, чем в МХ [19].

В МСБ участвуют только загрязненные частицы. Каждой из них придается одна и та же фиксированная масса загрязнителя (сумма их равна общей массе загрязнителя). Дисперсия моделируется сочетанием конвективного движения частиц со случайным процессом, отвечающим по своим статистическим свойствам дисперсионному переносу. Концентрация определяется «наложением» сетки и подсчетом числа частиц в каждом блоке.

Качество расчета решающим образом зависит от числа частиц и размеров сетки: сильное усреднение по расчетным блокам модели — при малом шаге частиц — дает большие погрешности. В то же время, постоянное поступление загрязнителя в пласт требует введения все новых частиц.

В этом методе нет численной дисперсии в традиционном смысле, но на краях ореола загрязнения результаты могут оказаться неудовлетворительными, поэтому рекомендуется доверять концентрациям лишь по блокам, содержащим не менее 20 частиц, и тогда расчет можно вести по достаточно грубой сетке. По-прежнему необходимо выполнение критерия Куранта — во избежание осцилляций. Метод может приводить к нереальным накоплениям частиц в застойных зонах.

Важный дополнительный недостаток МСБ в том, что (для параметров с низкой чувствительностью) физические вариации концентрации, обусловленные изменчивостью параметров, могут сильно искажаться стохастической вариацией концентрации.

7.1.9. Обобщающие выводы

Итак, основные специфические черты численного моделирования загрязнения подземных вод связаны с нали-

чем конвективной составляющей переноса. При исследовании теплового загрязнения она соизмерима с дисперсионной (кондуктивной) составляющей, и в силу этого все упомянутые выше методы оказываются вполне приемлемыми для практических расчетов. Однако в большинстве интересующих нас задач массопереноса роль конвекции оказывается доминирующей, что приводит к необходимости моделирования резко асимметричных ореолов загрязнения с сильно различающимися параметрами процесса по взаимно ортогональным направлениям и с относительно узкими «крутыми» фронтами загрязнения по направлению доминирующего переноса при непостоянстве его пространственной ориентации. Эти особенности процесса требуют очень внимательного подхода к выбору эффективного (не будем говорить — оптимального) метода моделирования в каждой конкретной ситуации и делают практически непригодными многие подходы, вполне хорошо зарекомендовавшие себя при моделировании геофильтрации.

Попутно следует отметить исключительную важность исходных геофильтрационных построений, требующих повышенной точности представления поля скорости фильтрации (желательно — на той же сетке, что и последующая задача массопереноса). В этом плане следует считать малооправданными алгоритмы и программы, не предусматривающие счетного и логического разъединения геофильтрационного и геомиграционного этапов моделирования: такое разъединение всегда необходимо для внимательной инспекции качества результатов геофильтрационного этапа и их улучшения. Последнее может достигаться как сопоставлением результатов решения задачи разными методами (например, построение поля скоростей по полю напоров, по значениям функции тока или непосредственно по уравнениям, представляющим скорость фильтрации в качестве искомой функции), так и введением дополнитель-

ной информации, полученной опытными работами и наблюдениями (в частности, решением обратных задач). Впрочем, использование для расчетов поля скоростей напоров, полученных по данным наблюдений, часто дает результаты низкого качества — в отличие от прямых определений поля скоростей.

Трудности надежного построения фильтрационного поля, отмеченные выше особенности переноса загрязнений, не позволяющие во многих случаях достигнуть высокой точности моделирования на практически приемлемых «грубых» сетках, а также сравнительно низкое качество исходной информации, используемой в прогнозных построениях, требуют оценки целесообразных границ его использования и оптимального сочетания с аналитическими методами — с учетом широких возможностей геомиграционной схематизации [5].

В этой связи можно утверждать, что широкий круг прогнозных и обратных задач может быть эффективно решен вообще без привлечения моделирования процессов массопереноса. Сюда входит, в частности, большинство линейных задач для однородной или упорядоченно-неоднородной среды, не требующих учета поперечной дисперсии, плотностной конвекции и кинетики межфазовых взаимодействий.

Здесь обычно оказывается достаточным сочетание аналитических методов с криволинейной фильтрационной сеткой. В работе [14] для примера дано сопоставление разных методов решения такого рода задач и показано, что аналитические методы давали прогнозные результаты в пределах погрешности численных моделей (МХ и МКЭ), которые, в свою очередь, перекрывались возможными погрешностями исходных данных; в калибровочных

* При большом числе наблюдательных точек полезны интерполяционные процедуры повышенной точности типа крайкинга.

процедурах аналитические методы, как минимум, не уступали численным.

За рамками упомянутых задач численное моделирование часто не имеет альтернативы, однако и здесь его эффективность может возрасти при «подключении» аналитических методов на отдельных этапах моделирования или при использовании численно-аналитических методов. Последние особенно полезны при моделировании переноса в гетерогенных средах [16].

Особое место занимает использование интегральных преобразований, прежде всего преобразования Лапласа, для исследования одномерного массопереноса: уравнение решается аналитическим методом в пространстве изображений, а затем совершается численный переход к оригиналу, для чего применяются апробованные алгоритмы (наиболее известный из них — алгоритм Стефеста).

Возвращаясь к рассмотренным выше сеточным методам (оставляя в стороне метод граничных интегральных уравнений МГИУ и метод случайных блужданий МСБ как представляющие ограниченный интерес для задач переноса), мы не будем делать резких различий в общей оценке МКР и МКЭ. Ясно, что для их эффективного применения в практически наиболее важных двумерных задачах с упомянутыми (в начале этого раздела) особенностями можно ориентироваться лишь на схемы, ограничивающие или устраняющие осцилляции, и вместе с тем не дающие сильной численной дисперсии (не только, и даже не столько продольной, сколько поперечной). Вытекающие отсюда критерии обычно не могут строго выполняться при решении двумерных или, тем более, трехмерных задач на практически приемлемых грубых сетках (даже с учетом допустимости частичного нарушения этих критериев, о которой говорилось выше), так что исследование сколько-нибудь сложных миграционных процессов на базе МКР или МКЭ обычно предполагает внимательную адаптацию расчетной схемы,

включая расчетную сетку, к условиям поставленной конкретной задачи. Помимо обязательной предварительной проверки схемы на численных тестах, такая адаптация может развиваться по следующим направлениям:

1) использование тех или иных модификаций метода главных направлений, сочетающего принцип расщепления разностного оператора с криволинейной координатной сеткой;

2) использование подвижных сеток, «сгущающихся» вблизи фронта переноса, или локальных аппроксимаций более высокого порядка для функции концентрации;

3) поэтапное укрупнение сетки (включая временной шаг) или зональная дискретизация, при которой решения ищутся отдельно для каждой зоны и связываются в рамках итерационного процесса (эквивалентно сходящемуся блочному итерационному процессу).

Каждый из этих путей, при всех достоинствах, сопряжен с серьезным усложнением численной схемы и/или потерей однородности (универсальности), что не позволяет отказываться от поисков альтернатив для МКР и МКЭ. Наиболее жизнеспособная из таких альтернатив — метод характеристик в сочетании с принципом расщепления разностного оператора.

Во всех вариантах необходима внимательная инспекция результатов моделирования, в частности, — проверка баланса по скоростям фильтрации и по концентрациям.

В последующем мы убедимся, что изложенные здесь общие соображения потребуют еще существенной детализации и дальнейшего развития по мере усложнения решаемых задач. В частности, мы пока вообще не касались особенностей учета в численной модели таких важнейших аспектов миграционного процесса, как роль гетерогенности среды, физико-химические взаимодействия, плотностная конвекция и др.

7.2. Принципы построения численных алгоритмов для решения задач миграции подземных вод*

7.2.1. Расщепление дифференциальных операторов в уравнениях переноса

Идея метода расщепления основана на фундаментальном свойстве разностных схем — суммарной аппроксимации. В этом смысле говорят об аддитивных схемах [4], имеющих следующие основные свойства:

1) переход от временного слоя j на слой $j+1$ осуществляется в несколько этапов при помощи последовательности обычных КР схем;

2) погрешность аппроксимации аддитивной схемы определяется как сумма невязок всех промежуточных схем.

Важно подчеркнуть, что каждая из промежуточных схем не аппроксимирует задачу в целом. Аппроксимация достигается за счет совместного решения всех промежуточных КР схем. Если рассмотреть дифференциальную задачу для функции u вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} = A u, \quad (7.15)$$

где A — некоторый оператор по пространственным переменным (например, лапласиан), причем

$$A u = \sum_{i=1}^n A_i u, \quad (7.16)$$

тогда выражение (7.15) может быть аппроксимировано в виде системы простейших уравнений

* Раздел написан Г.Н.Гензелем и Н.Ф.Карачевцевым [2].

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = A_i u_i, \quad t_j \leq t \leq t_{j+1}, \quad (7.17)$$

где $u_i(x, y, t_j) = u_{i-1}(x, y, t_j)$; $u(x, y, t_{j+1}) = u_n(x, y, t_{j+1})$,
 $i = 1, 2, \dots, n$.

Таким образом, вместо сложной задачи (7.15) приходим к системе более простых задач вида (7.17).

Метод суммарной аппроксимации в настоящее время широко используется при решении задач математической физики. В частности, распространенные при решении задач теплопроводности и фильтрации экономичные разностные схемы, например, локально-одномерная и переменных направлений, построены на принципе суммарной аппроксимации [7]. Идея расщепления используется не только для получения более простых разностных схем, она значительно глубже, так как позволяет разделить во времени действие различных физических факторов, влияющих на рассматриваемый процесс. В этом смысле говорят о расщеплении по физическим факторам (процессам). Данный подход оказался особенно плодотворным при решении сложных задач газовой динамики, гидродинамики, динамики атмосферы [4]. Покажем возможность применения метода расщепления по физическим факторам для решения задач массопереноса в подземных водах.

Рассмотрим двумерное уравнение нестационарного массопереноса, являющееся основой для решения широкого класса миграционных задач:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) - v_x \frac{\partial c}{\partial x} - v_y \frac{\partial c}{\partial y} \pm f = \frac{\partial c}{\partial t}, \quad (7.18)$$

где f — интенсивность отвода (поступления) вещества из пласта за счет перетекания, сорбции, ионного обмена, химических реакций и т.п.

Задача (7.18) описывает два принципиально различных физических процесса — конвективный перенос вещества, с одной стороны, и гидравлическую дисперсию и массообмен в процессе движения

подземных вод в горных породах, с другой, т.е. мы можем на временном интервале Δt ($\Delta t_j \leq t \leq t_{j+1}$) поставить в соответствие уравнению (7.18) задачу [4]:

$$n \frac{\partial c_1}{\partial t} + v_x \frac{\partial c_1}{\partial x} + v_y \frac{\partial c_1}{\partial y} = 0, \quad (7.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial c_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial c_2}{\partial y} \right) \pm f = n \frac{\partial c_2}{\partial t}, \quad (7.20)$$

$$c_1(x, y, t_j) = c(x, y, t_j); c_2(x, y, t_j) = c_1(x, y, t_{j+1}), \\ c(x, y, t_{j+1}) = c_2(x, y, t_{j+1}). \quad (7.21)$$

Доказано [4], что процедура расщепления дифференциального уравнения вида (7.18) на систему дифференциальных уравнений (7.19)-(7.21) имеет порядок аппроксимации $O(\tau^2)$. Можно показать, что при постоянных v и D описанная процедура расщепления уравнения массопереноса по физическим принципам аналогична введению подвижной системы координат $x' = x - vt/n$, $y' = y - vt/n$, $t' = t$, после чего вместо уравнения (7.18) получим:

$$D \frac{\partial^2 c}{\partial x'^2} + D \frac{\partial^2 c}{\partial y'^2} \pm f = n \frac{\partial c}{\partial t'}, \quad (7.22)$$

т.е. для наблюдателя в координатах x, y , являющихся характеристиками уравнения (7.18), процесс массопереноса описывается диффузионным уравнением вида (7.22).

7.2.2. Схема аппроксимации составляющих переноса

Рассмотрим общую систему уравнений, описывающих задачу двумерного нестационарного массопереноса в напорных водоносных пластах при линейной кинетике массообмена:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T_x \frac{\partial H}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_y \frac{\partial H}{\partial y} \right) + \varepsilon = \mu \frac{\partial H}{\partial t} \quad (7.23)$$

$$v_x = -K_x \frac{\partial H}{\partial x}; \quad v_y = -K_y \frac{\partial H}{\partial y} \quad (7.24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) - v_x \frac{\partial c}{\partial x} - v_y \frac{\partial c}{\partial y} \pm f = \\ = n \frac{\partial c}{\partial t} \end{aligned} \quad (7.25)$$

$$f = \frac{\partial N}{\partial t} = \alpha (c - \beta N), \quad (7.26)$$

где ε — интенсивность инфильтрации.

Система уравнений (7.23) - (7.26) должна дополняться соответствующими граничными и начальными условиями для напоров подземных вод H и концентраций растворенных компонентов C .

Для аппроксимации уравнения фильтрации используем схему переменных направлений:

$$\mu \frac{H_{i,k}^{j+1/2} - H_{i,k}^j}{0,5 \Delta t} = \Lambda_1 H_{i,k}^{j+1/2} + \Lambda_2 H_{i,k}^j + \varepsilon^j \quad (7.27)$$

$$\mu \frac{H_{i,k}^{j+1/2} - H_{i,k}^{j+1}}{0,5 \Delta t} = \Lambda_1 H_{i,k}^{j+1/2} + \Lambda_2 H_{i,k}^{j+1} + \varepsilon^j \quad (7.28)$$

где индексами $\Lambda_{1,2}$ обозначены консервативные разностные операторы по направлениям x, y :

$$\begin{aligned} \Lambda_1 H = \\ = \frac{2}{x_{k+1} - x_{k-1}} \left(T_{i,k+1/2} \frac{H_{i,k+1} - H_{i,k}}{x_{k+1} - x_k} - T_{i,k-1/2} \frac{H_{i,k} - H_{i,k-1}}{x_k - x_{k-1}} \right) \end{aligned} \quad (7.29)$$

$$\Lambda_2 H =$$

$$= \frac{2}{y_{i+1} - y_{i-1}} \left(T_{i+1/2,k} \frac{H_{i+1,k} - H_{i,k}}{y_{i+1} - y_i} - T_{i-1/2,k} \frac{H_{i,k} - H_{i-1,k}}{y_i - y_{i-1}} \right) \quad (7.30)$$

Величины $T_{i,k+1/2}$, $T_{i,k-1/2}$, $T_{i+1/2,k}$, $T_{i-1/2,k}$ являются некоторыми эффективными проводимостями пласта, которые определяются в соответствии интегро-интерполяционным методом Самарского из следующих соотношений:

$$T_{i,k+1/2} = \frac{2 T_{i,k} T_{i,k+1}}{T_{i,k} + T_{i,k+1}}, \quad T_{i,k-1/2} = \frac{2 T_{i,k} T_{i,k-1}}{T_{i,k} + T_{i,k-1}} \quad (7.31)$$

$$T_{i+1/2,k} = \frac{2 T_{i,k} T_{i+1,k}}{T_{i,k} + T_{i+1,k}}, \quad T_{i-1/2,k} = \frac{2 T_{i,k} T_{i-1,k}}{T_{i,k} + T_{i-1,k}}.$$

Для расчета скоростей фильтрации уравнения (7.24) заменяются разностными аналогами:

$$(v_x)_{i,k}^{j+1} =$$

$$= -0,5 \left(K_{i,k-1/2} \frac{H_{i,k}^{j+1} - H_{i,k-1}^{j+1}}{x_k - x_{k-1}} + K_{i,k+1/2} \frac{H_{i,k+1}^{j+1} - H_{i,k}^{j+1}}{x_{k+1} - x_k} \right) \quad (7.32)$$

$$(v_y)_{i,k}^{j+1} =$$

$$= -0,5 \left(K_{i-1/2,k} \frac{H_{i,k}^{j+1} - H_{i-1,k}^{j+1}}{y_i - y_{i-1}} + K_{i+1/2,k} \frac{H_{i+1,k}^{j+1} - H_{i,k}^{j+1}}{y_{i+1} - y_i} \right)$$

где $K_{i,k-1/2}$, $K_{i,k+1/2}$, $K_{i-1/2,k}$, $K_{i+1/2,k}$ — эффективные коэффициенты фильтрации пласта, рассчитываемые в соответствии с зависимостями (7.31).

При таком способе вычисления скоростей фильтрации они относятся к центрам расчетных блоков (к узловым точкам сетки). Если

относить скорость фильтрации к границам блоков (межузловые скорости), то формулы для их вычисления имеют вид

$$(v_x)_{i,k}^{j+1} = -K_{i,k+1/2} \frac{H_{i,k+1}^{j+1} - H_{i,k}^{j+1}}{x_{k+1} - x_k}; \quad (7.33)$$

$$(v_y)_{i,k}^{j+1} = -K_{i+1/2,k} \frac{H_{i+1,k}^{j+1} - H_{i,k}^{j+1}}{y_{i+1} - y_i}.$$

Второй способ вычисления скоростей оказывается более точным. Особенно это проявляется при моделировании переноса вещества в неоднородных по фильтрационным свойствам пластах, так как в этом случае более корректно отражается распределение потоков в направлениях координатных осей.

Аппроксимация уравнения массопереноса (7.25) осуществляется по изложенной выше процедуре расщепления [см. зависимости (7.19)-(7.21)].

Гиперболическое уравнение конвективного переноса (7.19) можно решить различными способами. Как было показано в разд. 7.1, стандартные методы конечных разностей здесь малоэффективны, так как приводят к существенному «размазыванию» контура вытеснения из-за наличия эффектов численной диффузии. Поэтому авторы ориентировались на использование метода характеристик. Для уравнения (7.19) характеристикам отвечают выражения

$$\frac{n \, dx}{dt} = v_x, \quad \frac{n \, dy}{dt} = v_y. \quad (7.34)$$

Здесь v_x, v_y являются результатом решения фильтрационной задачи (7.23) и определяются в каждой точке в соответствии с зависимостями (7.32) или (7.33). С использованием характеристик легко найти новые координаты точек

P после переноса их со скоростями фильтрации v_x, v_y за интервал времени $\Delta t_k = t_{j+1} - t_j$ методом Эйлера:

$$x_{p,j+1} = x_{p,j} + \sum_{i=1}^M \theta_i \frac{v_{x,p}}{n}, \quad (7.35)$$

$$y_{p,j+1} = y_{p,j} + \sum_{i=1}^M \theta_i \frac{v_{y,p}}{n},$$

$$\sum_{i=1}^M \theta_i = \Delta t_k, \quad (7.36)$$

где Δt_k — шаг конвективного переноса; θ_i — интервал времени суммирования, выбираемый из условия

$$\frac{\theta_i}{n} v_x(y) = \alpha \Delta x (\Delta y), \quad (7.37)$$

где α — нормирующий множитель, показывающий, какую часть блока точка P будет перемещаться с некоторыми постоянными скоростями фильтрации v_x, v_y , определяемыми полем скоростей и положением точки P после $(i-1)$ -го перемещения в соответствии с (7.36) и (7.37).

Новые координаты точки P могут быть найдены методом Рунге-Кутты. Однако в этом случае скорость необходимо вычислять дополнительно в трех промежуточных точках, что ведет к значительному увеличению затрат машинного времени.

При переносе точек P в двумерном поле скоростей фильтрации расчетные скорости $v_{x,p}$ и $v_{y,p}$ скачкообразно изменяются на концах временных интервалов θ_i и определяются (рис. 7.4) в соответствии с билинейной интерполяционной процедурой:

$$v_z = v_{z1} (1 - \alpha_x) (1 - \alpha_y) + v_{z2} \alpha_x (1 - \alpha_y) + v_{z3} \alpha_x \alpha_y +$$

$$+ v_{z4} (1 - \alpha_x) \alpha_y, \quad (7.38)$$

$$\alpha_x = \frac{\delta_x}{\Delta x}, \quad \alpha_y = \frac{\delta_y}{\Delta y}, \quad z \equiv x, y, \quad (7.39)$$

где индексы 1, 2, 3, 4 отвечают четырем значениям узловых (или межузловых) скоростей, вычисленных по формулам (7.32) [или по формулам (7.33)] в окрестности точки P .

После переноса всех частиц области за время Δt_k в каждом блоке производится расчет концентрации c_1 , как средней из всех значений в точках, попавших в рассматриваемый блок:

$$c_{1i,k}^{j+1} = \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N c_{1p}^{j+1}. \quad (7.40)$$

Важно подчеркнуть, что точность решения задачи конвективного переноса существенно зависит от числа точек P , ассоциированных с каждым расчетным блоком. При увеличении P возрастает точность решения из-за лучшего усреднения, однако пропорционально увеличиваются требуемый объем памяти и затраты машинного времени. В работе [20] показано, что для широкого круга задач хорошие результаты дает $P = 4$.

Полученное на шаге конвективного переноса распределение концентраций $c_1(x, y, t + \Delta t_k)$, в соответствии с основной идеей метода расщепле-

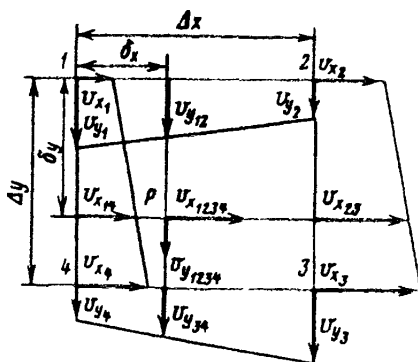


Рис. 7.4. Вычисление скоростей в точке P билинейной интерполяцией

ния, является начальным условием при решении диффузионной задачи (7.20).

Уравнение (7.20) может быть решено по явной схеме. Условия устойчивости здесь обычно менее жесткие, чем при решении фильтрационной задачи.

Для учета процессов массообмена в системе «подземные воды — горные породы» функция источника (7.26) может быть представлена следующим образом:

$$f_{i,k}^j = \alpha_{i,k} (c_{2i,k}^{j+1/2} - \beta_{i,k} N_{i,k}^j). \quad (7.41)$$

В уравнение (7.41) входит значение концентрации поглощенного вещества N , для расчета которого используется конечно-разностное уравнение

$$\frac{N^{j+1} - N^j}{\Delta t} = \alpha [c^{j+1} - 0,5 \beta (n^{j+1} - N^j)], \quad (7.42)$$

из которого следует рекуррентное соотношение

$$N_{i,k}^{j+1} = \frac{\alpha \Delta t c_{i,k}^{j+1} + N_{i,k}^j (1 - 0,5 \alpha \Delta t \beta)}{1 + 0,5 \alpha \Delta t \beta}, \quad N_{i,k}^0 = N_0. \quad (7.43)$$

Таким образом, схема переменных направлений применительно к диффузионной задаче имеет вид

$$n \frac{c_{2i,k}^{j+1/2} - c_{2i,k}^j}{0,5 \Delta t} = \Lambda_1 c_{2i,k}^{j+1/2} + \Lambda_2 c_{2i,k}^j \pm \alpha_{i,k} (c_{2i,k}^{j+1/2} - \beta_{i,k} N_{i,k}^j), \quad (7.44)$$

$$n \frac{c_{2i,k}^{j+1} - c_{2i,k}^{j+1/2}}{0,5 \Delta t} = \Lambda_1 c_{2i,k}^{j+1/2} + \Lambda_2 c_{2i,k}^{j+1} \pm \alpha_{i,k} (c_{2i,k}^{j+1/2} - \beta_{i,k} N_{i,k}^j). \quad (7.45)$$

В соответствии с изложенной методикой расщепления численное решение задачи массопереноса на каждом временном шаге осуществляется в четыре этапа.

На первом этапе производится решение задачи фильтрации по чисто неявной схеме или методом прогонки [7]. В результате получают значения напоров и расходов подземных вод.

На втором этапе в каждой точке сеточной области в соответствии с зависимостями (7.32) или (7.33) и результатами решения фильтрационной задачи вычисляют скорости фильтрации v_x , v_y на необходимые моменты времени, соответствующие шагам конвективного переноса Δt_k .

На третьем этапе решается задача конвективного переноса компонента в подземных водах со скоростями фильтрации v_x , v_y . Для этого используют зависимости (7.35) и (7.36). В результате переноса и усреднения в блоках получается новое поле концентрации на момент времени $t + \Delta t_k$.

На четвертом этапе осуществляется численное решение задачи дисперсии и массообмена (7.20), начальными условиями для которой служат значения концентрации c_1 , вычисленные на предыдущем этапе. Полученные здесь значения концентраций c_2 являются, в соответствии с принципом расщепления, окончательным решением задачи на момент времени $t + \Delta t_k$.

Решение фильтрационной, конвективной и дисперсионной частей единой задачи массопереноса осуществляется на одной пространственной сетке. Однако временная дискретизация процессов существенно различна и определяется требованиями к точности решения задачи и затратами машинного времени. Вопрос о выборе расчетного шага по времени для фильтрационной задачи Δt_f рассмотрен в работах [3, 7]. Здесь отметим, что при разрывном характере начальных условий $H(x, y, 0)$, шаг Δt_f вначале следует выбирать мелким (например, из условия устойчивости явной схемы) с последующим его постепенным увеличением до значений, определяемых по зависимости

$$\Delta t_{\phi} \leq \frac{0,2 R^2}{a^*}, \quad (7.46)$$

где R — минимальный размер области фильтрации; a^* — коэффициент пьезопроводности (уровнепроводности). Величину шага конвективного переноса Δt_k следует выбирать согласно разд. 7.1.5. При этом величины Δt_{ϕ} и Δt_k должны быть согласованными (кратными). При решении дисперсионного уравнения, аналогично уравнению фильтрации, шаг Δt_{ϕ} должен отвечать условию (7.46), где вместо a^* принимается D/n . Однако это условие обычно дает значение $\Delta t_d > \Delta t_k$, что не отвечает принципу построения схемы расщепления. Опыт показывает, что хорошие результаты дает $\Delta t_{\phi} = (0,1 \div 0,2) \Delta t_k$.

Важнейшим вопросом при разработке алгоритма решения задач массопереноса в подземных водах является методика задания граничных условий для напоров, расходов и концентраций. Реализация на численной модели граничных условий не должна нарушать монотонность и однородность разностной схемы, снижать ее точность. К настоящему времени накоплен большой опыт по моделированию граничных условий как на аналоговых, так и на численных моделях. Для задания внутренних источников (стоков), не совпадающих с узловыми точками поля-сетки, широко распространен метод снесения источника в ближайший узел. Этот простой метод применяется в большинстве действующих программ, так как дает необходимую точность решения [3]. Для описания сложной геометрии области применяется задание границы в явном виде — координатами граничных точек. Однако при таком подходе нарушается одно из свойств КР схемы — ее однородность и возникает необходимость хранения большого объема дополнительной информации. В последнее время для численного решения уравнений математической физики предложен метод фиктивных областей [3]. В соответствии с этим методом, моделируемая

область вписывается в прямоугольник. В блоках, выходящих за контуры расчетной области, задаются фиктивные значения параметров, в нашем случае водопроводимости, параметра дисперсии, водоотдачи и активной пористости. При задании геометрии области фиктивные параметры должны выбираться так, чтобы практически отсутствовало их влияние на расчетную область.

Граничные условия для фильтрационной задачи в общем случае можно представить как некоторый расход воды $Q_{i,k}$, притекающий (оттекающий) к узловой точке (i,k) . Согласно методу фильтрационных сопротивлений, этот расход определяется из уравнения

$$Q_{i,k} = (H_z - H_{i,k}) / \Phi_{i,k}, \quad (7.47)$$

где H_z — напор на границе, связанной с узловой точкой (i,k) ; $H_{i,k}$ — напор в этой точке; $\Phi_{i,k}$ — дополнительное фильтрационное сопротивление, характеризующее степень взаимосвязи внешнего граничного блока с узловой точкой области. Величина $\Phi_{i,k}$ может изменяться в широких пределах — от нуля (прямая гидравлическая связь) до достаточно больших значений в зависимости от конкретных гидрогеологических условий (гидродинамическое несовершенство, кольматация, наличие экранов и т.п.), а также масштаба моделирования (несоответствие размера блока и источника).

Из зависимости (7.47) могут быть получены три основных типа граничных условий. При $0 < \Phi_{i,k} < \infty$ (величина дополнительного фильтрационного сопротивления конечна, но не равна 0), будет выполняться граничное условие III рода. При $\Phi_{i,k} \rightarrow 0$ (прямая гидравлическая связь), в силу ограниченности $Q_{i,k}$, будет выполняться граничное условие I рода: $H_z = H_{i,k}$. Если $\Phi_{i,k} \rightarrow \infty$, но остается конечной, то, положив в (7.47) $H_z = Q_{i,k} \Phi_{i,k}$, получим в узловой точке расход $Q_{i,k}$ (граничное условие II рода) с погрешностью $\Delta Q = H_{i,k} / \Phi_{i,k}$ (для достаточно больших $\Phi_{i,k}$, например 10^{10} сут/м², ΔQ будет

пренебрежительно малым). Таким образом, использование уравнения (7.47) позволяет построить единообразную методику задания фильтрационных граничных условий I, II и III рода.

При моделировании массопереноса в подземных водах методика задания граничных условий имеет свои специфические особенности. На контурах питания подземных вод обычно выполняется граничное условие I рода (известна концентрация прослеживаемого компонента). Задание граничных значений концентрации при известных фильтрационных расходах равносильно заданию расхода вещества Q_c .

На контурах дренирования концентрация вещества должна определяться по закону смешения с учетом дисперсионного переноса:

$$c = \frac{\sum_{i=1}^N Q_i c_i - F D (\partial c / \partial n)}{\sum_{i=1}^N Q_i}, \quad (7.48)$$

где F — площадь поперечного сечения потока; n — нормаль к площадке.

7.3. Специфика численных моделей и схем при анализе различных механизмов миграции

7.3.1. Алгоритмы численного моделирования миграции с учетом физико-химических взаимодействий

Большинство имеющихся разработок посвящено моделированию какого-то одного механизма взаимодействия, причем считается, что компоненты мигрируют неза-

висимо друг о. друга. Несколько усложняет однокомпонентную модель кинетика физико-химических взаимодействий, причем в некоторых опубликованных работах отмечалась тенденция к росту погрешностей моделирования во времени, если не предусматривалось своевременное «отключение» блока программы, моделирующего кинетику [17].

При моделировании миграции многокомпонентных систем часто приходится отходить от ряда традиционных упрощений, свойственных однокомпонентным моделям, причем сама математическая формулировка задачи существенно зависит от характера физико-химических взаимодействий.

7.3.1.1. Общие принципы моделирования миграции многокомпонентных растворов

Достаточно универсальным способом математического описания миграции многокомпонентных растворов является рассмотрение системы уравнений, которая складывается из дифференциальных уравнений конвективно-дисперсионного типа (1.20), записанных для каждого j -го компонента:

$$n \frac{\partial c_j}{\partial t} = L(c_j) + Q_{c,j}, \quad (7.49)$$

где член типа источника-стока $Q_{c,j}$ учитывает изменение массы за счет включаемых в рассмотрение физико-химических процессов, в частности,

$$Q_{c,j} = R_j^{aq} + R_j^s + R_j^p,$$

* Изложение дается по работам [18, 29].

где R_j^{aq} — скорость накопления j -го компонента в результате реакций в жидкой фазе (главным образом, комплексообразование ионов), R_j^s — то же для сорбции, R_j^p — то же для растворения-осаждения. Каждый комплекс i ($i = 1, \dots, N_x$) с концентрацией x_i может быть представлен как сумма компонентов j ($j = 1, \dots, N_c$) — независимых химических элементарных составляющих («базовых» составляющих). Общая масса каждого компонента должна быть инвариантной к рассматриваемым реакциям. Например, CaCO_3 может рассматриваться как продукт двух компонентов (Ca^{2+} и CO_3^{2-}), причем компонент CO_3^{2-} не диссоциирует на молекулы С и О. Именно принцип инвариантности (наряду с сохранением массы) позволяет разделить величину Q_c на упомянутые три составляющие. Ряд программ учитывает также распад радиоактивных субстанций на дочерние продукты и биохимические процессы.

Опираясь на теоретические представления, развитые в гл. 5 и 6, рассмотрим последовательность включения в модель некоторых базовых химических реакций; начнем с комплексообразования. Так как общее число компонентов равно N_c , концентрации x_i выражаются как

$$x_i \rightleftharpoons \sum_{j=1}^{N_c} a_{ij}^x c_j, \quad i = 1, \dots, N_x \quad (7.50)$$

где $a_{i,j}^x$ — стехиометрический коэффициент комплекса i для компонента j , имеющего концентрацию c_j . Следовательно, условие химического равновесия для i -го комплекса, согласно закону действующих масс, таково:

$$x_i = K_i \prod_{j=1}^{N_c} c_j^{a_{ij}^x} \quad i = 1, \dots, N_x. \quad (7.51)$$

С позиций скорости реакции (коль скоро в комплексе i содержится a_{ij}^x молей компонента j),

$$a_{ij}^x R_{x_i} = -r_{ij}^{aq}, \quad (7.52)$$

где R_{x_i} — скорость образования комплекса i , r_{ij}^{aq} — то же для компонента j при реакции i в растворе. Для определения скорости накопления компонента j в результате комплексации, скорости r_{ij}^{aq} надо просуммировать по всем комплексам:

$$R_j^{aq} = \sum_{i=1}^{N_x} r_{ij}^{aq} = - \sum_{i=1}^{N_x} a_{ij}^x R_{x_i} = \frac{\partial}{\partial t} \left[\sum_{i=1}^{N_x} a_{ij}^x x_i \right], \quad j = 1, \dots, N_c \quad (7.53)$$

Таким образом, выражение для общей (водной) концентрации —

$$c_j = \sum_{i=1}^{N_x} a_{ij}^x x_i. \quad (7.54)$$

В предположении, что комплексы переносятся аналогично компонентам, согласно уравнению (7.49), имеем:

$$\nabla(V x_i) - \nabla(D \cdot \nabla x_i) = n \frac{\partial x_i}{\partial t} + R_{x_i}, \quad i = 1, \dots, N_x \quad (7.55)$$

(тензор дисперсии D здесь принят идентичным для всех компонентов и комплексов).

Сорбция обычно включается в уравнение через член:

$$\frac{\rho_r}{n} \frac{\partial S_j}{\partial t} = - \frac{\rho_r}{n} \frac{\partial S_j}{\partial c_j} \frac{\partial c_j}{\partial t}, \quad (j = 1, \dots, N_c), \quad (7.56)$$

где плотность породы $\rho_r = (1 - n)\rho_s$, ρ_s — плотность минерального материала, S_j — массовая концентрация химической субстанции, адсорбированной на единицу массы твердой фазы. Выражение $\frac{\partial S_j}{\partial c_j}$

отвечает разделению компонента между раствором и твердой фазой; оно обычно дается в изотермическом представлении. Для быстрых («мгновенных») обратимых реакций с линейной изотермой

$$\frac{\partial S_j}{\partial c_j} = K_{d_j}, \quad (7.57)$$

где K_{d_j} — коэффициент распределения для j -го компонента. В этом варианте член R_j^s в уравнении переноса учитывается как фактор замедления скорости, равный $1 + K_{d_j} \rho_r / n$.

Тем самым, однако, делается много молчаливых предположений: влияние pH , окислительно-восстановительных процессов, ионной силы, комплексообразования, избирательной сорбции, температуры и механизмов сорбции считается либо неизменным, либо пренебрежимым. Как итог этих допущений, значения K_d оказываются непостоянными, ибо геохимические условия в данной точке меняются в процессе переноса. В этой связи возможны три альтернативы, использующие

- 1) уравнения нелинейных изотерм,
- 2) модели действующих масс и
- 3) модели поверхностного комплексообразования (двойного или тройного электрического слоя).

Первый подход принимает во внимание, как минимум, три независимые переменные, но он непригоден для образований, имеющих различные окислительные состояния или различные степени закомплексованности, а также для твердой фазы с гетерогенными сорбирующими поверхностями; не все просто и с учетом элементарного ионного обмена. Второй подход, наоборот, принимает во внимание два последних фактора; он наиболее часто используется в численных программах, в частности, потому, что он ориентирован на использование имеющихся термодинамических баз данных; однако он не приспособлен для моделирования зависимости сорбции от pH , различных окислительных состояний и специфики избирательности сорбции (что имеет значение, например, при миграции актиноидов). Наоборот, третий подход является наиболее общим и позволяет учитывать упомянутые факторы, требуя для этого, конечно, увеличения

базы данных; одна из наиболее известных программ такого рода — CHEMTRN.

Наиболее разработаны две главные теории сорбции, связывающие ее с ионным обменом или поверхностным комплексобразованием — см. разд. 5.2.1.2 и 5.2.1.3.

Независимо от модели сорбции, накопление сорбируемого компонента j и его комплексов может быть найдено из условия сохранения массы и стехиометрии сорбционного процесса, связывающей его с концентрацией компонента j в растворе. Пусть

$$S_{x_i} \rightleftharpoons \sum_{j=1}^{N_s} a_{ij}^s S_j, \quad (i = 1, \dots, N_s), \quad (7.58)$$

где a_{ij}^s — стехиометрический коэффициент сорбируемого компонента j в сорбируемом комплексе S_{x_i} , N_s — число сорбируемых комплексов для компонента j ; если он не сорбируется в виде отдельных ионов или комплексов, то $S_j = 0$. Теперь, аналогично комплексам в растворе, при

$$S_j = \sum_{i=1}^{N_s} a_{ij}^s S_{x_i}, \quad (7.59)$$

получаем:

$$R_j^s = -\frac{\partial S_j}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left[\sum_{i=1}^{N_s} a_{ij}^s S_{x_i} \right] \quad (j = 1, \dots, N_c) \quad (7.60)$$

— для аккумуляции сорбируемого компонента j и его комплексов.

Реакции *осаждения и растворения* основаны на пределах растворения, представляющих собой в математическом плане некоторые неравенства и определяющих наличие «скачков» концентрации в ее пространственном распределении; это требует и иных математических формулировок соответствующих задач. Так, для комплекса P_{x_i} в осадке

$$P_{x_i} \rightleftharpoons \sum_{j=1}^{N_c} a_{ij}^p P_j, \quad (i = 1, \dots, N_p), \quad (7.62)$$

где a_{ij}^p — стехиометрический коэффициент для общей концентрации осаждения компонента j в осадке (P_x^i), N_p — число соединений осадка, содержащих компонент j .

Тогда закон действующих масс дает

$$K_i^p \geq \prod_{j=1}^{N_c} [P_j]^{a_{ij}^p}, \quad (i = 1, \dots, N_p) \quad (7.62)$$

где K_i^p — константа равновесия для продукта растворения. Неравенство здесь свидетельствует о том, что скорость продуцирования P_{x_i} равна нулю, пока раствор не станет насыщенным. Сама величина P_{x_i} в неравенстве не фигурирует, так как активность твердого осадка принимается равной единице. Далее, аналогично комплексации и сорбции, при

$$P_i = \sum_{i=1}^{N_p} a_{ij}^p P_{x_i}, \quad (7.63)$$

получаем для накопления осадка j -го компонента и его комплексов выражение:

$$R_j^p = -\frac{\partial P_j}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left[\sum_{i=1}^{N_p} a_{ij}^p P_{x_i} \right] \quad (j = 1, \dots, N_c). \quad (7.64)$$

Отмеченное отсутствие величины P_{x_i} в уравнении химической реакции (типа 7.62), наряду с ее присутствием в общем уравнении баланса массы (типа 7.49) приводит к специфической математической постановке операционных уравнений массопереноса. Так, можно воспользоваться двухшаговой линеаризирующей трансформацией с тем, чтобы объединить систему одномоментных алгебраических уравнений с линейным дифференциальным уравнением в частных

производных (для одной переменной) с подвижной границей. Подобный подход прямо противоположен обсуждавшимся ранее процессам комплексообразования, когда член с источником-стоком содержится не в уравнении баланса массы, а в уравнении химической реакции: при этом простая одношаговая линеаризирующая трансформация приводит к системе одномоментных алгебраических уравнений в сочетании с линейными дифференциальными уравнениями в частных производных (для одной переменной) при неподвижных границах. Наконец, для случая сорбции члены с источником-стоком содержатся и в уравнениях химических реакций, и в уравнениях баланса массы; дифференцирование первых дает систему одномоментных нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных при неподвижных границах с нелинейными членами, содержащими частные производные от неизвестных функций. В наиболее общем случае модель должна совокупно учитывать отмеченные особенности всех трех основных процессов.

Таким образом, каждый член R_j базового уравнения (7.49), отражающий аккумуляцию продуктов при различных химических реакциях, может быть записан в виде суммы по всем возможным продуктам реакции, исходя из их вклада в концентрацию водного компонента j — согласно (7.53), (7.60) и (7.64) для комплексообразования (в водной фазе), сорбции и осаждения-растворения, соответственно. Кроме того, выражение (7.55) умножается на соответствующий стехиометрический коэффициент a_{ij}^x , суммируется по $i = 1, \dots, N_x$ для каждого j и добавляется к уравнению (7.49). В результате получаем:

$$\begin{aligned} n \frac{\partial}{\partial t} \left[c_j + \sum_{i=1}^{N_x} a_{ij}^x x_i \right] = L \left[c_j + \sum_{i=1}^{N_x} a_{ij}^x x_i \right] - \\ - n \frac{\partial}{\partial t} \left[\sum_{i=1}^{N_s} a_{ij}^s S_{x_i} \right] - n \frac{\partial}{\partial t} \left[\sum_{i=1}^{N_p} a_{ij}^p P_{x_i} \right] \quad (j = 1, \dots, N_c) \end{aligned} \quad (7.65)$$

Это и есть общая форма уравнения переноса для неконсервативных компонентов (при постоянной пористости).

Уравнение (7.65) решается вместе с уравнениями действующих масс, замыкающими систему. Для ее решения разработаны различные процедуры [28, 29]. При этом могут также учитываться изменения влагосодержания, изменения пористости и проницаемости при растворении-осаждении, кинетика процессов. Различные процессы требуют обычно применения различных методов, хотя наиболее общим является метод сопряженных градиентов.

Один из главных вопросов при этом — выбор основных зависимых переменных в общем уравнении переноса. Например, если в качестве таковых фигурируют лишь растворенные концентрации компонентов водной фазы, то резко усложняется поиск решения для переменных растворения-осаждения P_j . Если же за основные зависимые переменные принимаются общие аналитические концентрации компонентов водного раствора (T_j), то могут рассчитываться все процессы одновременно или итеративно.

Так как

$$T_j = c_j + \sum_{i=1}^{N_x} a_{ij}^x x_i + S_j + P_j, \quad (7.66)$$

или

$$T_j = c_j + \sum_{i=1}^{N_x} a_{ij}^x x_i + \sum_{i=1}^{N_s} a_{ij}^s S_{xi} + \sum_{i=1}^{N_p} a_{ij}^p P_{xi}, \quad (j = 1, \dots, N_c) \quad (7.66a)$$

то из (7.65) получаем:

$$n \frac{\partial}{\partial t} \left[c_j + \sum_{i=1}^{N_x} a_{ij}^x x_i + S_j + P_j \right] = n \frac{\partial T_j}{\partial t} =$$

$$= L \left[c_j + \sum_{i=1}^{N_x} a_{ij}^x x_i \right], \quad (j = 1, \dots, N_c). \quad (7.67)$$

Это уравнение ясно отражает главную концепцию массопереноса неконсервативных компонентов: изменения во времени концентрации каждого компонента в растворе, на твердой фазе и в твердом осадке определяются переносом этого компонента и его водных комплексов конвекцией и дисперсией.

7.3.1.2. Особенности моделирования кинетических процессов (на примере сорбции)*

Данный аспект рассмотрим на примере однокомпонентного массопереноса. В соответствии с разд. 7.2.2, учет неравновесных массообменных процессов в системе подземные воды — горные породы приводит к появлению в дифференциальных уравнениях дополнительной функции источника (стока) $f = \pm \frac{\partial N}{\partial t}$ [см. уравнение (7.25)].

При построении численного алгоритма предлагается замена кинетического уравнения (5.27) его КР аналогом с последующим введением соответствующих слагаемых в исходную систему КР уравнений, аппроксимирующих всю задачу. Так, расщепленное кинетическое уравнение массообмена решается совместно с диффузионной частью задачи. В частности, используется явно-неявная КР аппроксимация кинетического уравнения с запаздыванием по схеме:

* Подраздел написан Г.Н.Гензелем и Н.Ф.Карачевцевым [2].

$$\frac{\partial N}{\partial t} \approx \alpha (c^{j+1} - \beta N^j) = \frac{N^{j+1} - N^j}{\Delta t}. \quad (7.68)$$

Недостатком КР схемы (7.68) является то, что концентрация на твердой фазе N берется с предыдущего шага по времени. Это в условиях значительной роли конвекции приводит к завышению интенсивности процесса массообмена и появлению аппроксимационных погрешностей. Ситуацию можно улучшить, используя схемы, учитывающие средние значения производной $\frac{\partial N}{\partial t}$ на расчетном шаге Δt [2].

Численные эксперименты показывают, что изложенный подход позволяет существенно улучшить точность численного решения, однако по-прежнему накладывает существенные ограничения на пространственно-временную дискретизацию процесса, что зачастую сводит на нет основное преимущество метода расщепления — возможность моделирования задач массопереноса на грубых сетках.

Анализ показывает, что для устранения указанных затруднений, возникающих при численном решении уравнений массопереноса с неравновесным массообменом, необходимо использование принципиально нового подхода, заключающегося в максимальном учете физических особенностей процессов. Рассмотрим некоторую элементарную ячейку (расчетный блок), наделенную параметрами n, α, β . Пусть на момент времени t_j концентрация вещества в твердой фазе N_0 . После конвективного переноса, согласно схеме расщепления, концентрация вещества в жидкой фазе мгновенно становится c_0 . Рассматривая массообмен в ячейке в течение некоторого времени Δt независимо от соседних ячеек (блоков), запишем уравнение баланса массы вещества

$$nc_0 + N_0 = nc(t) + N(t), \quad 0 \leq t \leq t. \quad (7.69)$$

* При расщеплении транспортных уравнений и уравнений химических реакций возникает дополнительная численная дисперсия.

Полагаем, что кинетика массообмена описывается уравнением (5.27). Решая совместно уравнения (7.69) и (5.27) с начальными условиями $N(0) = N_0$, $c(0) = c_0$, получим:

$$c(t) = c_0 \exp \left(-\frac{\alpha}{n} t \right), \quad (7.70)$$

$$N(t) = N_0 + n c_0 \left[1 - \exp \left(-\frac{\alpha}{n} t \right) \right]. \quad (7.70a)$$

Решение (7.70)-(7.70,a) позволяет рассчитать концентрацию вещества в блоке на любой момент времени t из интервала $0 \leq t \leq \Delta t$ и может быть использовано в схеме расщепления для организации самостоятельного шага вычислений. В этом случае схема расщепления будет представлена в виде «конвекция — диффузия-сорбция». Алгоритм решения задачи модифицируется следующим образом: за шаг Δt выполняется конвективный перенос; решается система уравнений (7.19)-(7.20) без учета массообмена, а затем по формулам (7.70)-(7.70,a) учитывается изменение концентраций c и N вследствие массообмена. Полученные на третьем этапе значения c и N и будут, в соответствии с основной идеей метода расщепления, решением задачи массопереноса на время $t + \Delta t$.

Численный анализ показывает, что данный подход дает хорошую точность расчетов при использовании грубых сеток и не накладывает дополнительных ограничений на уровень пространственно-временной дискретизации процесса. Предложенный метод по своей сути является численно-аналитическим и обладает высокой универсальностью. Он позволяет, используя строгие аналитические решения, полученные для статических условий без учета массообмена с окружающим пространством, производить численный расчет задач в динамических условиях. Метод легко обобщается для более сложных кинетических уравнений массообмена.

В рассмотренном случае кинетический (сорбционный) процесс был непосредственно включен в транспортное уравнение, которое затем решалось расщеплением по отдельным процессам. Такой, сейчас достаточно традиционный, подход встречает, однако, серьезные затруднения при моделировании подвижных границ растворения-осаждения. Для этого случая рекомендуется следующий общий порядок расчета:

- 1) вычисляются ионная сила и активности во всех узлах;
- 2) решается система уравнений переноса;
- 3) вычисляются новые концентрации всех компонентов в узлах, после чего значения концентраций исправляются.

Если в качестве главных зависимых переменных используются общие концентрации всех компонентов или водные концентрации для каждого вещества, то подвижная граница проявляется как неизвестная в сеточных уравнениях и ее необходимо проследивать особо (так называемые фронтальные методы). Если же выбрать в качестве зависимых переменных суммарные концентрации каждого компонента (формулировка, подобная использованию энтальпии в тепловых задачах с подвижной границей смены фаз), то в этом нет необходимости, но тогда появляются осцилляции из-за недостаточно хорошей аппроксимации разрывов функций на движущейся границе; однако, если концентрации на твердой фазе не намного превышают водные концентрации, то последний метод намного эффективнее. При этом «на решении задачи» образуется зона, не содержащая реагирующей твердой фазы (недонасыщенная зона), которая отделена резким фронтом от насыщенной зоны, где реагирующая твердая фаза либо появляется (осаждение), либо исчезает (растворение).

В качестве общего вывода по моделированию химических взаимодействий, подчеркнем, что ими, в значительной мере, определяется математическая структура модели. Например, появление кинетического члена в уравнениях химических реакций заставляет решать их как систему обыкновенных дифференциальных уравнений — вместо системы алгебраических уравнений. Общим принципом решения обычно остается расщепление разностных операторов (РРО), преимущества которого определяются следующим:

- 1) на каждой отдельной стадии решения можно использовать численную схему, наиболее подходящую для данного процесса, гибко учитывая при временной дискретизации разномасштабность процессов;

2) возможность организации счета на параллельных компьютерах;

3) модульный характер соответствующих численных программ позволяет легко адаптировать их к конкретной задаче.

Вместе с тем, как уже отмечено, само расщепление задачи связано с балансовой погрешностью из-за включения в счетные операции значений концентрации, снятых с предыдущего временного подинтервала. Такой недоучет кинетики внутри временного шага заставляет сильно мельчить последний и осуществлять специальные проверочные процедуры. В целом, уравнения химических реакций требуют при решении всей системы уравнений массопереноса львиную долю компьютерного времени. В связи с этим, повышенное внимание уделяется организации эффективного вычислительного процесса, специальным образом увязывающего пространственно-временную дискретизацию транспортных уравнений с более дробной разбивкой применительно к уравнениям химических реакций при параллельном счете [18].

7.3.2. Особенности численного моделирования миграции подземных вод переменной плотности и некоторые частные результаты

Выше рассматривался массоперенос в подземных водах при условии, что последние являются флюидами с постоянной плотностью. Такой подход позволяет существенно упростить исходные дифференциальные уравнения и в конечном счете рассматривать фильтрацию подземных вод независимо от миграции ассоциированных с ними веществ. Однако существует широкий класс задач, где пренебрежение эффектами плотностной конвекции недопустимо. Это проблемы изучения закономерностей движения минерализованных подземных вод, расчет дренажных систем в условиях распространения различных по минерализации вод, оценка эксплуатационных запасов подземных вод в условиях подтягивания к

водозаборам фронта минерализованных вод, оценка фильтрации некондиционных вод повышенной плотности из бассейнов промстоков и т.п. Методы численного решения рассматриваемых задач представляют собой сложную проблему и в настоящее время сделаны лишь первые шаги на пути ее исследования.

Моделирование движения разноплотностных жидкостей позволяет использовать два возможных подхода:

1) на каждом шаге последовательно решают сначала уравнение для давлений, откуда получают расчетное поле скоростей фильтрации, а затем — уравнение для концентраций;

2) на каждом шаге решают единое уравнение, используя линейную связь между плотностью и концентрацией.

В ряде работ доказывают преимущества первого подхода, когда значения давлений (или приведенных напоров и концентраций) рассматриваются как независимые переменные [19]. Для решения могут использоваться любые из рассмотренных выше методов — МКР, МКЭ, МХ.

Так как нелинейность здесь обычно слабая, то она устраняется простейшими итерациями в пределах временного шага, причем для ограничения ошибок округления рекомендуется [19] записывать уравнения через приращения функции. Однако требуемые затраты машинного времени, как правило, очень велики, причем они растут

с увеличением «эффекта всплывания» $\eta = \frac{\bar{\rho}}{c_1} (\bar{\rho} = \frac{\rho' - \rho^0}{\rho^0})$, где ρ' —

плотность, отвечающая максимальной концентрации c_1), который может рассматриваться как мера нелинейности [15].

Наиболее интенсивно в пределах данной проблемы исследовалась двумерная задача об интрузии океанических вод, которая чаще всего решалась в предположении о наличии резкой границы раздела пресной и соленой воды. При этом для однородных пластов была доказана вполне

приемлемая точность представления стационарной асимптотики через известную формулу Гибена-Герцберга: последняя давала большие погрешности в сторону завышения длины «языка» лишь в передовой (подошвенной) зоне вторгающегося «языка» соленых вод. Именно эта зона, кстати, труднее всего аппроксимируется при моделировании и требует особого подхода — резкого измельчения сетки в целом при введении подвижной сетки. Все это приводило к очень большим затратам машинного времени: выход на стационарную асимптотику происходил примерно через 1000 временных шагов [11]; некоторое улучшение достигалось при прогрессирующем увеличении длины интервала $\Delta t (\Delta t^{k+1} = 1,2\Delta t^k)$, причем ограничения на временной шаг налагала главным образом численная дисперсия. Необходим внимательный подход к выбору размеров модели: длина ее L должна быть намного больше длины прогнозируемого «языка» соленых вод. В качестве первого ориентира можно принимать $L > (15 \div 20) m$.

Важным физическим результатом моделирования явилось доказательство динамического характера наблюдаемого (квазистационарного) предельного равновесного состояния: в зоне соленых вод образуется конвективная ячейка — в нижней части «языка» вода течет от моря, а в верхней — в обратном направлении.

Вместе с тем, упомянутые модели с резким фронтом, пренебрегающие дисперсией, представляют (по понятным физическим соображениям) ограниченный интерес. Так, в работе [10] рассматривалась интрузия морских вод в двухслойный напорный пласт, нижний слой которого отделен от моря относительным водупором. Основной переток морской воды отмечался вблизи берега, интенсивность перетока с удалением от берега убывала примерно линейно. Благодаря наличию разделяющего

* С учетом дисперсии, эти погрешности возрастают.

водоупора, граница раздела (точнее, изолиния $\bar{c} = 0,5$) смещается вниз и к морю. Автор делает выводы, что для исследования данной задачи модель резкой границы раздела вообще не годится: наличие относительного водоупора способствует возникновению мощной переходной зоны между пресной и соленой водой.

Схема решения такого рода задач в наиболее общей — трехмерной — постановке предложена в работе [15]. Уравнения для приведенных напоров и концентраций решаются на каждом шаге последовательно, методом конечных элементов. Соответствующие матричные уравнения связаны друг с другом через скорости фильтрации и «эффект всплывания» 7 (задача нелинейная). Для устранения трудностей, связанных с исследованием трехмерного процесса, решение ищется на ряде последовательных слоев по координате z .

Сравнение с моделью, пренебрегающей дисперсионными эффектами, выявило ее недопустимые погрешности, в частности, по значениям напоров (давлений), особенно в зоне дисперсии. Формула Гибена-Герцберга дает положение границы раздела, очень сильно отличающееся от изолиний $c = 0,5$: последняя размещается намного ниже и ближе к источнику засоления, причем вблизи ее нижней точки направление скорости постепенно меняется на противоположное, соленая вода смешивается с пресной и движется обратно к морю. Переходная зона занимает значительную долю области миграции. Качественно сходные результаты получены и при наличии разделяющего относительного водоупора.

С увеличением различий в плотности степень нелинейности и, соответственно, трудности численного решения возрастают. Так, в работе [23] изучалась миграция рассолов, образующихся под соляным куполом за счет растворения солей инфильтрационными пресными водами; относительная разность плотностей $\Delta \rho$ достигала 0,15-0,2. Миграционный процесс сводится к наложению естествен-

ной и вынужденной конвекции, когда на верхней границе купола возникает весьма чувствительный баланс между поперечной профильной дисперсией (стремящейся обеспечить отток растворенных солей вверх) и нисходящей плотностной конвекцией. Численная программа TOUGH, основанная на методе сопряженных градиентов, обеспечивала расчет скоростей и массовых градиентов на границах блоков не только в ортогональном, но и в параллельном им направлении, что давало повышенную точность реализации поперечной дисперсии. Были также включены утонченные процедуры для проверки текущих результатов счета на «ложную» сходимость, для чего итерации на каждом шаге продолжались до достижения весьма малых невязок по балансу массы, аккумулируемой в каждом блоке. Результаты моделирования оказались даже качественно отличными от полученных ранее с помощью других численных программ и исключительно чувствительными к численной поперечной дисперсии, особенно в периоды времени, близкие к стабилизации процесса. Для достижения стационара требуются времена порядка сотен лет, причем при сравнительно слабой поперечной дисперсии вообще не возникает конвективной ячейки и растворенная соль выносится на поверхность в области разгрузки инфильтрующихся вод. Как характер процесса, так и время достижения стационара сильно зависят от начальных условий: при задании исходного ореола рассолов над соляным куполом, их вовлечение в конвективный процесс происходит крайне медленно и общее время стабилизации увеличивается в несколько раз (по сравнению с вариантом моделирования, при котором в начальный момент естественные рассолы над куполом отсутствуют).

Наконец, с помощью модельных и аналитических подходов в ряде работ исследовалась задача о подтягивании соленых вод к водозаборным скважинам, откачивающим пресную воду. Все эти работы выявили возникновение довольно мощных переходных зон, приводящее к постепенной деградации откачиваемой (или нагнетаемой в пласт) пресной воды. Характерно вместе с тем, что вдали от скважин мощность переходной зоны резко уменьшается, что создает серьезные трудности для моделирования. На основании этих исследований сделаны важные

практические выводы о методах управления подобными системами скважин, в частности, показана особая эффективность вертикальной дифференциации водоотбора вплоть до включения специальных заглубленных скважин, откачивающих соленую воду и устраняющих тем самым деградацию пресной воды.

В целом внимательный анализ подтверждает очень высокую сложность решения многих задач миграции разноплотностных жидкостей, особенно когда физика процесса не допускает пренебрежения дисперсией, а мощность переходимой зоны невелика. Понять происхождение этой сложности можно из следующих простейших соображений [27]. Пусть плотность ρ изменяется по вертикали линейно, тогда по законам гидростатики давление P должно изменяться по квадратичной зависимости от z . Если же (как это делается обычно, например, в МКЭ) принимается линейное профильное изменение давления или приведенного напора между узловыми точками, то появляется фиктивная вертикальная скорость фильтрации, восходящая в верхней части и нисходящая — в нижней (для нормального гидрохимического разреза с линейным изменением концентрации). Такие фиктивные скорости могут измеряться метрами в сутки. Это вызывает численное рассеяние вещества в вертикальном направлении, т.е. появление «искусственных» переходных зон большой мощности, что особенно важно для процессов, близких к стационарным, когда имеют место тонкие переходные зоны с примерно линейным изменением плотности по вертикали. Выход из этого положения дает введение в алгоритм единого значения вертикальной скорости для каждого элемента, отвечающего средней плотности (или концентрации, если плотность рассчитывается по значению c). Однако это уменьшает точность аппроксимации горизонтальной скорости и требует сокращения длины элемента Δx , поскольку соотношение $\Delta x / \Delta z$ в таких задачах является во многом определяющим. Таким

образом, мелкая сетка в подобных задачах безусловно необходима, что при использовании МХ может быть заменено путем увеличения числа расчетных частиц.

Подбор оптимальной дискретизации модели практически невозможен без специальных тестов, которые следует начинать со стационарных задач без переходной зоны. Временной шаг предпочтительнее принимать постепенно возрастающим во времени, начиная с величин, отвечающих занижению критерия Куранта (7.9) примерно на порядок. Это требование оказывается особенно существенным для блоков, прилежащих к скважинам. Необходима и проверка качества моделирования расходов субвертикальных потоков, обусловленных плотностной конвекцией, что требует специальных тестов, которые лучше всего ориентировать на типовые условия естественной конвекции.

Завершая этот раздел, сформулируем главные источники погрешностей, специфичных для задач миграции разноплотностных жидкостей:

1) плохая аппроксимация скорости фильтрации при традиционных подходах, предполагающих линейную изменчивость искоемых функций в пределах расчетных элементов;

2) неудовлетворительное представление расхода потока, обусловленного плотностной конвекцией;

3) некачественная аппроксимация поперечной дисперсии. Устранение вытекающих отсюда погрешностей часто возможно лишь на мелкой сетке, что дало авторам работы [27] основание усомниться в достоверности результатов многих ранее опубликованных работ по данной проблеме.

7.3.3. Особенности моделирования миграции в трещиновато-пористых средах

В отличие от гетерогенных слоистых сред, трещиновато-пористые породы существенно гетерогенны не только по трещиноватости, но и по емкости: доминирование емкости пористых блоков приводит к необходимости повышенной точности моделирования миграции в них; правильнее говоря, требуется достаточно надежная аппроксимация интенсивности поступления вещества в блоки или, что эквивалентно, средней концентрации в блоках и ее изменения во времени.

При таком моделировании возможны два подхода. Первый из них связан с введением пространственной дискретизации не только для трещин, но и для блоков. Как правило, это приводит к дорогостоящим моделям, не говоря уже о необходимости предварительного упрощения реальной геометрии блоков посредством, например, модели эквивалентного равномерно-слоистого пласта [22].

Так, для условий, удовлетворяющих предпосылке о неограниченной емкости блоков, можно использовать простейшую одномерную их разбивку с шагом (d_1), постепенно возрастающим по мере удаления от границы блока [25]: $d_{i+1} \approx (1,5 \div 2) d_i$. Первый шаг d_1 должен быть не очень большим, чтобы быстро среагировать на загрязнение в трещине. Если g_D «диффузионная проводимость» первого — внешнего — расчетного элемента пористой матрицы, равная (при ширине элемента b):

$$g_D = \frac{D_* b (2d_1 + d_2)}{d_1 (d_1 + d_2)}, \quad (7.71)$$

а n_{01} — его емкость, то рекомендуется выдерживать соотношение [25]:

$$\tau = n_{01} / g_D \approx \alpha t_0, \quad (7.72)$$

где t_0 — время появления первого загрязнения в данной точке пласта, а α принимается в интервале 0,001–0,1 (при $\alpha < 0,001$ итерационный процесс, используемый для связи на каждом временном шаге уравнений миграции в блоках и трещинах, сходится слишком медленно, а при $\alpha > 0,1$ — реакция пористой матрицы на загрязнение ощущается еще очень слабо).

Подобную одномерную модель можно использовать и для блоков конечной емкости, имеющих простейшую конфигурацию (пластинчатую или сферическую). При этом не рекомендуется [16] аппроксимировать градиенты на границах блоков и трещин квазистационарными зависимостями, по крайней мере, для ранних (см. выше) и промежуточных этапов миграции в блоках. Уравнение для блоков представляется по неявной одномерной схеме, и на каждом временном шаге оно решается совместно с уравнением для трещин — прямым методом или итерациями.

В частности, итеративная процедура выглядит следующим образом:

- а) оценивается концентрация в блоках по узлам, ближайшим к трещинам (исходя из значений на предыдущем временном шаге);
- б) рассчитывается градиент на границе блока и отток в него;
- в) с учетом величины оттока, определяется концентрация в трещинах на конец временного шага $c_{тр}^{k+1}$ (первое приближение);
- г) определяется концентрация для всех узлов пористой матрицы;
- д) проводится вторая итерация; процесс итерирования заканчивается, когда $c_{тр}^{k+1}$ перестает изменяться.

Обычно одной-двух итераций на каждом временном шаге оказывается достаточно, причем хорошие результаты получаются даже на грубой сетке, при шаге Δt , постепенно возрастающем во времени:

$$\Delta t_k = \sqrt{2} \Delta t_{k-1}. \quad (7.73)$$

Еще более общее выражение данного подхода (применительно к задачам теплопереноса) достигнуто в работе [24] на основе ин-

тегрального МКР, когда в численный алгоритм входят непосредственно сопротивления между элементами сетки. Это позволяет объединить в пределах отдельных элементов и пористую матрицу, и трещины, что делает схему более гибкой. Геометрическое описание дается через объемы элементов, расстояние между их центрами, площади поверхностей раздела. При этом считается, что:

- 1) конвективный поток идет вдоль линий d_m (см. выше) и
- 2) в каждом расчетном элементе в течение времени Δt существует термодинамическое равновесие.

Для того, чтобы добиться соблюдения последнего условия в рассматриваемой среде, характеризующейся большими градиентами (в данном случае — температуры), используется предпосылка, согласно которой термодинамические условия в пористом блоке зависят только от расстояния расчетной точки до ближайшей трещины. Ранее доказано, что такая предпосылка вполне допустима по крайней мере для среднеинтегральных значений искомой функции по поверхности, параллельной ограничивающим трещинам; поэтому каждый элемент дополнительно разбивается на подэлементы такими поверхностями, а трещины моделируются как оконтуривающие подэлементы, содержащие только воду. Благодаря подобной разбивке, резко (на несколько порядков) сокращается необходимое время счета и вполне надежно моделируются условия на контактах двух континуумов — трещин и пористой матрицы.

Аналогичная схема, основанная на интегральном МКР, применялась в работе [25] для моделирования интенсивного радиоактивного загрязнения, когда необходима очень высокая точность прогноза (до 10^{-8} - 10^{-9} от исходной концентрации).

Условия неразрывности потока и концентрации на границах трещин и блоков записываются в интегральном виде для некоторой области, что устраняет необходимость явного представления внутренних границ:

$$-\int_{\Gamma_1+\Gamma_2} V \bar{n} c_f d\Gamma + \int_{\Gamma_1+\Gamma_2} D \Delta c \bar{n} d\Gamma - W K \lambda c = W K \frac{\partial c}{\partial t}, \quad (7.74)$$

где $\bar{n}$ — нормаль к границе элемента; Γ_1 и Γ_2 — внешняя и внутренняя границы; W — объем элемента; если элемент принадлежит трещине, то $K = 1$, а если пористому блоку, то первый

интеграл пропадает; $c = c_6$ (концентрация в блоке) и $K = K_r + n_o$ (K_r — коэффициент распределения); λ — коэффициент распада. Граница раздела «автоматически» включена во второй интеграл, отражающий диффузионный поток. Пористые блоки представляются шарами, что позволяет выразить скорость изменения средней концентрации в блоке ($\bar{c}_6$) уравнением

$$\frac{\partial \bar{c}_6}{\partial t} = \frac{3}{\Gamma_6} \left(D \frac{\partial c_6}{\partial r} \right)_r. \quad (7.75)$$

К уравнению (7.75) далее применяется интегральный МКР, в котором используется смешанная явно-неявная схема. Для каждого узла по ходу счета делается проверка выполнения сеточного критерия Пекле (Pe_Δ), отражающего соотношение конвективной и диффузионной составляющих (см. разд. 7.1.3). Для тех узлов, где $Pe_\Delta \leq 2$, — схема явная, в противном случае — неявная, и для таких узлов на каждом временном шаге включается итерационная процедура.

Одним из важнейших достоинств примененного подхода в целом является возможность гибкого моделирования многокомпонентного переноса, когда отдельные компоненты мигрируют в пористые блоки с различной интенсивностью, вследствие чего в направлении основного переноса развивается отчетливо выраженная гидрохимическая зональность. Вместе с тем, неэкономичность предложенных схем заставляет все чаще обращаться ко второму подходу, основанному на численно-аналитических решениях, благодаря которым удастся отказаться от сеточной разбивки пористых блоков и в результате резко сократить счетное время. Исходными здесь являются интегральные соотношения (7.74)–(7.75), справедливые при пренебрежении конвекцией в блоках.

Недостатком использования соответствующего интеграла свертки (разд. 3.2.4) в общем его виде является необходимость

хранения в памяти большого объема данных, требуемых для его расчета. Устранение данного недостатка осуществляется путем представления этого интеграла через известные аналитические одномерные решения (в виде быстро сходящихся рядов) для простейших типовых форм пористых блоков — шаровых или пластинчатых.

В целом, при таком подходе достигается быстрая сходимость и повышенная точность решения (в сравнении с первым подходом), особенно для ранних моментов времени. Численно-аналитические схемы позволяют легко добиться хороших результатов и при исследовании трехмерных миграционных процессов в слоистых толщах (за счет аналитического представления диффузионной составляющей в относительных водоупорах [16] при отсутствии конвекции в них). Недостатком данного подхода являются трудности моделирования переноса многокомпонентных систем, когда отдельные компоненты мигрируют с разными скоростями и взаимодействуют друг с другом.

Обращение к математическому моделированию позволяет в ряде случаев выйти за рамки традиционного феноменологического подхода, предопределяющего, в частности, параметрическую детерминированность пласта, из-за чего в расчетных схемах не находит отражения статистический характер природной трещинно-блочной структуры. С этой точки зрения, достаточно эффективна комбинированная модель, сочетающая в себе элементы численного моделирования и расчетов по аналитическим зависимостям: связь между ними осуществляется посредством интегральных приемов.

Остановимся кратко на алгоритмической стороне численной модели, представляющей определенный интерес с методических позиций как иллюстрация гибкости и надежности базисных — консервативных конечно-разностных схем.

В рассматриваемой численной модели дискретная область реального трещинного пространства моделируется как сплошная

двумерная среда: каждый модельный блок несет информацию о емкости трещин, характеризующейся коэффициентом трещиноватости, и параметрах двумерной конвективной дисперсии в них. Имитация процесса миграции в трещинах осуществляется путем сеточного решения двумерного уравнения переноса известными численными методами (например, локально-одномерным). Для учета влияния диффузии в пористые блоки последние удобно представлять в виде шаров различных размеров $R_{i,j} = f(x, y)$. Моделирование массообмена между трещинами и блоками осуществляется на каждом временном шаге путем имитации отбора вещества трещин с интенсивностью, отвечающей массовому потоку через поверхность сферы. Диффузионный поток Q_{ij}^N на расчетный момент времени $t = N\Delta t$ (N — порядковый номер временного слоя) может рассматриваться как сумма элементарных расходов $\Delta q_{i,j}^k$, обусловленных теми приращениями концентрации $\Delta c_{i,j}^k$ в трещинах i, j -го модельного блока, которые имели место на всех предшествующих временных шагах. Согласно принципу суперпозиции, имеем:

$$Q_{ij}^N = \sum_{k=1}^N \Delta q_{i,j}^k. \quad (7.76)$$

Значения $\Delta q_{i,j}^k$ рассчитываются согласно аналитическому решению уравнения диффузии для шара, на поверхности которого поддерживается постоянная концентрация $\Delta c_{i,j}^k$ в течение периода Δt :

$$\Delta q_{i,j}^k = -\Delta c_{i,j}^k 8\pi D_M R_{i,j} \sum_{n=1}^{\infty} \exp[-D_M/n_o (\pi n/R_{i,j})^2 \times \\ \times (\bar{N} - k) \Delta t] \quad (7.77)$$

При этом на каждом временном слое приращение концентрации $\Delta c_{i,j}^k$ подбирается при помощи дополнительных итераций, так как оно зависит от рассчитываемого значения $\Delta q_{i,j}^k$; как показывают численные эксперименты, приемлемая точность достигается при 4-5 итерациях.

Для согласования размерностей массовых потоков в трещинах и пористых блоках вводится «высота» блока $m_{b_{i,j}}$; тогда, разбивая область так, чтобы выполнялось условие $\Delta x_i = \Delta y_i = m_{b_{i,j}} = 2R_{i,j}$, мы, в сущности, согласуем модель и по емкостным параметрам. При этом оказывается, что каждый модельный блок полностью характеризует свойства некоторого объема трещиновато-пористой среды в границах своего распространения.

Рассматриваемая модель позволяет выйти за рамки привычной аналогии со слоистыми системами и тем самым значительно расширить круг решаемых задач. Отметим, что преимуществом такого подхода является возможность анализа процессов переноса в гетерогенных трещиновато-пористых средах на двумерных моделях со статистически распределенными характеристиками.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ К ГЛАВЕ 7

1. Бреббия К., Уокер С. Применение метода граничных элементов в технике. — М.: Мир, 1982. — 270 с.
2. Гензель Г.Н., Карачевцев Н.Ф., Коносавский П.К., Кравчук С.В., Мироненко В.А., Румынин В.Г. Решение задач охраны подземных вод на численных моделях. — М.: Недра, 1992. — 240 с.
3. Ломакин Е.А., Мироненко В.А., Шестаков В.М. Численное моделирование геофильтрации. — М.: Недра, 1988. — 228 с.
4. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. — М.: Наука, 1982. — 320 с.
5. Мироненко В.А. Динамика подземных вод. — М.: Недра, 1983. — 357 с.
6. Мироненко В.А., Мольский Е.В., Румынин В.Г. Изучение загрязнения подземных вод в горнодобывающих районах. — Л.: Недра, 1988. — 279 с.
7. Самарский А.А. Теория разностных схем. — М.: Наука, 1983. — 654 с.

8. Carnahan C.L. Modeling of coupled geochemical and transport processes: An overview. — Lawrence Berkeley Laboratory Report, 1989, LBL-28048, 11 p.
9. Dans A.D., Frind E.O., Sudicky E.A. Comparative error analysis in finite element formulations of the advection-dispersion equation. — Advances in Water Resources, 1985, vol. 8, N 4, p.86-95.
10. Frind E. Saltwater Intrusion in a Continuous Coastal Aquifer — Aquitard System. — Advances in Water Resources, 1982, vol. 5, June, p.p.89-97.
11. Frind E. Simulation of Long — Term Transient Density-Dependent Transport of Ground Water. — Advances in Water Resources, 1982, vol. 5, June, p.p.73-88.
12. Frind E. The Principal. Direction Technique Finite Elements in Water Resources: Proc. of the 4-th Int. Conf., Springer Verlag. Berlin, 1982, p.p.1325-1342.
13. Frind E., Matanga G. The Dual Formulation of Flow for Contaminant Transport Modeling. — Water Resources Research, 1985, vol. 21, N 2, p.p.159-169.
14. Hamilton D., Wiggert D., Wright S. Field Comparison of Three Mass Transport Models. — Journ. of Hydraulic Div, 1985, vol. 111, N 1, p.p.1-11.
15. Huyakorn P., Andersen P., Mercer J., White H. Saltwater Intrusion in Aquifers. — Water Resources Research, 1987, vol. 23, N 2, p.p.293-312.
16. Huyakorn P., Geoffrey I., Andersen P. Finite Element Algorithms for Simulating Three-Dimensional Ground Water Flow and Solute Transport. — Water Resources Research, 1986, vol. 22, N 3, p.p.361-374.
17. Jennings A. Critical Chemical Reaction Rates for Multicomponent Groundwater Contamination Models. — Water Resources Research, 1987, vol. 23, N 9, p.p.1775-1784.

18. Kaluarachchi J.J., Morshed J. Critical Assessment of the Operator-Splitting Technique in Solving the advection-dispersion-reaction equation. — *Advances in Water Resources*, 1995, vol. 18, N 2, p.p.89-100.
19. Kinzelbach W. Groundwater Modelling. An Introduction with Sample Programs in Basic. — *Developments in Water Science*. Amsterdam, 1986, p.p.333.
20. Konikow L.F., Bredehoeft J.D. Computer Model of Two-Dimensional Solute Transport and Dispersion in Ground Water — *Technique of Water. Resources Investigations*. — Chap. C2, B.7. — 1984, USGS. — Reston. — p.p.1-89.
21. Kueper B.H., Gerhard J.I. Variability of point source infiltration rates for two-phase flow in heterogeneous porous media. — *Water Resources Research*, 1995, vol. 31, N 12, p.p.2971-2980.
22. Noorishad J., Mehran M. An upstream finite element method for solution of transient transport equation in fractured porous media. — *Water Resources Research*, 1982, vol. 18, N 3, p.p.588-596.
23. Oldenburg C.M., Pruess K. Dispersive transport dynamics in a strongly coupled groundwater — brine flow system. — *Water Resources Research*, 1995, vol. 31, N 2, p.p.289-302.
24. Pruess K., Narisimhan A. Practical Method for Modelling Fluid and Heat Flow in Fractured Porous Media// *SPEJ*. — 1985, vol. 25, N2, p.p.14-26.
25. Rasmuson A., Narisimhan T., Neretnieks J. Chemical Transport in Fissured Rock. — *Water Resources Research*, 1982, vol. 18, N6, p.p.1479-1492.
26. Reddel D. Khaleel R., MOC Solutions of Convective-Dispersion Problems. — *Ground Water*, 1986, N6, p.p.798-807.
27. Voss G., Souza W. Variable Density Flow and Solute Transport Simulation. — *Water Resources Research*, 1987, vol. 23, N10, p.p.1851-1866.

28. Yeh G., Hwang J., Cho W. Subregion Iteration of FEM for Large-Field Problems of Ground Water Solute Transport. — Journal of Hydraulic Div., 1985, vol. 111, N3, p.p.547-551.
29. Yeh G.T., Tripathi V.S. A Model for Simulating of Reactive Multispecies Components: Model Development and Demonstration. — Water Resources Research, 1991, vol. 27, N12, p.p.3075-3094.

Численное моделирование играет исключительную роль в исследовании миграционных процессов, заменяя, в частности, физический эксперимент в условиях, когда последний либо нерационален, либо же вообще невозможен. Много полезного для понимания миграционных процессов принесли интенсивные исследования фильтрации и массопереноса в стохастически неоднородных средах, а также анализ массопереноса с учетом сложных физико-химических процессов. С этой точки зрения, представляемый здесь материал можно рассматривать в качестве дополнения к изложенным выше теоретическим разделам.

8.1. Исследование на математических моделях массопереноса в гетерогенных водоносных пластах

Рассматриваемые среды характеризуются значительными колебаниями показателей геометрической структуры составляющих их элементов, проницаемости и поровой (трещинной) емкости. Наиболее полное представление о пространственной изменчивости физических параметров в таких гетерогенных средах дает их стохастическое описание. В зависимости от репрезентативности вероятностных моделей пористых (трещиноватых) сред, имитация массопереноса на них позволяет изучить особенности миграционного процесса в условиях, в той или иной степени приближенных к реальным. В конечном счете, такого рода моделирование дает основу для исследования двух фундаментальных проблем: первая связана с оценкой возможностей описания миграционных

процессов в рамках усредненных расчетных схем конвективно-дисперсионного типа, вторая — касается анализа параметрической чувствительности, позволяющего оценить степень неопределенности миграционных прогнозов в зависимости от стохастических особенностей реальных объектов.

8.1.1. Анализ закономерностей макродисперсии

Первые публикации по проблеме появились в начале восьмидесятых годов [9, 7]. Так, в работе [7] была описана простейшая двумерная модель неупорядоченной неоднородной среды, представленной полем хорошо проницаемых пород, в пределах которого были распределены слабопроницаемые включения. При этом рассматривались два варианта: первый предполагал распределение участков с низкой проницаемостью случайным, а второй относился к более сложному случаю, когда участки с низкой проницаемостью, контактируя друг с другом, образовывали закономерные скопления — агломерации. Решения задачи массопереноса получены методом характеристик, что дало информацию о пространственно-временных закономерностях изменения расчетной константы дисперсии δ_L^* .

Они свидетельствуют о том, что значения δ_L^* являются на первых этапах процесса переменными величинами. После того, как расстояние, на которое продвинулся фронт переноса, в десятки раз превышало размеры слабопроницаемых включений, отмечалась тенденция к стабилизации этого параметра ($\delta L = \delta_L^* = \text{const}$). Вместе с тем, такое поведение показателя дисперсии отмечалось лишь при отсутствии закономерностей в распределении слабопроницаемых включений. Если же на модели задавался достаточно ощутимый тренд, когда слабопроницаемые

включения образуют хорошо выраженные агломерации, то подобрать постоянное значение δ_L^* не удавалось. Это вполне понятно: второй вариант модели, по сути дела, представляет собой гетерогенную среду с новыми характерным масштабом фильтрационной неоднородности, отвечающим размерам агломераций.

Обограниченных возможностях описания процессов переноса на основе традиционных, статистически усредненных схем, свидетельствуют также данные моделирования двумерной миграции в среде со стохастически распределенными параметрами [9]. Из результатов, полученных в этой работе, следует, что даже при наличии совершенного математического аппарата далеко не всегда удастся выявить минимальный представительный объем гетерогенного пласта, превышение которого выводит процесс на диффузионную асимптотику. Этот объем во многом определяется ковариационными характеристиками с учетом конкретного размера элементов неоднородности в пределах изучаемой области (даже статистически однородной). Индивидуальные особенности строения пласта особенно хорошо проявляются на начальных этапах массопереноса.

В отличие от ранее проведенных исследований [9, 7], где использовался метод Монте-Карло, требующий больших затрат машинного времени, в работе [11] применялась иная процедура стохастического моделирования: действительная скорость задавалась непосредственно как случайная функция, а концентрация подсчитывалась как величина, усредненная по расчетному блоку. Назначенные характеристики модели таковы: коэффициент вариации логарифма проводимости — 0,5, масштабы ковариационной функции для действительной скорости — $l_x = 7,6$ м и $l_y = 3,9$ м, ее математическое ожидание $|v_x/n| = 0,06$ м/сут.

По результатам моделирования были получены асимптотические значения коэффициентов макродисперсии — $D_x^* = 0,26$ м²/сут, $D_y^* = 0,024$ м²/сут, причем они достигались при длине переноса, превышающей примерно на порядок величину l_x . Удвоение скорости приводило к эквивалентному росту асимптотических значений D^* . Они также существенно зависели от ковариационной структуры по-

ля скоростей, само наличие которой и явилось важным фактором в стабилизации расчетных характеристик макродисперсии. Уменьшение степени фильтрационной неоднородности среды (до $\sigma_{lgT} = 0,1$) и, соответственно, вариации скорости приводило к резкому сокращению вели-

чин D_x^* и D_y^* (примерно в 20 раз). Небольшие изменения масштабов ковариационной функции слабо влияли на расчетные концентрации.

На другой численной двумерной модели в работе [8] исследовался процесс массопереноса в трещиноватой среде со статистически заданным законом распределения параметров в двух ортогональных системах трещин (одна из них, как правило, была ориентирована в направлении вектора средней скорости фильтрации) — рис. 8.1. При моделировании последовательно реализовывались различные генерации сети трещин (метод Монте-Карло).

Сначала с помощью конечно-разностного метода решалась фильтрационная задача и вычислялись скорости в узловых точках, а затем по известным характеристикам фильтрационного поля прослеживалось движение меченных частиц, запускаемых на входной (левой) границе прямоугольной модели; запуск осуществлялся в одну трещину вблизи осевой линии модели (авторы утверждают, что запуск по всей длине границы не сильно менял ситуацию). На пересечениях трещин частица «выбирала» путь в соответствии с вероятностным взвешиванием по значению фильтрационного расхода. Число трещин по обоим направлениям колебалось от 20 до 80, что, как известно, удовлетворяет условиям сплошности среды при фильтрационных построениях. Варьируемыми характеристиками каждой из систем являлись плотность трещин, их средняя длина и раскрытие, а также стандартные отклонения от этих величин; в отдельных вариантах изменялась и ориентация систем относительно направления потока, ибо значение этого фактора априорно предполагалось весьма существенным. Стохастический анализ процесса потребовал до 300 численных реализаций для каждого варианта оценок.

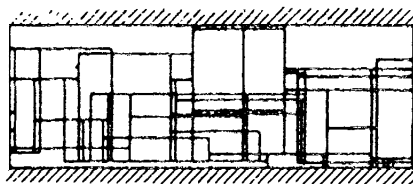


Рис. 8.1. Структура модели трещиноватой среды [8]

Основные выводы работы [8] сводятся к следующему:

1) с уменьшением длины трещин первой системы (ориентированной вдоль потока) сокращалась скорость продвижения индикатора и увеличивалась ее дисперсия (или, что то же самое, дисперсия времени нахождения индикатора в пласте σ_f);

2) даже при квазиодномерном характере фильтрационного течения существенное влияние на действительную скорость массопереноса оказывают характеристики системы трещин, ориентированных не только по потоку, но и вкрест него. Так, при той же проницаемости среды относительное увеличение раскрытия или длины поперечных трещин сокращало время достижения меченными частицами выходной границы среды, особенно для последнего участка выходной кривой, при одновременном росте σ_f . Этот результат еще раз подчеркивает важную роль поперечного обмена веществом между отдельными трещинами при массопереносе;

3) при резких различиях в значениях раскрытия или длины трещин двух систем заметное влияние на характер выходных кривых оказывает ориентация этих систем относительно направления потока; данный результат может интерпретироваться как проявление фильтрационной анизотропии не только по проницаемости, но и по емкостным свойствам;

4) при одинаковой плотности (n_1 и n_2) трещин в двух системах ($n_1 = n_2 = n$) сохраняется полное подобие в характере индикаторных графиков $c(t)$ (рис. 8.2, а) независимо от абсолютных значений n ; сокращение числа трещин в продольном направлении $n_1 < n_2$ (рис. 8.2, б, кривая б) и, как следствие, уменьшение продольной проницаемости пород сразу же увеличивает время регистрации средних значений концентрации на выходе из области а к изменению параметра n_2 процесс менее чувствителен (кривая 5 на рис. 8.2, б);

к качественно подобным результатам приводит варьирование средней длины трещин;

5) анализ выявил также слабую чувствительность процесса к изменению коэффициента вариации (σ_g) раскрытия трещин при его низких значениях ($\sigma_g \leq 0,1$): рост параметра σ_g (до 0,2 и более) приводит к некоторому дополнительному размыву концентрационного фронта, однако более важно, что при этом наблюдается существенное замедление скорости его перемещения; данный вывод дополняет оценки, полученные в рамках моделей трещиноватых сред упорядоченного строения (см. разд. 3.2).

Отметим, что утверждение [8] о слабом влиянии на результат способа запуска меченных частиц вызывает сомнение: вероятнее всего, запуск по большой ширине потока, хотя бы в несколько раз превышающей характерное расстояние между трещинами, должен значительно сокращать дисперсионные показатели выходных кривых и несколько уменьшать время движения индикатора в пласте.

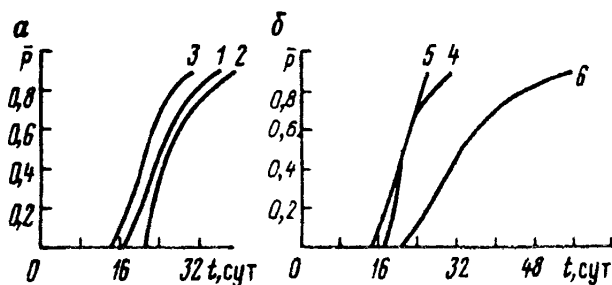


Рис. 8.2. Влияние количества горизонтальных (n_1) и вертикальных (n_2) трещин на характер распределения частиц ($\bar{p}$) на выходной границе модельной области: 1 - $n_1 = n_2 = 40$; 2 - $n_1 = n_2 = 20$; 3 - $n_1 = n_2 = 60$; 4 - $n_1 = n_2 = 60$; 5 - $n_1 = 60, n_2 = 20$; 6 - $n_1 = 20, n_2 = 60$

В целом, если статистические параметры распределения в двух системах трещин достаточно близки, то при больших размерах пласта миграционный процесс приобретает диффузионный характер. Этот процесс может описываться на базе усредненной конвективно-дисперсионной модели с

расчетным параметром микродисперсии δ_L^* , примерно отвечающим среднему расстоянию между водопроводящими трещинами.

В последнее время исследования на стохастических моделях распространились и на трещиноватые среды с каналовым механизмом миграции.

Для обобщенного учета этого механизма предлагается [5] модель параллельных каналов различного раскрытия, коррелированного по длине l . Время миграции t в такой модели оказывается обратнопропорциональным квадрату раскрытия: $t \sim 1/b^2$, а при наличии поверхностной сорбции $t \sim 1/b^3$. Наиболее сильно влияющий параметр данной модели — вариация раскрытия σ_θ (или $\sigma_{l\theta}$). Так, отмечено, что с ростом $\sigma_{l\theta}$ расход потока убывает, поскольку растет относительная значимость мелких трещин.

С другой стороны, моделирование показало [12], что в сильно гетерогенных системах с каналовым механизмом миграции среднее время миграции и его стандартное отклонение являются независимыми друг от друга, т.е. традиционные показатели δ и Re не могут считаться параметрами, их отражающими; к тому же, среднее время очень сильно зависит от характера неоднородности близости от входной границы. Сравнение моделей для непересекающихся каналов и диффузионной показывает исключительную важность правильной оценки смоченной (доступной для воды) поверхности трещин и каналов. Если эта поверхность сорбирует или доступна для внутриматричной диффузии, то расхождение упомянутых двух моделей особенно велико.

Пожалуй, наиболее интересные результаты по этой проблеме, полученные численными экспериментами, опубликованы в работе [6]. Здесь изучалась трехмерная сильно гетерогенная среда с каналовым механизмом миграции при постепенном возрастании коэффициента вариации логарифма проницаемости (σ_{lgk}) вплоть до значений порядка 5. При больших величинах σ_{lgk} выявлен эффект «сверхпроводимости», — ускоренная миграция

по наиболее крупным каналам. У этого эффекта было свое расчетное распределение проницаемости, отличное от заданного на модели, — с большим средним значением и меньшим коэффициентом вариации. Авторы утверждают, что это распределение не зависело от градиента и направления потока. Описать поведение системы традиционным параметром макродисперсивности не удалось. При $\sigma_{lgt} > 4$ на выходной кривой отмечено два пика концентрации, первый из которых, сравнительно кратковременный, отвечает «сверхпроводящим» элементам системы, а второй — всей совокупности ее элементов. Нам кажется важным подчеркнуть, что диффузионный (или сорбционный) диссипативный механизм был в этом исследовании априорно опущен, что, несомненно, во многом предопределило столь гетерогенное поведение изучавшейся среды.

В заключение отметим, что практически во всех описанных примерах результаты, получаемые в различных модельных экспериментах, дают заметный разброс даже для эквивалентных статистических выборок, причем фиксируемые распределения малых значений относительной концентрации оказываются практически непрогнозируемыми. Здесь мы вплотную подошли к важному вопросу исследования гетерогенных систем, связанному с анализом чувствительности, который заслуживает отдельного рассмотрения.

8.1.2. Анализ чувствительности на стохастических моделях гетерогенных сред с неупорядоченной структурой

К полученным выше результатам мы пришли, ограничившись, по существу, рассмотрением единичных реализаций моделей гетерогенных сред. Обращение к многовариантным реализациям, параметры которых изменяют-

ся целенаправленным образом, позволяет вывести исследование процесса на уровень анализа чувствительности. При этом надо понимать, что в рамках такого подхода суммарная макродисперсия потока учитывает разницу траекторий частиц ансамбля вариантов, а не макродисперсионное распространение единого ореола. Неопределенность ансамбля ограничивает нашу способность предсказать направление движения ореола и степень разбавления в данной точке. По этим причинам каждый конкретный вариант расчета может на деле очень сильно отличаться от среднего (ансамбля), особенно вблизи источника поступления вещества. Имея это в виду, рассмотрим результаты работы [10], которая является наиболее иллюстративной в этом плане.

Фильтрационное поле задавалось варьированием показателей (компонент) проницаемости среды K_x и K_z (профильная модель), которые образовывали множества, взаимно коррелирующие между собой в пространстве. Пористость n также являлась стохастически распределенной величиной, коррелирующей с K_x и K_z . Предполагалось, что проницаемость и пористость соответственно распределены логарифмически нормально и нормально:

$$Y_x = \log K_x = N [\mu_{Y_x}, \sigma_{Y_x}], \quad Y_z = \log K_z = N [\mu_{Y_z}, \sigma_{Y_z}], \\ n = N [\mu_n, \sigma_n],$$

где μ — средние значения параметров; σ — стандартные отклонения параметров (или их логарифмов). Стохастическую модель определяют также характерные масштабы ковариационных функций l_x и l_z , отвечающие расстояниям (в том или ином направлении), на которых значения соседних зон проводимостей положительно коррелируют. Наконец, для стохастического отражения ионообменных свойств среды в модель вводились показатели, характеризующие изменчивость в пространстве общей емкости Q_v катионного поглощения (величина, коррелирующая с пористостью и проницаемостью среды).

Рис. 8.3. Структура модели гетерогенной пористой среды [10].

Стрелкой показана зона ввода индикатора



Для стохастической модели, описываемой при помощи перечисленных характеристик, свойственна большая степень изменчивости местных (локальных) особенностей пространственной структуры среды, обнаруживаемая в различных модельных реализациях. Эта свобода обуславливает существенную неопределенность при прогнозировании массопереноса, так что соответствующие оценки разумно увязывать с конкретной (типовой) гидрогеологической схемой.

Основные результаты, также заимствованные из работы [10], получены на профильной двумерной модели, на которой имитировался массоперенос в безнапорном фильтрационном потоке (рис. 8.3). Ввод конечной массы вещества с эквивалентным ей количеством переносимых частиц производился вблизи входной (питающей) границы потока на некоторой фиксированной глубине ниже уровня подземных вод.

Движущиеся частицы, прослеживаемые в пределах рассматриваемого фрагмента пласта, в зависимости от времени их миграции, имеют ту или иную вероятность появления в любом сеточном блоке модели. Поэтому по всей совокупности модельных реализаций графически могут быть построены изолинии, которые соединяют блоки, характеризующиеся равной вероятностью обнаружения в них меченных частиц. Эти изолинии оконтуривают зоны, размер и расположение которых отражают неопределенность прогнозирования пространственного распределения вещества.

Кроме того, в качестве целевых функций при анализе чувствительности в данном примере рассматривались частичные распределения, характеризующие:

1) положение зоны, в пределах которой наблюдался вынос вещества на водную поверхность;

2) время достижения этой поверхности веществом в тех или иных концентрациях;

3) ранний «прорыв», когда вынос вещества при отдельных реализациях происходил на поверхность грунтового потока гораздо выше участка его естественной разгрузки. Считалось, что стан-

дартное отклонение от средних значений этих частотных распределений обобщенно определяет меру неточности при прогнозировании.

При анализе результатов необходимо иметь в виду особенности динамики концентрационных контуров в отдельных реализациях. Последние могут давать как одиночные ореолы, так и ореолы с множественными контурами, причем существование тех или иных типов ореолов не может быть априорно предсказано, исходя из вероятной структуры гетерогенной среды: характер процесса определяется протяженностью и расположением зоны инъекции вещества, а также характером корреляции и особенностями расположения элементов неоднородностей.

Наблюдавшийся перенос вещества происходил в основном по обособленным траекториям, положение которых зависело от взаимосвязанности зон с более высокой проницаемостью. Важно, что траектории частиц, отражающие тенденцию к соединению этих зон, обуславливают возникновение между ними корреляционных связей, существенно более тесных, чем это следует из корреляционных зависимостей для поля проницаемости модели в целом. Поэтому фиксацию зон преобладающего переноса следует считать главным требованием к изысканиям, обеспечивающим повышенную точность последующего гидрогеохимического прогнозирования. С другой стороны, отмеченные особенности процесса еще раз подчеркивают необходимость детального описания конвективной составляющей массопереноса. Наконец, важно подчеркнуть, что решение на данном шаблоне двумерного уравнения конвективной дисперсии с эффективными параметрами для эквивалентной гомогенной среды не дало распределений вещества, достаточно близких к концентрационным картинам, полученным в стохастической постановке задачи.

На первом этапе анализа чувствительности моделировалась гидравлически изотропная среда: значения проницаемости по напла-

стованию и вкрест равны в каждом отдельно взятом блоке $K_x = K_z$ (при этом, естественно, средние значения μ_{yx} и μ_{yz} также равны).

Моделирование показало, что по мере увеличения стандартного отклонения логарифмов проницаемости (σ_y), среднее положение центра поступления частиц к водной поверхности сдвигается против потока, причем массовые (концентрационные) распределения захватывают большие области на этой поверхности. С ростом σ_y увеличивается вероятность раннего прорыва (когда вещество появляется на поверхности грунтовых вод в точках с координатами $x < 150$ м), а время первоначального поступления вещества к водной поверхности значительно сокращается (при одновременном увеличении статистической дисперсии этого показателя). По мере роста σ_y вычисленное максимальное значение массы вещества в зоне разгрузки уменьшается.

Отмеченные закономерности, нашедшие отражение на рис. 8.4, могут быть объяснены стремлением массы вещества к большей дисперсии, которое отмечается с ростом σ_y , что понятно и в свете аналогии с макродисперсией в детерминированных системах. Из рис. 8.4 следует, например, что расширение 0,1 %-ного контура и сокращение 2 %-ного контура областей вероятностей наступает при небольшом изменении σ_y . В частности, обширная область потока, ограниченная 0,1 %-ным контуром при $\sigma_y = 0,73$ (для $t = 18500$ сут) означает, что вероятность надежного предсказания положения изолиний концентрационного фронта для данной системы крайне мала. Судя по материалам моделирования, только для среды с показателем $\sigma_y = 0,10$ отмечаются признаки хорошей предсказуемости поведения: в этом случае наблюдалась незначительная изменчивость в характере переноса от одной реализации к другой, причем ни в одной из них не отмечалось раннего прорыва.

Влияние изменения характерных размеров интегрального масштаба корреляционной функции проницаемости l_x и l_z на поведение частотных функций оценивалось при постоянном значении $\sigma_y = 0,5$. Эти оценки показали, что увеличение l_x (при $l_z = \text{const}$) приводит к уменьшению среднего времени первоначального поступления частиц к водному зеркалу, но одновременно увеличивает статистическую дисперсию этого времени и, наоборот, среднее время увеличи-

вается с ростом l_z (при $l_x = \text{const}$). Таким образом, увеличение отношения l_x/l_z приводит к ограничению масштабов поперечной макродисперсии — вывод, достаточно очевидный из общих физических представлений.

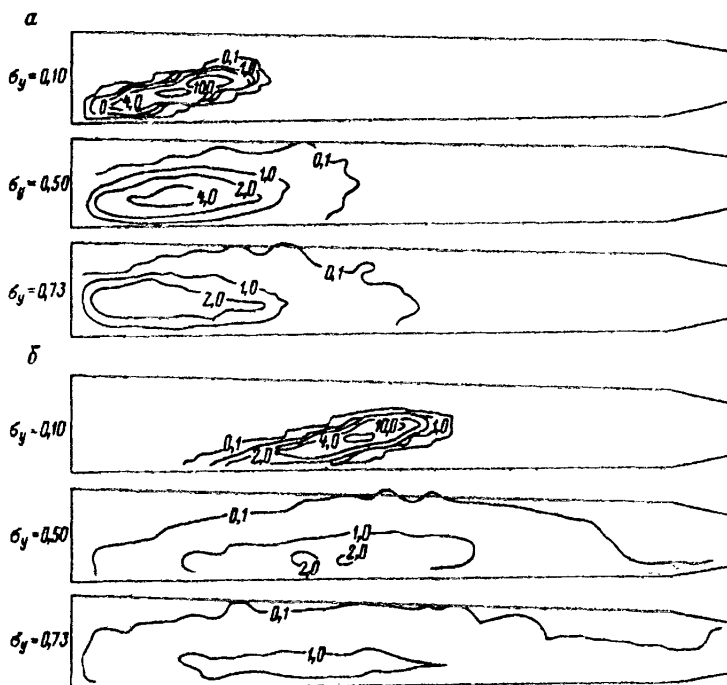


Рис. 8.4. Контурные области вероятности [10], показывающие влияние стандартного отклонения логарифмов гидравлической проницаемости на точность прогнозирования.

Построены на расчетные моменты времени $t_1 = 6500$ сут. (а) и $t_2 = 18500$ сут. (б)

Далее анализ чувствительности выполнялся на моделях стохастических сред, для которых характерно равенство математических ожиданий компонентов проницаемости $\mu_{Y_z} = \mu_{Y_x}$, но возможно несовпадение значений K_x и K_z в каждом отдельно взятом блоке (при $\sigma_{Y_x} = \sigma_{Y_z}$). Выводы этого анализа совпадают с результатами,

приведенными выше, что свидетельствует об относительно слабой чувствительности процесса к частным вариациям коэффициента локальной анизотропии ($\alpha_l = K_z/K_x$).

От данного результата заметно отличаются оценки, полученные для анизотропных сред, когда $\mu_{y_x} \neq \mu_{y_z}$. Эти оценки показали, что снижение вертикальной проницаемости ($\mu_{y_z} < \mu_{y_x}$) уменьшает неопределенность миграционных прогнозов. На это, в частности, указывают низкие значения стандартного отклонения распределения массы вещества вдоль водного зеркала и незначительная вероятность раннего прорыва, отмечающиеся в сильно анизотропных средах. Иными словами, анизотропия обычно (при $K_x > K_z$) сглаживает влияние мелкомасштабной неоднородности, так что пространственное распределение концентрации лучше поддается прогнозированию.

В цитируемой работе оценивалось также влияние на модельные результаты стохастического характера распределения пористости среды и емкости катионного поглощения — параметров, коррелирующих (как с положительной, так и с отрицательной связью) с полем проницаемости. Во всех вариантах влияние изменчивости этих параметров на модельные решения оказалось вторичным по сравнению с пространственной изменчивостью проницаемости.

В целом, приведенные в данном разделе результаты свидетельствуют об эффективности исследования закономерностей массопереноса на стохастических моделях для оценки порядка надежности последующих миграционных прогнозов. В частности, анализ чувствительности подтверждает значимость априорных геологических представлений в снижении степени неопределенности прогноза. К ним относятся достаточно выраженная слоистость и профильная анизотропия водоносной толщи, которые во многом контролируют размеры области вероятного распространения вещества.

Одним из путей повышения надежности прогнозов является внесение элемента детерминированности в стохастические модели. Так, целесообразно фиксировать на модели зоны с высокой проводимостью (выделяемые не-

зависимыми способами), сохраняя их пространственное положение неизменным во всех модельных реализациях. С этой же точки зрения, разумно осуществлять предварительную стратификацию изучаемой толщи, выделяя в ней слои, которые, исходя из тех или иных геологических соображений, могут различаться стохастическими показателями распределения фильтрационных свойств. В противном случае можно ожидать существенных погрешностей прогноза, причем они будут обусловлены не только ошибками непосредственно усреднения (точнее, введения единого среднего вместо значений математического ожидания), но и отвечающими такому усреднению погрешностям стандартного отклонения показателя рассеяния, вводимого вместо послойных его значений.

8.2. Исследование на математических моделях простейших физико-химических взаимодействий при миграции подземных вод

Включение равновесных физико-химических взаимодействий в аналитические модели миграции может базироваться на использовании простейших модификаций метода характеристик (см. разд. 7.1.8). Главным ограничением, снижающим эффективность такого рода исследований, является пренебрежение в них рассеивающими эффектами, обусловленными либо гидродинамической дисперсией, либо проявлением внутренней гетерогенности водоносных комплексов.

Обращение к разностным схемам (в том числе в сочетании с методом характеристик) снимает данное ограничение, но искусственно усиливает дисперсионный режим массопереноса — благодаря возникающим численным эффектам; именно трудности их контроля при резко нелинейном характере исследуемых процессов вынуждают подчас относиться к приводимым ниже результатам как к сугубо качественным.

8.2.1. Ионообменные процессы

8.2.1.1. Ионный обмен при миграции в комплексах гомогенных пород

Алгоритм численного решения исходит из системы дифференциальных уравнений (6.15), преобразованной к виду (6.17). С помощью метода расщепления легко получить двумерное представление этих уравнений (см. разд. 7.1.3), используемое нами, в частности, для анализа ионного обмена в гетерогенных средах.

В рамках одномерных моделей при постоянных граничных условиях оценивалось влияние на перенос продольной гидродисперсии — механизма, трудно учитываемого при аналитических построениях. Роль данного механизма неоднозначна: с одной стороны, гидродисперсия приводит к прямому размыву катионных фронтов, а с другой, обуславливая рассеяние анионов, текущие концентрации которых контролируют эффективную емкость среды [см. зависимости (6.16) и (6.17)], влияет на интенсивность перемещения этих фронтов и на их форму.

Вместе с тем, модельные решения, полученные в широком диапазоне критерияльного числа Пекле ($5 < Pe < 100$), показали их близость к аналитическим расчетам, — если говорить о погрешностях в оценках положения на восходящих и нисходящих ветвях индикаторных графиков характерных точек с относительной концентрацией $\bar{c} = 0,5$, которые могут соотноситься с расчетными координатами фронтов поршневого вытеснения (рис. 8.5). Во всех случаях эти погрешности не превышали 6-8 % при изменении безразмерного параметра $K^* = K_{12}Q_v / Z_0c_{00}$ в диапазоне 0,01-10 (K_{12} — коэффициент селективности, Q_v — емкость обмена, c_{00} и Z_0 — концентрация катиона и его заряд). То же самое можно сказать о сопоставимости пиковых значений концентраций катионов в пределах переходных зон де-

сорбции вытесняемого катиона с расчетными значениями $c_1^p(c_2^p)$. Таким образом, наблюдаемое гидродисперсионное «размывание» фронтов (даже с учетом дополнительной «численной дисперсии») и соответствующее сглаживание экстремумов концентрационных функций не вносит принципиальных изменений в характер полученных ионных распределений, так что в масштабе прогнозных (региональных) задач этими эффектами, по всей видимости, можно пренебречь.

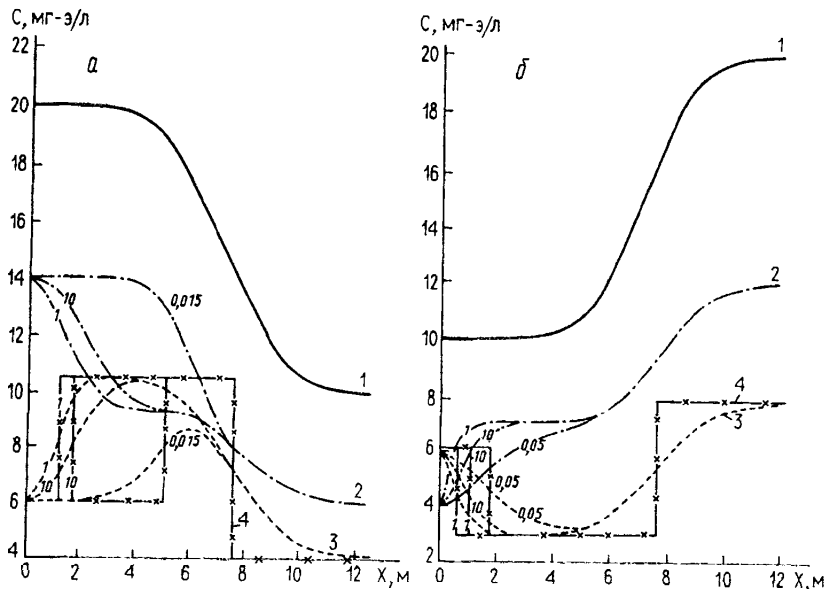


Рис. 8.5. Результаты численного моделирования и аналитических расчетов массопереноса с учетом ионного обмена при различных условиях:

а) $c_{00} = 20$; $c_0^0 = 10$, $c_{10} = 6$, $c_1^0 = 4$ мг-экв/л; б) $c_{00} = 10$, $c_0^0 = 20$, $c_{10} = 6$, $c_1^0 = 8$ мг-экв/л, $Z_1 = 2$, $Z_2 = 1$, $Q_V = 10$ мг-экв/дм³, $v = 0,5$ м/сут., $n = 0,1$, $D = 0,09$ м²/сут., $t_{расч.} = 1,5$ сут.;

концентрационные профили: 1 - анионов; 2 - вытесняемого катиона; 3 - вытесняющего катиона (данные моделирования); 4 - вытесняющего катиона (расчеты по схеме поршневого вытеснения). Числа на графиках отвечают параметру нелинейности изотермы $k^* = k_{12} q_0 / c_{00}$

На одномерных же моделях, но при переменных во времени граничных условиях исследовалась роль «шоковых» эффектов [2], которые возникают при взаимодействии концентрационных волн, перемещающихся в пласте с различными скоростями.

Закономерности формирования задней концентрационной волны вытесняющего катиона (обмен 1:1 при $K_{12} = 1$ — линейная изотерма) показаны на рис. 8.6. Краевые условия для данного примера описывают случай повторного засоления пласта: максимальные значения ($c_1^0 = 8$, $c_0^0 = 20$, $c_2^0 = 12$ ммоль/л) соответствуют начальным условиям, а также граничным, задаваемым спустя 10 сут, в течение которых на границе пласта поддерживались концентрации $c_{10} = 6$, $c_{00} = 10$, $c_{20} = 4$ ммоль/л (численные значения миграционных параметров приведены на рис. 8.6).

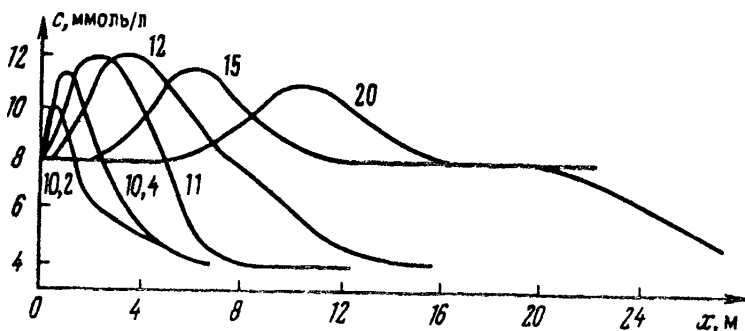


Рис. 8.6. Особенности формирования тыловой концентрационной волны (c_1) при «пакетном» входном сигнале.

Номера кривых - время t в сутках; $v = 0,5$ м/сут.; $D = 0,09$ м²/сут.; $Q_V = 10$ ммоль/л; $\Delta x = 0,3$ м; $\Delta t = 0,01$ сут. (дискретизация модели по пространству и времени)

Анализ кривых $c_1(x, t)$ показывает, что в областях концентрационных экстремумов, обусловленных ионообменной десорбцией, эффекты механической дисперсии проявляются по-разному; в первые моменты времени после отключения источника загрязнения пиковые концентрации катионов оказываются сильно заниженными; затем, со временем, они возрастают, достигая максимума

[отвечающего теоретическому значению c_1^p — см. формулу (6.19)], т.е. в данном примере в момент наложения двух волн гидродисперсия не оказывает существенного влияния на распределение c_1 . Понятно, однако, что по мере дальнейшего развития процесса, экстремумы концентрационных кривых вновь начнут сглаживаться.

Характер концентрационных распределений еще больше усложняется при ионообменной сорбции катионов, описываемой нелинейными изотермами. Поэтому обращение к численным методам исследования подобных задач миграции оказывается безусловной необходимостью.

Основные закономерности двумерного рассеяния обменивающихся катионов иллюстрируются модельным примером на рис. 8.7. Прежде всего, видно, что на удалении от постоянно действующего концентрационного источника поле распределения катионов, представленное изолиниями абсолютных значений их концентраций, слабо зависит от входной концентрации c_{10} . Это может быть объяснено тем, что после достижения равновесия, характеристика c_1^p которого не зависит от величины c_{10} , катионы переносятся далее инертно, не взаимодействуя с породой.

Сопоставление полученного распределения c_1 с полем концентраций инертных компонентов (при различных c_{10}) показывает, что расчетная скорость смещения изолиний концентраций катионов контролируется отношением $\bar{c}_m = c_{10}/c_1^p$: при $\bar{c}_m < 1$ ионный обмен, приводящий к выходу вытесняющего катиона из обменного комплекса породы, может трактоваться как процесс, интенсифицирующий миграцию вещества, поскольку он обуславливает более высокую скорость смещения изолиний $(c_1)_i$ по сравнению с инертным компонентом при том же значении c_{10} ; и, наоборот, при $\bar{c}_m > 1$ ионный обмен может рассматриваться как процесс, локализуемый ореол рассеяния вблизи источника. Впрочем, подобное поведение модельных функций понятно и в свете аналогии с одномерным переносом, дающим, однако, более выраженные экстремумы на

графиках распределения катионов c_1 в сравнении со случаем двумерной дисперсии, обуславливающей плавные изменения концентрационных функций по анионам (рис. 8.8).

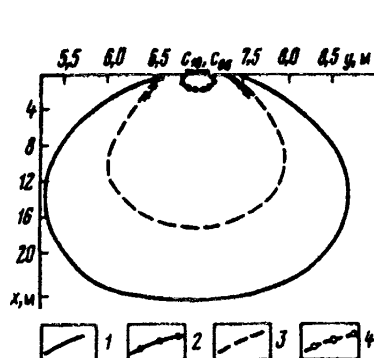


Рис. 8.7. Двумерный ореол рассеяния при гомовалентном (1:1) линейном обмене.

Изолинии c_1 , равные 4,75 моль/л, построены на момент времени $t_p = 5$ сут: 1 и 2 для инертного компонента при $c_{10} = 12$ и 6 моль/л; $v = 0,05$ м/сут.; $n = 0,01$; $D_x = 0,05$ м²/сут.; $D_y = 0,0025$ м²/сут.; $Q_y = 10$ моль/л; $c_0 = 10$, $c_1^0 = 4$ моль/л

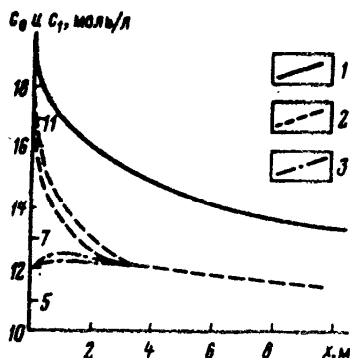


Рис. 8.8. Распределение концентраций анионов (1) c_0 и катионов (2,3) c_1 по оси ($y = 0,125$ м) планового ореола (обмен 1:1 при $k_{12} = 1$).

Распределение катионов при $c_{10} = 12$ и 6 моль/л; $v = 0,05$ м/сут., $n = 0,01$, $D_x = 0,05$ м²/сут.; $D_y = 0,001$ м²/сут.; $Q_y = 10$ моль/л; $c_0^0 = 10$, $c_1^0 = 4$ моль/л; $t_p = 5$ сут.

Во всех модельных примерах длительная миграция приводила к образованию квазистационарных ореолов рассеяния ионов, причем соответствующие распределения по катионам устанавливались значительно медленнее, чем по анионам. Заметим еще, что в зоне квазистационарного режима характер концентрационных полей не зависит от емкостных и массообменных параметров среды.

8.2.1.2. Ионный обмен при миграции в комплексах гетерогенных пород

Для исследования на численных моделях ионообменных процессов в гетерогенных средах нами использован общепринятый подход — аппроксимация трещиновато-пористых пород условной расчетной средой, состоящей из правильно чередующихся хорошо- и слабопроницаемых слоев: первые имитируют трещины, в которых преобладает конвективный механизм переноса, а вторые — пористые блоки, где доминирует молекулярно-диффузионный режим, осложненный реакциями ионного обмена. Хотя полной аналогии между массообменными процессами в трещинно-блочной и слоистой среде нет, подобное приближение мало сказывается на достоверности собственно физико-химических интерпретаций.

В данном разделе на основе модельных решений рассматриваются особенности миграции обменивающихся катионов в рамках традиционно выделяемых режимов массообмена, которым отвечают три предельные расчетные схемы — неограниченной емкости, сосредоточенной емкости и асимптотического квазигомогенного режима (см. разд. 3.2.1). Очевидно, что критерии их применимости близки к соотношениям, полученным для инертных компонентов. Это объясняется тем, что процесс диффузионного насыщения породных блоков катионами контролируется скоростью проникновения анионов, для которых и были получены упомянутые соотношения.

В качестве общих для ряда тестовых задач нами были приняты следующие параметры: $v_x = 0,055$ м/сут; $v_z = 0$; $D_x = 0,06$ м²/сут; $D_z = D_m = 0,05$ м²/сут; $n = 0,01$; $n_0 = 0,1$; $m = m_0 = 0,4$ м; $Q_v = 10$ мг-экв/дм³ (обменная емкость диффузионно насыщенного слоя); граничные условия: $c_{00} = 20$, $c_{10} = 6$ и $c_{20} = 14$ мг-экв/л; начальные условия: $c_0^0 = 10$, $c_1^0 = 4$ и $c_2^0 = 6$ мг-экв/л. Далее в тексте особо оговариваются лишь не указанные здесь параметры. Анализируется

преимущественно поведение вытесняющего катиона (текущая концентрация c_1).

Анализ процесса начнем с рассмотрения его начальных этапов, для описания которых в гидродинамической теории миграции (пренебрегающей физико-химическими взаимодействиями) получены наиболее строгие аналитические решения.

Характерные особенности миграции двухкомпонентного раствора при «нулевых» начальных условиях иллюстрируются на рис. 8.9 (на модели задавались значения, мг-экв/л: $c_0^o = c_2^o = 1, c_1^o = 0, c_{00} = 20, c_{10} = c_{20} = 10$). Из графиков следует, что закономерности распространения ионов по трещинам при гомовалентном обмене хорошо согласуются с физическими представлениями. Так, сравнение кривых показывает, что при линейной ($K_{12} = 1$) обменной сорбции в блоках происходит замедление переноса вытесняющих катионов c_1 по сравнению с переносом инертного компонента. Такая же картина наблюдается и для обмена по выпуклой изотерме ($K_{12} = 20$), причем катионы c_1 перемещаются по трещинам медленнее, чем при линейном обмене. Последнее обусловлено поддержанием повышенных концентрационных градиентов в пористой матрице, что интенсифицирует ее насыщение веществом из трещин. И, наоборот, при вогнутой изотерме ($K_{12} = 0,15$) выполаживание концентрационного профиля в блоках замедляет поступление в них катионов из трещин, ускоряя миграционный процесс.

Одновременно численное моделирование подтвердило возможность определения положения и формы концентрационных фронтов обменивающихся катионов при линейной изотерме обмена на базе представленных в разд.3.2 зависимостей. Для этого необходимо в последних заменить пористость n на эффективную емкость блоков согласно формуле (6.2), где $\Delta n = q_{10}/c_{10}$. При нелинейной изотерме обмена этот подход не всегда приводит к удовлетворительному результату, так что обращение к моделированию оказывается обязательным.

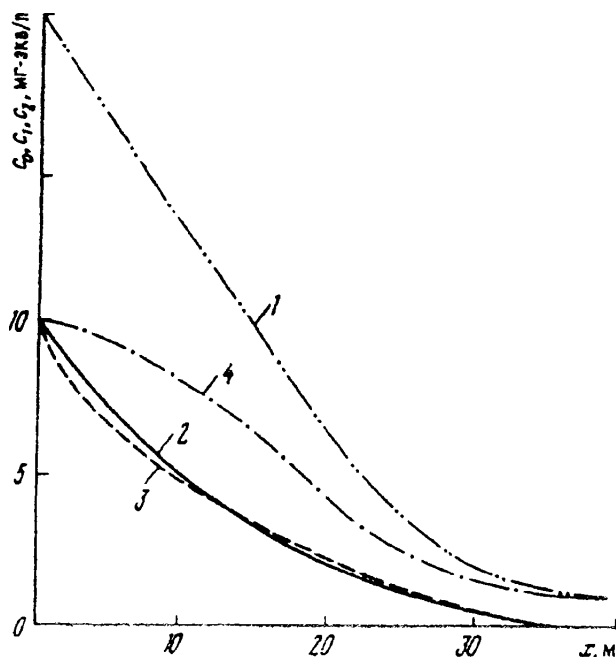


Рис. 8.9. Характер концентрационных кривых на начальных этапах миграции при нулевых начальных условиях ($t = 5$ сут., $D_M = 5 \cdot 10^{-3} \text{ м}^2/\text{сут.}$):

1 - анионы (C_0); 2 - вытесняющий катион (C_1) при $k_{12} = 1$ и $Q_V = 10 \text{ мг-экв}$; 3 - вытесняемый катион (C_2)

Еще менее надежны аналитические оценки ионообменных процессов при «ненулевых» начальных условиях (рис. 8.10). Ясно, что в этой ситуации форма концентрационного профиля трещинных растворов (в слое 1) будет определяться значением равновесной концентрации C_1^P в блоках (в слое 2), где происходит химическое взаимодействие обменивающихся катионов. При этом не исключено, что встречная диффузия катионов из блоков, обусловленная их десорбцией при нарушении исходного термодинамического равновесия

(концентрационный градиент приобретает обратную направленность), приведет к потере монотонности искомым концентрационными распределений не только в блоках, но и в трещинах. Именно этот эффект иллюстрируют приведенные на рис. 8.10 концентрационные профили вытесняющего катиона c_1 ($t = 5$ сут) для различных изотерм ионного обмена. Как видно, точки фронта этого катиона с фиксированными значениями концентраций c_1 перемещаются быстрее одноименных точек фронта инертного компонента (при равноценных граничных и начальных концентрациях), причем при выбранных параметрах максимальное опережение наблюдается для обмена 2:1 (двухвалентных катионов на одновалентные), а минимальное — для обмена 1:2. Поскольку объем пористой матрицы блоков в рассмотренных примерах намного превышает емкость трещин, то даже относительно незначительная доля катионов, выходящих из состава обменного комплекса породы, вызывает повышение их содержания в трещинах до значений, превышающих граничные концентрации. Понятно также, что скорость смещения концентрационных точек будет возрастать с увеличением c_1^P . Важно подчеркнуть, что предельная расчетная концентрация c_1^P в трещинах на рассматриваемых начальных этапах миграции не достигается.

«Нормальный» характер индикаторных графиков обуславливает выполнение условия $c_{10} > c_1^P$, свидетельствующего о том, что в блоках имеет место ионообменная сорбция. Поэтому, естественно, перенос катионов по трещинам замедляется в сравнении с передвижением инертного вещества.

Все сказанное остается, в основном, справедливым и для ионообменных реакций в гетерогенных системах, протекающих при квазистационарном режиме насыщения блоков (расчетная схема сосредоточенной емкости). При этом опережение фронта инертного компонента фронтом вытесняющего катиона при $c_{10} < c_1^P$ или замедление переноса обменивающихся катионов c_1 в сравнении с переносом физически инертного вещества при $c_{10} > c_1^P$ становится более заметным, чем в случае схемы неограниченной емкости, что показывают данные моделирования (см. рис. 8.11).

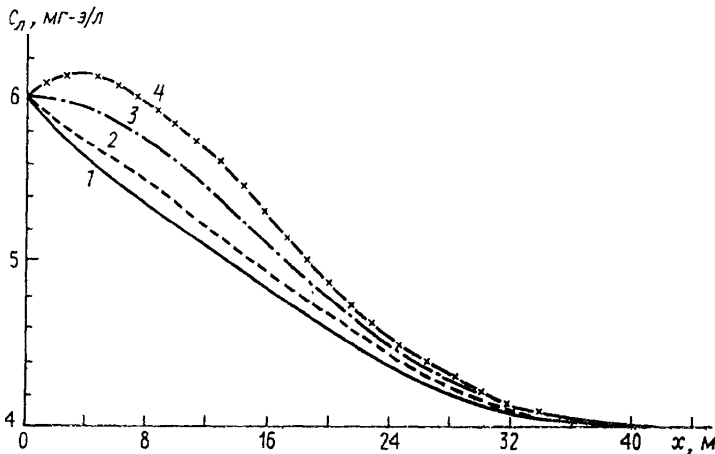


Рис. 8.10. Изменения концентрации вытесняющего катиона в трещинах для расчетной схемы неограниченной емкости трещиновато-пористого пласта:

1 - при отсутствии ионного обмена; 2-4 - при линейном ($k^* = k_{12}/c_{00} = 1$) обмене: 2 — $z_1 = 1, z_2 = 2$, 3 — $z_1 = z_2 = 1$ (или 2), 4 — $z_1 = 2, z_2 = 1$, $m = m_0 = 0,4$ м; $n_0 = 0,1$; $D_M = 5 \cdot 10^{-3}$ м/сут.; $n = 0,01$; $D_x = D_y = 0,06$ м²/сут.; $v = 0,055$ м/сут.; $t_{расч} = 5$ сут.; $c_1^0 = 4$; $c_2^0 = 6$, $c_0^0 = 10$ мг-экв/л (начальные условия); $c_{10} = 6$, $c_{20} = 24$, $c_{00} = 20$ мг-экв/л (граничные условия), $Q_v = 10$ мг-экв/дм³

По мере приближения к предельной квазигомогенной асимптотике, когда достигается высокая степень насыщения породных блоков ионами, теоретический анализ процесса упрощается. Как следует из рис. 8.11, на весьма длительных этапах массопереноса модельная кривая 2 подобна кривой 3, полученной на другой численной модели для эквивалентного гомогенного пласта с эффективными параметрами макродисперсии (n, D). При этом основные характеристики (положение фронтов $\bar{c}_{1,2} = 0,5$ и пиковые значения концентраций катионов $c_{1,2}^p$) получен-

ных модельных распределений стремятся к предельным значениям, рассчитываемым для квазигомогенного пласта по схеме поршневого вытеснения (кривая 4). Данные результаты не исключают возможность использования для описания физико-химических процессов (в определенных пространственно-временных диапазонах) предельных — асимптотических — расчетных схем, подобно тому, как это делается сейчас в механической теории миграции подземных вод.

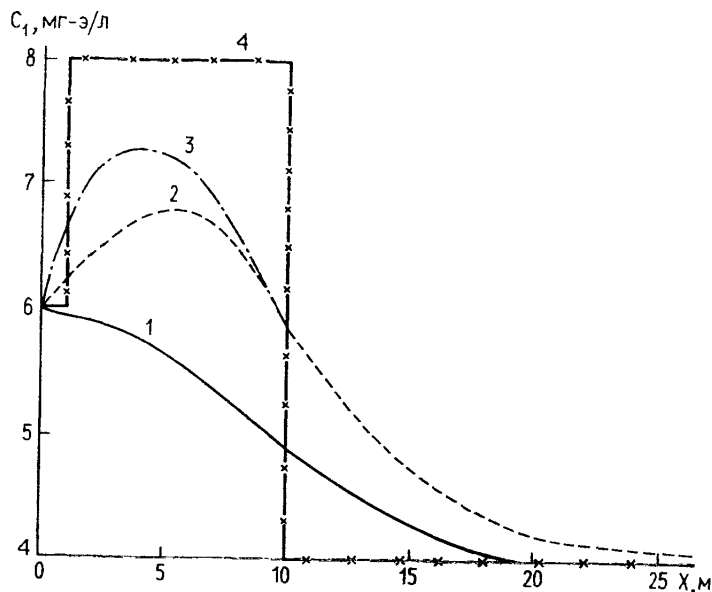


Рис. 8.11. Изменения концентрации вытесняющего катиона в трещинах (длительные периоды миграции в тещиновато-пористом пласте):

1 - при отсутствии ионного обмена; 2-4 - при линейном ($k^* = 1$) зонном обмене; 2 - точное модельное решение (при $z_1 = z_2 = 1$, $Q_v = 10$ мг-экв/ дм^3 , $n_0 = 0,1$, $D_M = 0,0176$ $\text{м}^2/\text{сут.}$, $v_x = 0,055$ $\text{м}/\text{сут.}$, $n = 0,01$, $D_x = D_y = 0,06$ $\text{м}^2/\text{сут.}$, $t = t_0 = 0,4$ м. , $t_{\text{расч}} = 20$ сут. , граничные концентрации - см. рис. 8.10); 3 - модельное решение для эквивалентного гомогенного пласта ($n^* = 0,0275$ $\text{м}/\text{сут.}$, $v^* = 0,055$, $D^* = 0,0675$ $\text{м}^2/\text{сут.}$); 4 - аналитический расчет для схемы поршневого вытеснения

8.2.2. Исследование процессов комплексообразования

Основное внимание уделялось исследованию влияния процессов комплексообразования на интенсивность массопереноса сорбирующихся компонентов. Как и в предыдущем случае, на численной модели имитировался массоперенос при низких числах Пекле, что позволило отразить особенности процессов в пределах переходных зон гидродисперсионного рассеяния (рис. 8.12).

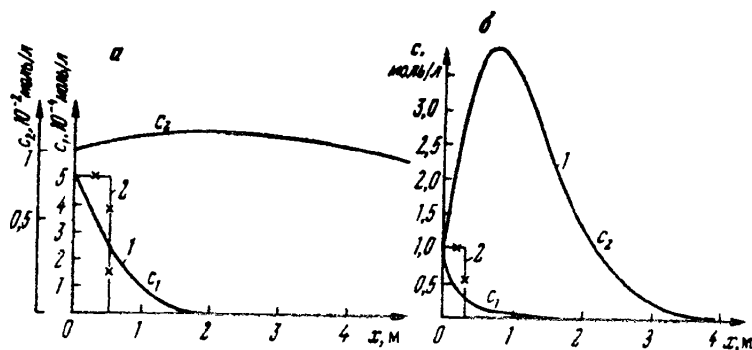


Рис. 8.12. Иллюстрация особенностей миграции катиона металла M_1 в присутствии комплексообразователя L_2 (нулевые начальные условия $C_1^0 = C_2^0 = 0$):

а) $C_{10} = 5 \cdot 10^{-4}$, $C_{20} = 1 \cdot 10^{-2}$ моль/л, $t_{расч} = 7$ сут.; б) $C_{10} = C_{20} = 1$ моль/л, $t_{расч} = 0,3$ сут. 1 - модельное решение, 2 - аналитический расчет для катиона - схема поршневого вытеснения при параметре Δn_1 , определяемом по формуле (6.40); Модельные параметры: $\gamma = 0,3$ м/сут.; $n = 0,3$; $D_{L1} = 0,15$ м²/сут.; $k_1 = 5 \cdot 10^{-3}$ л/моль; $Q_{ОН} = 5$ моль/дм³; $k_{121} = 10^{2,38}$, $k_{21} = 10^{1,98}$, $k_{22} = 10^{0,32}$, $k_{11} = 10^{3,04}$, $k_{12} = 10^{12,9}$, $k_{13} = 10^{15,01}$, $k_{14} = 10^{16,65}$, $pH = 3$

Анализ модельных решений показывает, что комплексообразование увеличивает общий потенциал массопереноса, способствует более высоким скоростям движения сорбирующихся катионов. Объяснение тому — нарушение физико-химического равновесия в растворе при сорбции свободных катионов, приводящее к распаду части комплексов, что обуславливает, в свою очередь,

поступление в раствор дополнительного объема катионов. Как видно на рис. 8.12, распад комплексов высвобождает лиганды, так что их концентрационные распределения приобретают экстремальный характер (фронт суммарной концентрации анионов в растворе остается монотонным). Таким образом, формируется, как и в случае ионного обмена, переходная зона с особым составом воды; значимость этого эффекта возрастает при прогнозировании миграции компонентов, способных давать комплексные соединения с различной степенью токсичности.

Интенсивное гидродисперсионное рассеяние анионов не приводит к принципиальным изменениям в форме катионных фронтов, поэтому текущее положение концентрационных точек $\bar{c} = 0,5$ достаточно надежно оценивается по схеме поршневого вытеснения при эффективной пористости, отвечающей выражению (6.2), в котором учитывается процесс комплексообразования согласно формуле (6.40).

8.3. Исследование на математических моделях некоторых особенностей радионуклидного транспорта в подземных водах

Прежде, чем перейти к собственно анализу миграционных процессов, полезно оценить уровень погрешностей, возникающих при их описании на сеточных моделях.

8.3.1. О точности сеточных решений высокоградиентных задач массопереноса

Данный класс миграционных задач связан прежде всего с проблемой исследования радионуклидного транспорта. Известно, что во многих случаях концентрации радионуклидов в источниках загрязнения $c_{\max}$ превышают предельно допустимые концентрации $c_{\text{ПДК}}$ на много порядков (иногда в 10^8 - 10^{10} раз). Это значит, что модельные оценки должны быть достаточно надежными, чтобы предсказывать концентрационные по-

ля, в пределах которых $c/c_{\max}$ часто ниже 10^{-10} . Данный предел не так легко достижим в рамках классических численных подходов [3].

Иллюстрацией к сказанному может служить пример расчета концентрационного поля, формируемого «точечным» источником, методом характеристик (МОС). Данный метод представляется наиболее надежным с позиций описания концентрационных фронтов с повышенной точностью (разд. 7.1.8).

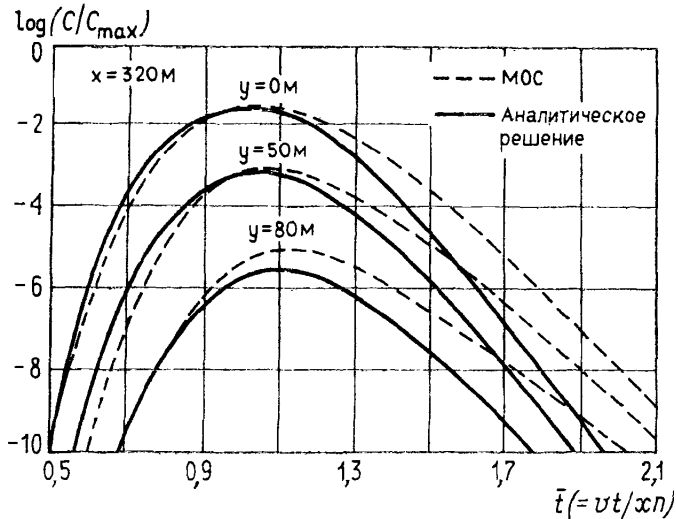


Рис. 8.13. Сравнение численного и аналитического решений для двумерного массопереноса от мгновенного «точечного» источника в одномерном фильтрационном поле.

Параметры модели: $\Delta x = 10$ м (размер блоков), $n = 0,1$, $u = v/n = 0,87$ м/сут., $\delta_L = 20$ м, $\delta_T = 0,5$ м

Рис. 8.13 отражает один из характерных вариантов такого расчета, выполненного с помощью компьютерной программы MT3D (разд. 10.5.2, [13]). Основные выводы, вытекающие из модельного анализа, следующие:

- 1) хорошее совпадение между численным и аналитическим решениями наблюдается вблизи центральной оси ореола ($y = 0$);
- 2) модельные ошибки существенно увеличиваются на периферии ореола, где отношение c/c_{max} становится меньше 10^{-6} – 10^{-7} ; соответствующие погрешности достигают порядковых величин;
- 3) было обнаружено, что частицы, характеризующие задний концентрационный фронт, движутся заметно медленнее, чем это предсказывается аналитическим решением.

В свете сказанного приводимые ниже результаты должны рассматриваться как достаточно приближенные — когда речь идет об области низких значений концентраций на передних фронтах ореолов загрязнения.

8.3.2. Исследование миграции радионуклидов в составе многокомпонентных растворов

Целью настоящего раздела является модельная оценка уровня возможных погрешностей, возникающих за счет упрощенных изотермических подходов к описанию сорбционных процессов в потоках подземных вод, — прежде всего, подхода, базирующегося на предпосылке о постоянстве коэффициента сорбционного распределения K_d . О причинах возможного несоответствия прогнозных (расчетных) и реальных концентрационных распределений, возникающих за счет вероятных колебаний величины K_d , уже говорилось ранее.

Для имитации миграционного процесса использовалась специально разработанная компьютерная модель многокомпонентного переноса MST1. В качестве гидрогеохимического блока модели использовалась хорошо апробированная программа расчета термодинамических равновесий в системе «вода—порода» MINEQL в версии SURFEQL (Bales, 1987) [1], позволяющей имитировать сорбцию компонентов на уровне реакций поверхностного комплексообразования (разд. 5.2.1.2). Среди традиционных реакций модель учитывает:

1) гидратацию и комплексообразование ионов в растворе;
 2) растворение/осаждение минералов;
 3) кислотно-щелочные и окислительно-восстановительные взаимодействия (контролируемые как гомогенными, так и гетерогенными процессами). Удобная система математической формализации химических реакций и доступная, легко обновляемая и корректируемая база термодинамических данных позволяют эффективно исследовать широкий круг гидрогеохимических преобразований.

Транспортный блок модели реализует численное решение системы одномерных дифференциальных уравнений конвективной дисперсии (см. разд. 7.3.1):

$$n \frac{\partial T_j}{\partial t} + \lambda_j n T_j + Q_j^T - L(T_j) = 0, \quad j = 1, \dots, N_c,$$

$$Q_j^T = \frac{\partial}{\partial t} \left[S_j + \sum_{k=1}^{N_P} a_{jk} P_k \right] + \lambda_j \left[S_j + \sum_{k=1}^{N_P} a_{jk} P_k \right], \quad (8.1)$$

$$T_j = c_j + \sum_{i=1}^{N_x} a_{ji} x_i,$$

$$L() = n D \nabla^2() - v \nabla(),$$

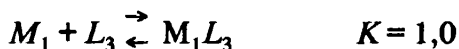
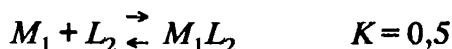
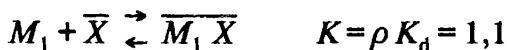
где c_j ($j = 1, \dots, N_c$) — концентрация базовых частиц, содержащих j -й компонент, x_i ($i = 1, \dots, N_x$) — концентрация x_i комплексов; S_j — концентрация компонентов в адсорбционном состоянии, P_k — концентрация осажденного или растворенного минерала (соли); a_{ij} — стехиометрический коэффициент (количество молей c_j на один моль x_i); a_{jk} — то же, для растворения/осаждения (количество молей базовых компонентов на моль вещества P_k); λ_j — константа распада.

Решение уравнений (8.1) осуществляется методом конечных разностей с использованием чисто неявной схемы и итерационной процедуры Гаусса-Зейделя с верхней релаксацией для ускорения сходимости итерационного процесса.

Объединение гидрогеохимического и транспортного блоков основывается на так называемом «двухшаговом» методе. В соответст-

вии с ним два блока программы работают последовательно: на первом шаге решаются уравнения конвективной дисперсии для каждого из компонентов в предположении об их консервативности; полученное концентрационное распределение используется для термодинамических (включая сорбционные) расчетов, в результате которых находятся концентрации всех миграционных форм и значения функции источника Q_j^T . Помимо сорбции, контролируемой реакциями поверхностного комплексобразования, при численных расчетах может моделироваться физическая сорбция, подчиняющаяся линейному закону Генри. При этом предполагается, что сорбируются только компоненты, мигрирующие в простейшей ионной форме, так что задаваемое количество коэффициентов распределения $K_{d,j}$ отвечает числу базовых компонентов.

В настоящее время выполнен первый этап тестирования программы MST1. Так, при отключении гидрогеохимического блока достигается хорошая сходимость результатов с аналитическими оценками для однокомпонентного переноса. Для проверки надежности расчетной процедуры, соединяющей гидрогеохимический и транспортный модули программы, рассматривался трехкомпонентный перенос: сорбирующийся компонент M_1 участвует в реакциях комплексобразования с лигандами L_2 и L_3 :



Результаты моделирования сравнивались с расчетами на программе SATRA-CHEM [4], реализующей одношаговый метод (рис. 8.14). Как видно, обе модели дают весьма близкие результаты; максимальные расхождения, наблюдаемые в области пиковых значений концентраций лигандов, не превышают 5 %. Немонотонный характер кривых объясняется распадом комплексов $M_1 L_2$ и $M_1 L_3$ вблизи фронта вытеснения за счет сорбции компонента M_1 , что приводит к нарушению равновесия и высвобождению анионов (L_2 и L_3).

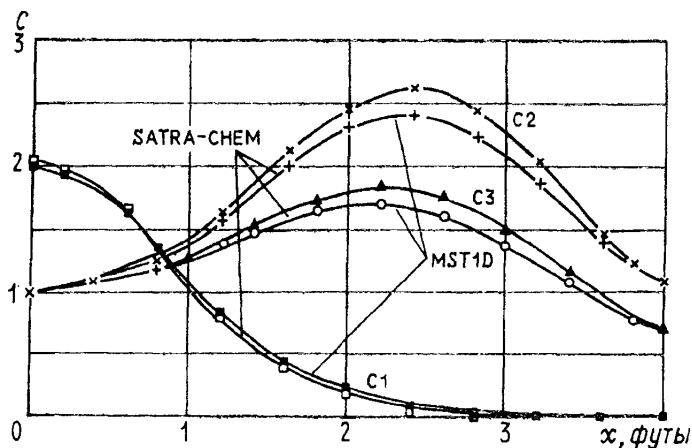


Рис. 8.14. Сравнение распределения концентрационных функций $c_1(x)$, $c_2(x)$ и $c_3(x)$, рассчитанных на программах MST1D и SATRA-CHEM

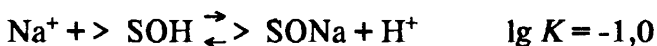
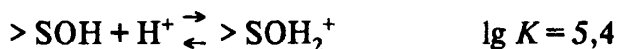
Далее программа MST1D использовалась для исследования некоторых аспектов радионуклидного транспорта; о специфике соответствующих задач говорилось в разд.5.2.1.1. Главная цель модельных оценок — определить возможности описания процесса в рамках упрощенных однокомпонентных K_d -моделей.

В качестве базовых рассматривались два предельных варианта взаимодействия растворов (вытесняемого и вытесняющего), содержащих в своем составе радиоактивный стронций (Sr-90) — табл. 8.1. В первом (I) варианте задавались резкие различия в концентрациях главных компонентов, участвующих в физико-химических взаимодействиях, — с таким расчетом, чтобы добиться при миграции сильного взаимовлияния этих компонентов в жидкой и твердой фазе. Во втором (II) варианте эти различия были существенно сглажены, что, как будет видно из дальнейшего, обусловило плавные монотонные изменения концентрационных функций.

Таблица 8.1

Вариант	Краевые условия	Концентрации компонентов						
		Sr	Na	Ca	Cl	L ²⁻	pH	> SOH
I, II	t = 0	4,9 · 10 ⁻¹⁰	9,8 · 10 ⁻⁴	9,7 · 10 ⁻⁴	3,0 · 10 ⁻³	1,0 · 10 ⁻⁴	5,0	5,0 · 10 ⁻³
I	x = 0	1,0 · 10 ⁻³	1,0 · 10 ⁻¹	1,0 · 10 ⁻¹	1,0 · 10 ⁻¹	1,0 · 10 ⁻⁴	5,0	5,0 · 10 ⁻³
II	x = 0	1,0 · 10 ⁻⁶	2,0 · 10 ⁻³	2,0 · 10 ⁻³	6,0 · 10 ⁻³	1,0 · 10 ⁻⁴	5,0	5,0 · 10 ⁻³

Основными химическими реакциями, контролирующими миграционный процесс, являются



Кроме того, при моделировании учитывается существование в растворе ряда гидроксильных M_iOH и хлоридных M_iCl комплексов, которые, однако, в данной гидрогеохимической обстановке слабо влияют на направленность процесса в целом.

Концентрационные распределения $c_i(x,t)$ для выбранных вариантов представлены на рис. 8.15 и 8.16. На другом рисунке (8.17) показано изменение расчетной величины K_d^{Sr} , отвечающей текущему значению коэффициента распределения ($K_d^{\text{Sr}} = S_{\text{Sr}}^T / c_{\text{Sr}}^T$, где c_{Sr}^T — суммарная концентрация стронция в растворе, S_{Sr}^T — то же, в составе поверхностного комплекса).

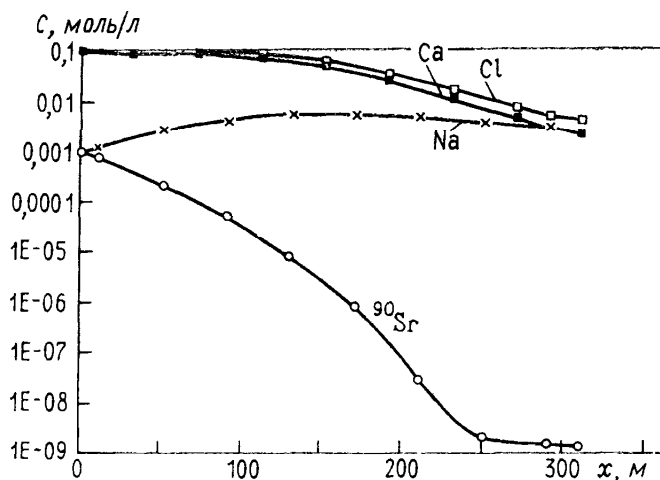


Рис. 8.15. Концентрационные кривые $c_i(x)$ для модельного варианта I

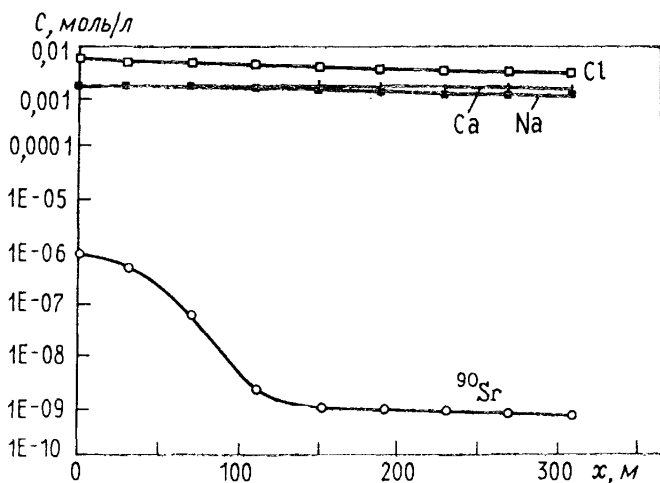


Рис. 8.16. Концентрационные кривые для модельного варианта II

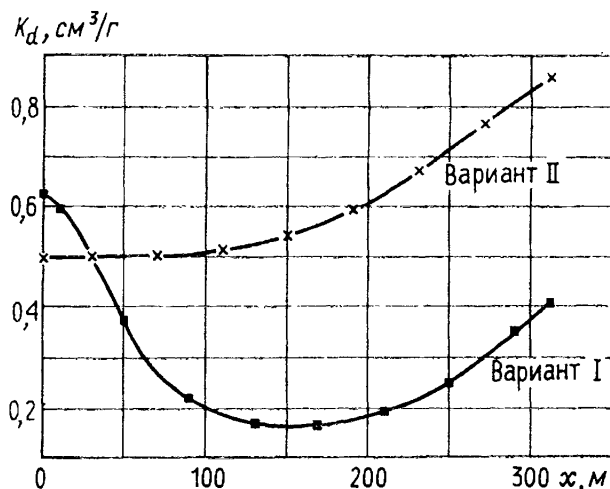


Рис. 8.17. График расчетных значений $K_d(x)$ для модельных вариантов I и II

Интересно отметить, что интенсивные обменные процессы, имеющие место в I варианте между компонентами в жидкой фазе и в составе поверхностных комплексов, обуславливают резко нестационарный характер поведения параметра K_d^{Sr} . В частности, накопление в растворе кальция за счет его активного вытеснения натрием приводит к тому, что он начинает конкурировать за сорбционные связи со стронцием: поэтому сорбционная способность последнего локально понижается в пределах дисперсионной зоны (рис. 8.17). В то же время наблюдается относительная стабильность величины K_d^S во втором расчетном варианте, что обусловлено сравнительно низкими значениями концентрационных функций.

На следующем этапе средние значения K_d^{Sr} (рис. 8.18) использовались в конечно-разностной модели однокомпонентного переноса. Полученные результаты для c^{Sr} сравнивались с оценками, полученными в рамках многокомпонентной модели — рис. 8.15. Таким образом у нас появилась возможность реально оценить эффективность « K_d -подхода».

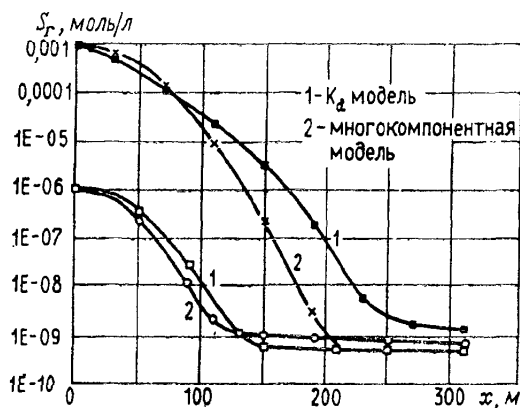


Рис. 8.18. Сравнение численных решений, полученных: (1) для эффективной « K_d модели» и (2) модели многокомпонентного переноса

Основные выводы из проведенных и подобных им расчетов следующие.

1. Если соотношения между абсолютными концентрациями компонентов и термодинамическими параметрами системы таковы, что формирование концентрационного поля радионуклида происходит при резко нестационарных изменениях других концентрационных функций (они в данном контексте могут рассматриваться как потенциал-задающие), то следует ожидать серьезных колебаний расчетной величины коэффициента сорбционного распределения. В результате трудно подобрать эффективное значение K_d , которое удовлетворительно воспроизводило бы поведение содержания радионуклидов в подземной воде. Особенно велики погрешности в области низких концентраций: они достигают в ряде случаев порядковых величин.

2. Если же концентрация радионуклида в источнике загрязнения много ниже концентрации макрокомпонентов химического состава воды, причем главные изменения концентраций последних происходят перед основным

фронтом переноса того или иного радионуклида, то вполне можно надеяться на подбор постоянной K_d , удовлетворительно описывающей процесс.

3. Для рассматриваемого типа загрязнения подземных вод радионуклидами, « K_d -подход» будет давать достаточно надежные результаты, судя по всему, при прогнозировании гидрогеологических последствий высвобождения радиоактивности в атмосферу. В этом случае миграция зараженных инфильтрационных вод с поверхности не сопровождается существенными колебаниями их катионного и анионного состава. Для сценария высвобождения радионуклидов при аварии необходима корректировка прогнозов с использованием моделей многокомпонентной миграции.

В любом случае, K_d -концепция (подход) имеет право на существование. Однако K_d -модели требуют внимательного предварительного обоснования.

8.4. Исследование миграции несмешивающихся жидкостей в ненасыщенной зоне

В связи с широким распространением загрязнения подземных вод и грунтов углеводородами, повышенное внимание в последнее время уделяется их миграции через зону аэрации; при этом жидкие углеводороды (нефтепродукты, например) являются обычно несмачивающей фазой по отношению к воде и смачивающей — относительно воздуха. Для численного решения подобных задач разработаны достаточно эффективные компьютерные программы, на существо которых мы пока не останавливаемся; приведем, однако, характерный пример такого

рода исследований*, который достаточно показателен для понимания сложности изучаемых процессов.

На модели имитировались случайные локальные разливы нефтепродуктов на поверхности ненасыщенной зоны, представленной стохастически неоднородной пористой средой — песками с невыдержанными прослоями и линзами глинистого материала. При миграции от источников небольших размеров нефтепродукты распространялись, по мере их углубления, на все более широкую площадь; при этом, если скорость субвертикальной инфильтрации вблизи источника более-менее стабилизировалась относительно быстро — после прохождения мигрантом первой от поверхности слабопроницаемой зоны (линзы), то скорость бокового растекания оставалась сильно меняющейся практически в течение всего модельного времени — по мере встречи мигрантом последующих на его пути пропластков и линз. Так постепенно в зоне проникновения нефтепродуктов «прорабатываются» предпочтительные пути миграции, вдоль которых насыщенность несмачивающей фазой оказывается максимальной. Данные по каждой реализации очень сильно зависели от конкретных характеристик и расположения первой слабопроницаемой зоны на пути движения загрязнителя.

Сравнение этих результатов со случаем эквивалентного по проницаемости гомогенного комплекса показало, что в последнем варианте влияние бокового растекания гораздо слабее, т.е. включение в модель одной лишь крупномасштабной анизотропии по проницаемости недостаточно для правдоподобной имитации этого процесса: необходимо еще представление анизотропных фазовых проницаемостей на микроуровне.

По мере увеличения размеров источника загрязнения, зависимость результатов от конкретного строения зоны аэрации непосредственно под ним ослабевает. В то же время, моделирование показало, что влияние такого пло-

* Kueper B.H., Gerhard J.I. Variability of point source infiltration rates for two-phase flow in heterogeneous porous media. — Water Res. Res., 1995, v.31, №12, p.p.2971-2980.

щадного источника нельзя свести к совокупности реализаций от воздействия ряда локальных источников с той же суммарной площадью и интенсивностью; тем самым еще раз подчеркивается резкая нелинейность изучаемого процесса. Другим проявлением нелинейности является сильная зависимость относительной значимости бокового растекания от интенсивности источника, также контролирующей степень насыщения среды смачивающей фазой: чем она ниже, тем больше роль этого фактора. Поэтому, при прочих равных условиях, предсказуемость процесса падает с уменьшением интенсивности и площади источника: при малых их значениях предпочтительные пути миграции практически невозможно прогнозировать (а также выявлять наблюдениями) без детального знания конкретного строения и параметров неоднородной среды непосредственно на участке разлива загрязнителя. Иначе говоря, прогноз распространения несмачивающей фазы от локальных источников, не создающих длительных поверхностных скоплений загрязнений, требует уровня изученности среды, чаще всего недостижимого в реальной практике. Соответственно, весьма проблематичным окажется и прослеживание за распространением такого загрязнения по площади и глубине: с ростом последней оно будет принимать все более мозаичный характер.

8.5. Некоторые замечания о состоянии исследований по численному моделированию миграции

Численное моделирование, безусловно, играло и играет исключительную роль в исследовании (а не только в прогнозировании) миграционных процессов, заменяя физический эксперимент в условиях, когда последний либо нерационален, либо же вообще невозможен. В качестве одного из многих примеров здесь уместно упомянуть

ряд блестящих работ Лаборатории им. Лоуренса (Беркли), посвященных проблемам массо- и теплопереноса при глубоко захоронении радиоактивных отходов или при освоении геотермальных ресурсов. Много полезного для понимания миграционных процессов принесли и интенсивные исследования фильтрации и массопереноса в стохастически неоднородных средах.

Вместе с тем, именно в этом, последнем направлении (хотя и не только в нем) логика исследований все больше диктуется не характером реальной геологической среды и возможными практическими приложениями, а математическим аппаратом, субъективно привлекательным для определенной группы специалистов. Если говорить об известных ограничениях наиболее распространенных модификаций этого аппарата, то они вытекают, прежде всего, из основополагающей предпосылки об эргодичности и из предположения о стационарности случайного процесса, который, к тому же, часто рассматривается в двумерной постановке, сильно искажающей результирующие выводы. В частности, при неустановившемся массопереносе условие эргодичности на деле вынужденно ограничивает исследование тривиальными асимптотиками, до достижения которых это условие часто не выполняется, а процесс находится под сильным влиянием границ модели (нарушение условия стационарности). Суммарная макродисперсия потока, определяемая в рамках стохастических моделей, учитывает разницу траекторий частиц ансамбля вариантов, а не макродисперсионное распространение единого ореола. Неопределенность ансамбля ограничивает нашу способность предсказать направление движения ореола и степень разбавления в данной точке.

Впрочем, все это давно понятно самим исследователям, так же как и практическая невозможность обеспечения аппарата стохастического моделирования добротными исходными данными; даже в таких исключи-

тельных — по насыщенности информацией — примерах, как полигоны Борден или Кейп Код, остается достаточно высокий информационный барьер, который приходится обходить различными формальными ухищрениями (прежде всего, переходом к квазитрехмерной модели на основе профильного осреднения).

В только что затронутой проблеме информационного обеспечения моделей не менее удручающе выглядит ситуация с исследованием обратных задач. С одной стороны, не ослабевает поток публикаций, с неизменным оптимизмом предлагающих все более изощренные математические процедуры для их решения. Однако, если эти работы и добавили нечто полезное к исходным публикациям 10-20-летней давности, то лишь в смысле негативных выводов, еще раз подтвердив невозможность избавиться от «проклятья некорректности» на базе усложненных формальных манипуляций с реальными (недостаточно полными и качественными) исходными данными. Приятно поэтому отметить, что практическая работа специалистов была мало затронута упомянутым литературным потоком. Или интуитивно, или ввиду более глубокого понимания проблемы, гидрогеологи-практики по-прежнему исходят из принципа: «чем проще (модель и схема решения обратной задачи), тем лучше», как правило, ограничиваясь в усложнении модели ее преимущественно детерминированной фрагментацией согласно геологической основе и качеству входной информации. Само собой разумеется, что при этом отнюдь не исключаются возможности т.н. обусловленного моделирования — путем взаимодополнения и взаимокорректировки входных данных различного характера (скажем, фильтрационных и миграционных), однако лучше всего, если получаемая взаимонезависимыми методами информация сначала обрабатывается в рамках различных обратных моделей, а лишь затем проверяется на непротиворечивость при калибровке общей (объеди-

няющей всю информацию) модели. В конечном итоге, рядом работ подчеркивается, что параллельный, взаимноувязанный поиск параметров фильтрации и миграции в процессе калибровки дает гораздо лучшие результаты, нежели их раздельное определение: речь здесь, в первую очередь, идет о калибровке фильтрационной модели с использованием значений концентрации для зоны, содержащей ореол загрязнения.

Традиционно слабым звеном в этой процедуре (калибровки) является согласование разномасштабной информации. С одной стороны, речь идет о характерных масштабах среды: 1) удовлетворяющем условию сплошности, 2) масштабе корреляции стохастических свойств среды, 3) масштабе детерминированной макронеоднородности среды. С другой стороны, должны учитываться несовпадающие с ними и (в общем случае) друг с другом масштабы: 4) опробования, 5) принятого в математической модели осреднения свойств среды, 6) характерных расчетных элементов (блоков) численной модели. К тому же, важно подчеркнуть, что каждый из упомянутых масштабов может принимать разные значения для различных процессов, в частности, фильтрационных и миграционных. Все это еще раз ставит под сомнение практическую целесообразность слишком дробной дифференциации изучаемой водопроводящей среды, по крайней мере, для достаточно протяженных областей переноса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ К ГЛАВЕ 8

1. Bales R.C. Introduction to MINEQL and SURFEQL. — 1987, University of Arizona, 41 p.
2. Charbeneau R.I. Groundwater Contaminant Transport with Adsorption and Ion Exchange Chemistry: Method of Characteristics for the Case without Dispersion. — Water Resources Research, 1981, vol. 17, N3, p.p.705-713.

3. Dougherty D.E., Bagtzoglou A.C. A Caution on Regulatory Use of Numerical Solute Transport Models. — Groundwater, 1993, 31 (6), p.p.1007-1010.
4. Lewis M.F., Voss C.I., Rubin J. Numerical Simulation of Advective-Dispersive Multisolute Transport with Sorption, Ion Exchange and Equilibrium Chemistry. — Water Resources Investigations Report 86-4-22, 1986, Reston, Virginia, 165 p.
5. Moreno L., et al. Flow and Tracer Transport in a Single Fracture. — Water Resources Research, 1988, v. 24, N12, p.p.2033-2048.
6. Moreno L., Tsang C.-F. Flow Channeling in Strongly Heterogeneous Porous Media. — 1994, vol. 30, N5, p.p.1421-1430.
7. Schwartz F.W. Macroscopic Dispersion in Porous Media: The Controlling Factor. — Water Resources Research, 1977, vol. 13, N4, p.p.743-752.
8. Smith L., Schwartz F.W. An Analysis of the Influence of Fracture Geometry on Mass Transport in Fractured Media. — Water Resources Research, 1984, vol. 20, N9, p.p.1241-1252.
9. Smith L., Schwartz F.W. Mass Transport: 1. A Stochastic Analysis of Macroscopic Dispersion. — Water Resources Research, 1980, vol. 16, N2, p.p.303-313.
10. Smith L., Schwartz F.W. Mass Transport: 2. Analysis of Uncertainty in Prediction. — Water Resources Research, 1981, vol. 17, N2, p.p.351-369.
11. Tang D.H., Schwartz F.W., Smith L. Stochastic Modeling of Mass Transport in a Random Velocity Field. — Water Resources Research, 1982, vol. 18, N2, p.p.231-244.
12. Tsang C.F., Tsang Y.W., Hale F.V. Tracer Transport in Fractures. — Water Resources Research, 1991, N12, p.p.3095-3106.

13. Zheng C. A Modular 3D Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems. — S.S.Papadopoulos & Associates, Inc., 1990, 70 p.

Принципы и методы прогноза процессов загрязнения подземных вод

Прогнозы процессов загрязнения подземных вод строятся на сочетании аналитических методов и численного моделирования. Роль последнего сейчас резко возросла, что привело к определенным перекосам (см. Введение) и чуть ли не к полному вытеснению аналитических методов из практики прогнозирования в западных странах. В отечественной гидрогеологии до таких крайностей еще не дошло, так что мы не будем здесь тратить усилия на доказательство важности аналитических методов. Представляется очевидным, что они в любом случае должны оставаться исходной методической базой прогнозирования, позволяя наиболее эффективно провести, как минимум, первые этапы схематизации гидрогеоэкологической ситуации и разведочных расчетов: благодаря физической «осязаемости» и возможности гибкого включения в прогнозный процесс т.н. субъективной информации, вытекающей из опыта и интуиции эксперта, аналитические методы гораздо лучше обеспечивают соответствие целей прогнозов их информационному обеспечению.

Сказанное ни в коей мере не принижает роль численного моделирования, за которым закрепляется важнейшая функция по многофакторному анализу и конечной оценке качества расчетной модели, по выявлению степени неопределенности — возможного диапазона погрешностей конечного результата (здесь может быть вполне уместным и использование стохастических моделей). С этой точки зрения, прогнозная численная модель оказывается тесно связанной — последовательно или

параллельно — с наращиванием текущей информации путем решения эпигнозных задач по данным наблюдений, а также с исследованием оптимизационных задач управления качеством подземных вод на объекте; через нее наиболее полно реализуются идеи адаптации и обратной связи в прогнозных построениях.

Таким образом, настоящий раздел, в принципе, ориентирован на сочетание аналитических методов и численного моделирования. Однако основные подходы к прогнозным построениям, особенно — к схематизации условий миграции, можно гораздо полнее и физически доступнее изложить на примере аналитических методов. Не будем также забывать, что схематизация необходима не столько для адаптации реальных условий к возможностям математического аппарата, сколько для обеспечения соответствия модели полноте и качеству исходной информации.

* Понятно, что, в зависимости от применяемой численной программы, расчетная модель нуждается в разной степени упрощения.

9.1. Исходные предпосылки схематизации

Миграционные прогнозы техногенного загрязнения подземных вод имеют дело с их нарушенным режимом, закономерности формирования которого контролируются многими факторами. Отражение всей совокупности этих факторов в единой расчетной модели является задачей повышенной трудности. Поэтому непосредственному выбору и построению прогнозных моделей должна предшествовать схематизация условий и процессов массопереноса, в которой предполагается выделение двух этапов: 1) предварительный — геофильтрационный и 2) собственно миграционный.

Особо подчеркнем, что первый этап в общем случае отнюдь не эквивалентен геофильтрационной схематизации, проводимой применительно к обоснованию моделей геофильтрационного процесса. Кроме того, достаточно четкое выделение двух этапов схематизации оказывается возможным лишь для условий, когда фильтрационная картина не зависит от переноса вещества. Данная предпосылка заведомо соблюдается при описании миграции промстоков, слабо пересыщенных или недосыщенных солевыми компонентами (концентрации которых не отвечают равновесным для минерального комплекса породы), так что процессы осаждения или растворения -выщелачивания не приводят к изменению проницаемости этих пород*. Более серьезное ограничение на использование рассматриваемого подхода накладывает

* Применительно к данному типу взаимодействия именно эти условия и рассматриваются в дальнейшем.

дифференциация сточных и пластовых вод по плотности, приводящая к искажению исходной фильтрационной картины (разд. 2.3.3).

В общем случае процессы загрязнения идут на фоне параллельных изменений в гидродинамическом режиме, вызываемых эксплуатацией гидротехнических и водозаборных сооружений. Учитывая, однако, что перенос вещества происходит гораздо медленнее развития фильтрационных возмущений, как правило, допустимо рассматривать миграцию компонентов на фоне стационарного (квазистационарного) фильтрационного поля.

Принципы схематизации развиваются далее применительно к списанию двух основных типов источников загрязнения, которые традиционно подразделяются на:

1) *сосредоточенные* на относительно локальных участках и имеющие поэтому четкие границы в плане; это, как правило, техногенные бассейны промстоков, загрязненные природные водоемы или водотоки, функционирующие довольно долго, или локальные интрузии загрязняющих веществ, проникшие в подземные воды в результате их случайного аварийного разлива (в этом случае даже говорят о «точечных» источниках загрязнения);

2) *площадные (рассосредоточенные)* инфильтрационного типа; как правило, область распространения таких источников соизмерима с площадью распространения ближайших от поверхности водоносных горизонтов, плановые границы их «размыты» или трудно устанавливаются.

Здесь мы также коснемся некоторых аспектов схематизации условий миграции некондиционных вод от подземных бассейнов, имеющих чаще всего естественный генезис, т.е. связанных с природной (профильной или, реже, плановой) гидрогеохимической зональностью под-

земных вод. В этом варианте главным фактором, определяющим возможность и степень загрязнения, является водоотбор.

9.2. Схематизация геофильтрационных условий массопереноса

9.2.1. Схематизация пространственной изменчивости и анизотропии фильтрационных свойств водоносных пластов

При рассмотрении этого вопроса важно выделить следующие взаимосвязанные аспекты схематизации:

1) обоснование требуемой детальности изучения фильтрационного строения пласта и учета в расчетной модели его неоднородности и анизотропии;

2) допустимость и целесообразность усреднения фильтрационных характеристик по площади и в разрезе;

3) реальная достижимость необходимого уровня фильтрационного расчленения водоносных комплексов существующими средствами гидрогеологической разведки.

Сравнительно ясными эти аспекты представляются применительно к плановой неоднородности. Так, решение фильтрационной части задачи предполагает выделение плановых зон неоднородности с особым гидродинамическим режимом и фильтрационными свойствами, причем для такого выделения обычно существуют достаточно логичные геологические (структурно-литологические) предпосылки. Очевидно, эти же структурные элементы должны находить отражение и в миграционных расчетах, проводимых либо по предварительно выделенным лентам тока, либо непосредственно на двумерных плановых моделях. При этом усреднение значений

фильтрационных параметров по площади области миграции может быть оправданным в диапазонах, заметно более узких, чем это допустимо при решении фильтрационных задач. Сравнительно медленное протекание миграционных процессов требует выделения неоднородности и более мелкого масштаба, чем принято в фильтрационных задачах; для этого, однако, как правило, не хватает необходимой исходной информации.

Большие трудности связаны с геофильтрационным обоснованием профильной структуры моделей массопереноса, которая, в отличие от широкого круга задач геофильтрации (допускающих плановую поставку), должна отражать реальное распределение расхода фильтрационного потока по отдельным, часто измеряемым всего лишь первыми метрами, профильным элементам водоносного пласта. Миграционный прогноз по усредненным показателям проницаемости пласта может рассматриваться лишь как грубое приближение к реальности, не дающее, к тому же, во многих случаях требуемого запаса надежности. Между тем нынешний «стандарт» гидрогеологических изысканий (прежде всего, опытно-фильтрационных работ) практически не ориентирован на решение этой задачи. В частности, при изучении миграции солей из подземных бассейнов практически отсутствует информация о наличии субвертикальных зон повышенной проницаемости и об их фильтрационных параметрах.

Сходные трудности могут возникать и применительно к однородным пластам, если принять во внимание профильную анизотропию реальных водоносных комплексов. Ее роль в расчетной схеме тем заметнее, чем выше степень деформации сетки движения в разрезе водоносного горизонта и, соответственно, чем более ощутима вертикальная компонента скорости фильтрации. Учет анизотропии приобретает исключительное значение в двух ситуациях: 1) при оценке миграции

разноплотностных вод, когда в пласте развиваются процессы гравитационной дифференциации вещества, и 2) при изучении процессов субвертикальной миграции глубинных растворов от подземных бассейнов природного происхождения. Известно, однако, что для геофильтрационных прогнозов (в рамках плановых задач гидродинамики) профильная анизотропия представляет второстепенный интерес, чем объясняется слабая разработанность соответствующих схем постановки, а также интерпретации геофильтрационных опробований и наблюдений и, следовательно, дефицит информации для обоснования моделей миграции.

Для поверхностных техногенных бассейнов положение усугубляется и неопределенностью информации об их связи с подземными водами. Последняя во многом зависит от параметров характерной приграничной области (через которую идет фильтрация стоков до их попадания в водоносный горизонт), причем по своим фильтрационным и миграционным свойствам образования, слагающие эту область, обычно резко отличаются от водоносных пород. Отсюда следует необходимость достаточно детального учета пространственно-временных закономерностей изменения фильтрационных свойств этих образований, что часто вынуждает отказываться от приемов схематизации, характерных для геофильтрационных задач. Так, нередко оказывается недопустимым стандартное приведение несовершенного (по степени вскрытия пласта) водоема к совершенному на основе метода эквивалентных фильтрационных сопротивлений.

9.2.2. Схематизация пространственной структуры фильтрационного потока

Как известно, большая часть задач геофильтрации эффективно решается в плановой постановке — с использо-

ванием предпосылки Дюпюи, пренебрегающей нормальной напластованию компонентной скорости фильтрации. Целесообразность такого подхода не исключается и при анализе миграционных процессов: плановая фильтрационная модель и построенные на ее основе ленты тока квазистационарного фильтрационного поля позволяют в первом приближении оценить усредненные скорости конвективного переноса и оконтурить в плане зону нарушения естественного гидрохимического режима подземных вод в результате конвекции (без учета дисперсионных эффектов): эта зона захвата ограничена так называемыми нейтральными линиями тока (см. разд. 10.1.1), она не совпадает с областью влияния водозабора, а заметно меньше ее.

При схематизации *плановой* структуры фильтрационного потока, формирующегося под влиянием утечек из техногенного бассейна, оконтуривается зона нарушения естественного гидродинамического режима подземных вод. Форма и размер этой зоны, а также распределение осредненных скоростей конвективного переноса в ее пределах, определяются соотношением фильтрационных потерь из бассейна (Q_0) и удельного расхода регионального фильтрационного потока (q_e) в области влияния источника при характерной заданной длине переноса (L). При этом выделяются области с резкой деформацией фильтрационного потока вблизи источника — $L < (0,03-0,05) Q_0/q_e$ и область примерно линейного течения — на достаточном удалении от него — $L > Q_0/q_e$. Соответственно, можно выделить два предельных варианта фильтрационных потоков от источников загрязнения:

1) потоки, формирующиеся при фильтрации от источника с интенсивностью, превышающей, как минимум, на порядок условный расход естественного потока Q_e ($Q_e = q_e b$) в пределах контура предполагаемого ореола

загрязнения, поперечное сечение которого контролируется величиной $b = b(L)$, и

2) потоки, образующиеся при интенсивности фильтрации из источника, уступающей условному расходу транзитного потока хотя бы в несколько раз. В первом случае учет плановой структуры естественного потока может проводиться весьма грубыми способами, а во втором требует гораздо большей детальности.

Исходная схематизация потока плановой моделью не устраняет, как правило, необходимости последующего учета его *профильной* структуры в пределах водоносного пласта (в этом варианте — по выделенным на плановой модели лентам тока), т.е. факторов, приводящих к возникновению компоненты скорости фильтрации, нормальной напластованию. Помимо гидродинамического несовершенства плановых границ потока и перетекания через относительные водоупоры (учет которых требуется и в геофильтрационной модели), здесь часто приходится принимать во внимание и менее значимые различия напоров вдоль мощности пласта, обычно не учитываемые в рамках моделей плановой фильтрации. То же самое можно сказать и о необходимости гораздо большей детальности в оценках распределения фильтрационного расхода по мощности водоносного пласта.

Прежде всего, вертикальная составляющая скорости фильтрации является важнейшим фактором, обеспечивающим перераспределение вещества по мощности водоносного горизонта вблизи поверхностного источника загрязнения: именно здесь возникает резкая профильная деформация потока, обусловленная несовершенством гидродинамической границы. В геофильтрационных построениях считается, что при существовании прямой гидравлической взаимосвязи между несовершенным бассейном и водоносным пластом (режим подпертой

фильтрации) размер зоны вертикальной деформации потока L_ϕ имеет порядок значения мощности m пласта: $L_\phi = (1-1,5) m$; в потоках большой протяженности эта величина мало влияет на результаты решений задач подземной гидродинамики. Совсем иное значение приобретает реальная профильная структура течения вблизи несовершенных границ при изучении процессов массопереноса: вертикальная компонента скорости фильтрации v_z здесь является важнейшим фактором, обеспечивающим перераспределение вещества по мощности водоносного горизонта вблизи источника загрязнения. При этом обычно отмечаемое здесь падение скорости v_z с глубиной вызывает одновременное появление промстоков в различных точках вдоль мощности пласта. В то же время, если гидродинамическая активность источника загрязнения невелика (второй из рассмотренных выше случаев), то наличие естественного потока подземных вод служит существенным препятствием для достижения трассером подошвы водоносного горизонта гидравлическим путем, так что происходит вынужденное концентрирование миграционного потока в верхней части пласта, нередко многократно усиливаемое профильной фильтрационной анизотропией.

Аналогичные осложнения претерпевает профильная структура фильтрационного потока вблизи несовершенных контуров дренирования подземных вод: восходящая конвекция способствует здесь дополнительному перемешиванию промышленных стоков в пласте, причем решающее значение для прогноза этого процесса приобретает опять-таки профильная фильтрационная анизотропия пласта; наиболее типичным примером является задача о подтягивании глубинных рассолов к водозаборным сооружениям.

* Для анизотропных пород $L_\phi \approx (1 - 1,5) m \sqrt{K_x/K_z}$

Вполне определенную роль применительно к задачам массопереноса играет вертикальная компонента скорости фильтрации и вдали от границ пласта, особенно в безнапорных грунтовых потоках*, что усложняет расчетные схемы, в частности, требует корректировки дисперсионного (диффузионного) обмена в профильно-неоднородных толщах. Естественно, что во всех упомянутых ситуациях интенсивность вертикальной конвекции контролируется показателем профильной анизотропии фильтрационных свойств водоносных пород. Известно, однако, что для геофильтрационных прогнозов — в рамках плановых задач гидродинамики — этот показатель представляет второстепенный интерес.

Принципиальным аспектом геофильтрационного обоснования профильной структуры миграционной модели является отражение в ней истинного распределения расхода фильтрационного потока по отдельным, часто измеряемым всего лишь первыми метрами, профильным элементам пласта: миграционный прогноз по осредненным показателям проницаемости допустим лишь в весьма ограниченных пределах, контролируемых временем конвективно-дисперсионного выравнивания концентрационных профилей, о чем пойдет речь далее.

9.2.3. Схематизация условий питания (разгрузки) водоносных пластов по площади их распространения

Схематизация как площадной инфильтрации, так и перетекания через разделяющие пласты применительно к миграционным задачам обладает особой спецификой.

* Она усиливается площадной инфильтрацией на поверхность грунтовых вод (разд. 9.2.3).

Площадное перетекание, во многом определяющее характер миграции через разделяющие слои, часто необходимо учитывать и при тех диапазонах проницаемости, которые обычно рассматриваются как подтверждение практически абсолютной водоупорности этих слоев. Нетрудно показать, например, что для квазистационарного режима миграции конвективный перенос через разделяющий слой соизмерим с диффузионным уже при $K_p \approx 10^{-5}/\Delta H$ (где ΔH — перепад напоров между водоносными пластами); отсюда получаем значения коэффициента фильтрации порядка $10^{-5} + 10^{-6}$ м/сут, оценка которых традиционными методами находится на пределе (чаще за пределом) их чувствительности.

Площадное инфильтрационное питание также может заметно смещать оценки миграционного процесса. Так, оно приводит к увеличению вертикальной компоненты скорости фильтрации; способствует разбавлению загрязняющих растворов, фильтрующихся по пласту, водами иного качественного состава (в том числе и с иными загрязняющими компонентами); усиливает (или, наоборот, ослабляет) поперечную профильную дисперсию в покровных слоях. Все это нередко требует представления в расчетной схеме инфильтрационного питания в явном виде в отличие от схематизации линейных фильтрационных процессов, когда естественная инфильтрация часто вообще исключается из расчета.

Более того, существует определенный класс миграционных задач, требующих большей степени детализации данной характеристики. Такого рода проблемы возникают, например, при необходимости описания с повышенной точностью распределения концентраций в периферийных частях ореолов рассеяния, весьма чувствительных к временным тенденциям изменения инфильтрационного питания. Информация о локальных значениях инфильтрации необходима также при прогнозах просачивания и интенсивности поступления в

водоносные горизонты загрязнителей на участках их аварийного разлива, поскольку эти значения могут существенно отличаться от величин, найденных из региональных, сильно осредненных, оценок.

9.2.4. Заключительные выводы

Итак, геофильтрационная схематизация при исследовании миграционных процессов предполагает во многих случаях отказ от ряда предпосылок, являющихся вполне традиционными в геофильтрационных исследованиях и заметно облегчающих как прогнозные построения, так и нахождение необходимой исходной информации. Более того, можно утверждать, что по ряду рассмотренных аспектов (прежде всего, касающихся профильной структуры пласта и фильтрационного потока) единственным принципом геофильтрационной схематизации окажется следующее простейшее правило: необходимо обеспечить в описании геофильтрационных условий миграции ту максимальную степень детальности, которая отвечает имеющейся информации.

В целом, надежность миграционных прогнозов часто в решающей степени зависит именно от детальности обоснования фильтрационной схемы. Между тем информация здесь очень часто оказывается недостаточной, ибо традиционная постановка геофильтрационных опробований и наблюдений и не рассчитана на миграционные процессы. Более того, даже наличие весьма детальных представлений о законе распределения фильтрационных параметров (см. разд. 3.5) не гарантирует от крупных погрешностей в оценке поля скоростей, что связано с решающим влиянием на характер данного поля конкретной топологии элементов неоднородности.

Ограниченность информации о фильтрационном поле является главной причиной, заставляющей проводить

собственно миграционную схематизацию на базе заведомо упрощенных моделей.

9.3. Схематизация процессов массопереноса (собственно миграционная схематизация)

Прежде всего заметим, что, по возможности, здесь всегда целесообразно выделять два условно самостоятельных аспекта: первый касается схематизации гидродинамических процессов массопереноса, определяющих миграцию компонентов без учета участия последних в гидрогеохимических преобразованиях (т.е. применительно к нейтральным компонентам), а второй — схематизации физико-химических процессов, определяющих направленность трансформации состава мигрирующих растворов, в частности, их самоочищение от загрязняющих компонентов. Однако, такой подход более-менее оправдан лишь при описании линейных процессов массопереноса, весьма слабо влияющих на структуру фильтрационного поля и на значения исходных фильтрационных параметров водоносных пластов.

На практике, основные элементы собственно миграционной схематизации сводятся к следующему:

- 1) схематизация влияния процессов массопереноса на расчетную схему фильтрации;
- 2) выделение относительной значимости отдельных механизмов конвективно-дисперсионного переноса;
- 3) схематизация структуры миграционного потока;
- 4) обоснование целесообразных уровней рассмотрения миграционных процессов в гетерогенных водоносных комплексах — с выделением доминирующих механизмов массопереноса на каждом уровне

* Разным уровням процесса часто отвечают и разные расчетные схемы.

и анализом возможностей сведения гетерогенных комплексов к квазигомогенным;

5) схематизация граничных условий миграции;

6) схематизация физико-химического взаимодействия подземных вод с горными породами, а также физико-химических превращений, протекающих непосредственно в подземных растворах.

На деле решение перечисленных вопросов приходится нередко вести на базе их параллельного рассмотрения и последовательных приближений, начиная от самых грубых схем. При этом исключительную роль приобретают разведочные расчеты: без них обычно немислима сколько-нибудь надежная миграционная схематизация. Это объясняется как многоуровневым характером миграционных процессов в реальных, гетерогенных, водоносных комплексах, так и отсутствием у большинства специалистов априорных, опытно-интуитивных представлений об этих процессах (в отличие, например, от задач фильтрации, когда подобные представления нередко устраняют необходимость в массовых разведочных расчетах).

9.3.1. Схематизация влияния массопереноса на расчетную схему фильтрации

Решение этого вопроса должно исходить, прежде всего, из оценки возможного влияния мигрирующих компонентов на плотность и, в меньшей степени, вязкость подземных вод. Если изменения этих показателей пренебрежимо малы, то, как правило, фильтрационная часть миграционной задачи может рассматриваться обособленно от массопереноса, т.е. уравнения фильтрации

* Например, особенно трудно отделить друг от друга анализ четвертого и третьего вопросов.

решаются независимо от уравнений переноса. Подчеркнем, что сказанное, вместе с тем, ни в коем случае не означает, что фильтрационная схема может выстраиваться вообще без учета особенностей миграционного процесса: важность такого учета, особенно с позиций детальности фильтрационных построений, достаточно очевидна (см. разд. 9.2).

К сожалению, круг условий, в которых можно пренебречь изменениями плотности подземных вод (при внедрении в них тяжелых или, наоборот, легких стоков) ограничен довольно жесткими рамками, которые к тому же трудно конкретизировать. В первом приближении, для плановых фильтрационных потоков в профильно изотропных пластах, формирующихся под влиянием тех или иных техногенных возмущений (и имеющих обычно градиенты порядка сотых долей), можно, очевидно, считать пренебрежимо малыми различия в плотности порядка тысячных долей грамма на кубический сантиметр, что, грубо говоря, отвечает разности в минерализации порядка первых граммов на литр. При сравнительно небольшом превышении этих ориентировочных пределов часто также можно решать фильтрационную задачу обособленно от задачи массопереноса, внося затем коррективы простейшими приближенными приемами: вводятся поправки в расчетные значения напоров подземных вод с учетом локальных значений плотности, подсчитанных по результатам решения задачи массопереноса, после чего, при необходимости, отыскивается решение во втором приближении.

В целом, однако, упомянутые пределы сильно зависят от конкретной фильтрационной картины — прежде всего от градиентов потока I (в сопоставлении их с возможным «плотностным» градиентом $\Delta\rho$) и его направленности, а также от профильной фильтрационной анизотропии. Так, например, на участках вертикальной нисходящей

фильтрации из водоемов через экранирующие слои при больших градиентах могут считаться пренебрежимо малыми различия в плотности до нескольких сотых грамма на кубический сантиметр, в то время как при низкой гидродинамической активности с преобладанием переноса в результате естественной (температурной) конвекции могут оказаться значимыми различия в тысячные и даже десятитысячные доли грамма на кубический сантиметр. Поэтому окончательное решение рассматриваемого вопроса может быть сделано лишь на основе сопоставительных оценок, проводимых после исследования миграционной задачи в первом приближении (т.е. без учета плотностной конвекции).

Различия в вязкости имеют обычно меньшее значение, причем если их и приходится учитывать, то чаще всего наряду с изменениями плотности; поэтому последний фактор обычно может быть принят за главный при решении рассматриваемого вопроса миграционной схематизации.

Наконец, для ряда характерных инженерных проблем (прежде всего таких, как подземная закачка промышленных стоков или разработка полезных ископаемых способом подземного выщелачивания) обособленное рассмотрение фильтрационной задачи массопереноса может оказаться недопустимым из-за изменений проницаемости пласта при миграции вследствие выпадения вещества из подземного раствора или, наоборот, растворения пород. Однако и в этих случаях исходные гидрогеологические прогнозы часто строятся (из-за отсутствия информации) на той же упрощающей предпосылке, пока она не опровергается опытно-эксплуатационными данными.

* Подобные задачи, имеющие серьезную специфику, в основном исключены из дальнейшего рассмотрения.

В целом, несмотря на грубость этого приближения для многих реальных задач миграции (даже в возмущенных фильтрационных потоках), их исходное рассмотрение, в большинстве своем, базируется на предпосылке о допустимости независимого решения фильтрационной части миграционной задачи (что не исключает, однако, необходимости последующих поверочных оценок расчетным путем или на основе опытного материала).

Итак, в дальнейшем, за исключением особо оговоренных случаев, будем считать, что миграционная схематизация проводится применительно к заранее построенному полю скоростей фильтрации, которому в двумерной стационарной или квазистационарной постановке отвечает некоторая совокупность фиксированных линий тока.

9.3.2. Схематизация гидродинамических процессов миграции (на примере физически и химически нейтральных компонентов)

9.3.2.1. Выявление значимости отдельных механизмов конвективно-дисперсионного переноса и схематизация структуры миграционного потока (в гомогенных породах)

С практической точки зрения, т.е. с позиций возможного упрощения расчетной модели, определенный интерес представляет оценка относительной значимости в переносе конвекции, с одной стороны, и продольной дисперсии — с другой. Для этого можно воспользоваться соотношением размеров переходной зоны (обусловленной гидродисперсией) и характерной длины переноса.

* При численном моделировании это, вообще говоря, не принципиально.

Критериальным показателем здесь служит число Пекле $Pe = (vL)/D_L \approx L/\delta_L$ (см. разд. 2.2).

Заметим только, что расчетные схемы поршневого вытеснения, пренебрегающие гидродисперсией (точнее — наличием переходной зоны), дают запас надежности при оценках значений концентрации вдоль траекторий фильтрации, выходящих из источника загрязнения, но одновременно занижают время наступления начальной стадии загрязнения и размеры зоны, охваченной загрязнением, поэтому к их использованию следует относиться с осторожностью.

Наибольшую же важность с позиций возможного упрощения основных механизмов механического переноса представляет пренебрежение хотя бы одной составляющей поперечной дисперсии. За редким исключением, это позволяет свести реальный пространственный массовый поток к двумерному или даже одномерному. При анализе подобной возможности и путей ее реализации необходимо совокупно учитывать многие факторы, основными среди которых, наряду с характером фильтрационной картины, являются: 1) степень развития поперечной (плановой и профильной) дисперсии; 2) характерные расстояния и время переноса; 3) неоднородность, гетерогенность среды; роль последнего фактора (частично уже учтенного при построении фильтрационной картины) пока опустим. Тогда исходным здесь является анализ пространственной структуры фильтрационного течения.

Так, при обосновании *планового* характера миграционной модели значимость процессов поперечной дисперсии может быть выявлена на основе оценки вклада сосредоточенной инфильтрации (объемной интенсивностью Q_o) из источника загрязнения в условный расход (Q_e) регионального потока подземных вод с учетом

характерной длины переноса (L) и константы поперечной дисперсии (δ_T).

При не слишком больших значениях L и достаточно высокой гидродинамической интенсивности источника в сравнении с величиной Q_e (разд. 9.2.2) развивается первый тип миграционных потоков — «ореолы растекания», в которых поперечной плановой дисперсией можно пренебречь; для осевой линии ореола это справедливо при выполнении сравнительно менее жесткого критерия $Q_0 > (5 \div 10) Q_e \sqrt{\delta_T/L}$. Наоборот, достаточно протяженные миграционные потоки от источников со сравнительно слабой гидродинамической активностью относятся ко второму типу — «ореолы рассеяния», здесь значение поперечной плановой дисперсии велико; соответствующий критерий имеет вид: $Q_0 < (1+2) Q_e \sqrt{\delta_T/L}$.

Приводимые в литературе аналитические решения для пространственной миграции относятся в подавляющем большинстве случаев именно к ореолам рассеяния, когда фильтрационный расход источника пренебрежимо мал; получаемые на основе этих решений обобщения и, в частности, критериальные оценки могут оказаться малопригодными для ореолов растекания из-за недостаточного учета роли конвекции в поперечном переносе вещества. Более того, сами эти решения имеют физический смысл лишь для достаточно больших расстояний переноса L , отвечающих приведенным ранее (разд. 2.3) критериям.

Для потоков первого типа основные расчетные оценки могут проводиться вдоль фиксированных в плане лент тока — без учета взаимодействия между ними; при этом могут использоваться профилно-двумерные или даже одномерные, как правило, резко нестационарные модели миграции. Для потоков второго типа, из-за необходимости учета поперечной плановой дисперсии, расчетные модели должны быть планово-двумерными; соответствующий анализ миграционного процесса часто упрощается

благодаря наличию у этих моделей стационарных (квази-стационарных) асимптотик. Согласно разд. 2.3, для ореолов рассеяния, даже в неограниченных пластах, характерно образование вблизи входных границ стационарных, точнее — квазистационарных, полей миграции, постепенно увеличивающих свой размер R во времени, тогда как в периферийных зонах процесс остается на всех стадиях нестационарным. Для асимптотических квазигомогенных моделей при $Pe_e \approx v_e^2 t / (Dn) \gg 1$ характерный размер $R(t)$ можно приближенно оценить по формуле

$$R(t) \approx \frac{v_e t}{n},$$

где $R = x$ — для одномерных потоков; $R = \sqrt{x^2 + y^2} \mathcal{D}_L / D_T$ — для двумерных и $R = \sqrt{x^2 + y^2} \mathcal{D}_L / D_{T_y} + z^2 \mathcal{D}_L / D_{T_z}$ — для трехмерных.

При схематизации *профильной* структуры миграционного потока оценивается влияние гидродинамического несовершенства контура техногенного питания водоносного горизонта на интенсивность гидравлического «разноса» загрязнения по его мощности. Это влияние сглаживается при высокой гидродинамической активности источника загрязнения: происходит довольно быстрое конвективное вытеснение пластовых вод промстоками, так что зона с неоднородным гидрохимическим разрезом, примыкающая к источнику, имеет небольшую протяженность. Поэтому поперечная дисперсия не успевает себя проявить и для анализа используются простейшие кинематические расчетные схемы. Напротив, роль поперечной дисперсии весьма существенна при поступлении промстоков на поверхность грунтового потока в режиме свободной инфильтрации. Если инфильтрация сосредоточена на небольшой площади, то уже вблизи источника миграция приобретает объемный — трехмерный — характер.

В целом, для потоков второго типа наличие таких факторов, как профильная неоднородность, профильная двумерность поля скоростей фильтрации, отток (приток) вещества через верхнюю или нижнюю границу пласта, вызывает необходимость использования трехмерных миграционных моделей. Здесь, однако, следует исходить из того, что одновременный учет в интерпретационной модели гетерогенности (за рамками предельных асимптотических представлений) и трехмерности миграционного процесса в рамках аналитических методов мало реален. Поэтому разумно рассматривать двумерные плановые модели миграции, относя их только к квазигомогенным ореолам, или, наоборот, исследовать профильные двумерные модели (в том числе и в гетерогенных средах), учитывая плановый характер переноса вещества в рамках предварительной схематизации аналогично потокам первого типа*. Эффективным приемом схематизации здесь является фрагментирование процесса по пространству и времени. Так, в начальной стадии процесса и соответственно при малых расстояниях переноса, имеющих порядок мощности потока, пренебрегают поперечной плановой дисперсией и рассматривают профильно-двумерные или одномерные модели миграции с учетом реальной гетерогенности среды. Наоборот, длительные процессы рассматриваются в планово-двумерной постановке, учитывающей поперечную плановую дисперсию, но для квазигомогенной среды, т.е. при асимптотическом режиме профильной поперечной дисперсии. Таким образом, с учетом сказанного, не будем далее детально анализировать трехмерные модели переноса, считая, что, за редкими исключениями

* При необходимости можно учитывать обмен веществом между выделенными лентами тока приближенными приемами, рассматривающими поперечную плановую дисперсию в квазистационарной постановке.

(см. разд. 9.3.3), схематизация позволяет свести их к двумерным (хотя, в принципе, полученные двумерные решения для квазигомогенных сред имеют и трехмерные эквиваленты). В противном случае приходится ориентироваться на трехмерные численные модели миграции, что, однако, отнюдь не обязательно улучшает прогнозные результаты (разд. 9.3.2.2).

9.3.2.2. Особенности схематизации миграционного процесса в гетерогенных водоносных комплексах

В породах, гетерогенных по фильтрационным и массообменным характеристикам, миграционные процессы могут протекать в различных, последовательно сменяющих друг друга в пространстве и во времени режимах, когда на первый план выходят различные механизмы переноса; проявление гетерогенности усиливается с увеличением скорости фильтрации. Такое многоуровневое протекание миграционного процесса находит отражение в описании различных его стадий разными моделями (см. главу 3). Особое значение при этом имеют асимптотические модели переноса, дающие возможность существенно упростить весь последующий анализ: они позволяют использовать диффузионные расчетные схемы для квазигомогенного пласта, в которых гетерогенность среды учитывается или простым ее расчленением на гомогенные элементы, или через некоторые обобщенные (эффективные) параметры. Важно, что квазигомогенные модели допускают значительное пространственное усреднение фильтрационных характеристик пласта. При этом влияние фильтрационной макронеоднородности на структуру потока учитывается (независимо от миграционной задачи) при построении сетки движения, а неоднородность

более мелкого масштаба находит отражение в расчетных параметрах макродисперсии.

Для слоистых систем (см. разд. 3.1) начальной асимптотикой служит модель послойного переноса, а конечной — модель однородного пласта с усредненными фильтрационными и суммарными емкостными характеристиками. В трещиновато-пористых породах (см. разд. 3.2) такими асимптотиками служат модель микродисперсии (обмен между трещинами и блоками не проявляется) и предельная модель макродисперсии (пласт ведет себя как квазигомогенный); широко могут использоваться также промежуточные модели неограниченной и сосредоточенной емкости.

Важное место в подобной схематизации занимают разведочные расчетные оценки, которыми, в частности, определяются характерные пространственно-временные диапазоны различных режимов переноса, отвечающие различным уровням проявления гетерогенности. Приведем общую схему таких оценок применительно к трассеру, считая, что гетерогенная система представлена слоистой толщей пород с различной проницаемостью:

1) строится поле скоростей фильтрации в плановой, а при необходимости и в профильной двумерной постановке (см. разд. 9.2), после чего разведочные оценки проводятся применительно к характерным лентам тока, причем в подавляющем большинстве случаев — в одномерной постановке;

2) рассчитываются предельные значения времени t_n^o , для которых еще справедливы оценки по схеме послойного переноса;

* Для трещиновато-пористых пород достаточно вспомнить известную аналогию с равномерно-слоистой толщей.

3) рассчитываются минимальные значения времени t_o^o , начиная с которых справедливы оценки по схеме квазигомогенного пласта;

4) в рамках представлений о поршневом вытеснении определяется время продвижения трассера на различные характерные расстояния в двух вариантах — обособленно для каждого слоя и для всей толщи (как квазигомогенной системы), так что в результате получают две расчетные временные совокупности — t_n^i (время послойного переноса) и t_o^i (усредненное время переноса);

5) по сопоставлению t_n^i и t_o^i с критериальными величинами t_n^o и t_o^o оценивается значимость асимптотических режимов переноса в пространстве и во времени, а также намечаются пространственно-временные диапазоны для последующих оценок;

6) для тех же предельных моделей оценивается возможная значимость дисперсионных эффектов, идущих вдоль напластования — как в направлении преобладающего переноса, так и перпендикулярно к нему (о поперечной дисперсии, требующей привлечения двумерных моделей, см. выше);

7) проводятся уточняющие оценки для возможных промежуточных уровней проявления гетерогенности — в рамках расчетных моделей, учитывающих в явном виде не только конвекцию вдоль напластования, но и диффузионно-дисперсионный, а также конвективный обмен веществом между слоями; в этих оценках могут широко использоваться промежуточные асимптотические модели неограниченной и сосредоточенной емкости, для условий

* Для реальных стоков уже на этом этапе полезно оценить значимость плотностной конвекции в межслоевом обмене веществом и при ее существенной роли обратиться к явному ее учету в рамках более точной расчетной модели.

применимости которых найдены достаточно четкие пространственно-временные критерии;

8) если проведенные уточняющие оценки (пп. 6 и 7) выявят необходимость в резкой корректировке представлений, полученных простейшими расчетами в рамках предельных асимптотических моделей (пп. 2-5), то проводится следующий цикл оценок по усложненным расчетным моделям, учитывающим гидродисперсию (п.6) и (или) переходные режимы межслоевого обмена (п.7); не исключено, что при этом может быть обнаружена необходимость в учете дополнительных уровней проявления гетерогенности и в новом цикле уточняющих оценок.

Так постепенно выстраивается эффективная расчетная схема применительно к миграции трассера или тех компонентов, взаимодействие которых с горными породами сводится к случаю трассера введением параметра эффективной емкости (пористости). Далее она может развиваться, согласно тем же принципам, на процесс миграции реальных стоков — с учетом плотностной конвекции (разд. 9.3.3), кинетики и нелинейности физико-химических взаимодействий и других факторов (разд. 9.3.4).

Еще раз подчеркнем, что трехмерные миграционные модели, одновременно учитывающие гетерогенность и поперечную дисперсию, чаще всего ориентированы на предельную (асимптотическую, диффузионную) расчетную схему макродисперсии, когда пласт ведет себя подобно гомогенному (с «макропараметрами»). Однако необходимо помнить, что такая — «диффузионная» — асимптотика часто достигается лишь за пределами практически значимых для прогнозов временных диапа-

* Эти уровни могут не совпадать для процессов конвективно-дисперсионного переноса, с одной стороны, и физико-химического взаимодействия — с другой.

зонов. Именно этим обстоятельством объясняются ограниченные возможности исследования пространственных закономерностей массопереноса в рамках трехмерных моделей, которые, к тому же, чаще всего не обеспечены необходимой информацией.

9.3.2.3. Схематизация граничных условий миграции

Постановка граничных условий миграции (см. разд. 1.2.3) должна, как правило, тесно увязываться с конкретной расчетной моделью. Здесь полезно лишь заметить, что для пластов небольшой протяженности недопустимо проводить схематизацию на базе разведочных оценок для моделей неограниченного пласта. Это очевидное, казалось бы, обстоятельство на практике нередко упускается из виду. Между тем, для ореолов рассеяния (см. разд. 9.3.2) оно имеет принципиальное значение. В этом случае и само наличие удаленной внешней границы, и характер условий на ней могут кардинально менять концентрационное поле не только вблизи границы, но и на больших расстояниях от нее; в частности, при интенсивном отводе вещества от границы (первого рода) проявляется общая тенденция к снижению концентрации, а при нулевом условии второго рода отмечается тенденция противоположного свойства.

Следует отметить еще необходимость прямого учета в граничных условиях значений миграционных параметров пород и техногенных образований с особыми свойствами, характерных для контуров питания (например, бассейнов промышленных стоков), так как многие стоки вступают в интенсивное физико-химическое взаимодействие с этими образованиями.

Особого разговора требует задание граничных условий по инфильтрации загрязняющих компонентов через

зону аэрации, если последняя, как это чаще всего бывает, не входит в расчетную модель непосредственно. В таком варианте, как это будет видно (разд. 10.2.2), представление инфильтрации в исходных балансовых уравнениях миграции происходит в явном виде, что не отвечает принципам схематизации фильтрационных потоков в линейной постановке, когда *естественная инфильтрация* вообще исключается из расчета (благодаря ее учету в исходных естественных уровнях потока).

В этой ситуации разумно, очевидно, задавать в миграционной схеме расчетную интенсивность инфильтрующегося вещества (но не воды!) — в виде граничного условия или функции источника в балансовых концентрационных уравнениях; в противном случае, особенно характерном для практики численного моделирования, инфильтрация нередко учитывается, фактически, дважды.

Понятно также, что при любом задании инфильтрационного питания как источника загрязнения должна учитываться сдвигка во времени — на период нахождения загрязняющих веществ, поступающих с поверхности, в зоне аэрации (для консервативных загрязнителей), а также падение их концентрации (для неконсервативных). Наконец, для учета реального, неоднородного разбавления мигрирующих в пласте загрязнителей, характера профильного перераспределения вещества под влиянием наведенной инфильтрацией вертикальной скорости фильтрации, а также вызванных инфильтрацией дисперсионных эффектов, особенно важных для ореолов рассеяния в гетерогенных пластах, задача должна решаться, как минимум, в профильной двумерной постановке.

9.3.3. Особенности схематизации миграционного потока в условиях плотностной конвекции

Профильная, а подчас и плановая структура миграционного потока может претерпеть существенные изменения, если на рассмотренные в разд. 9.3.2 механизмы переноса накладывается плотностная конвекция. Эти изменения могут быть значимыми, даже когда допустимо не учитывать влияние непостоянства плотности флюида на структуру фильтрационного потока (см. разд. 9.2.1); именно такой простейший случай был рассмотрен в разд. 2.3.3, где было показано, как плотностная конвекция меняет положение и форму ореола рассеяния. При плановой фильтрации и больших расстояниях переноса, когда перемещение фронта загрязнения идет преимущественно вдоль напластования (с образованием наклонной границы раздела), отражением значимости плотностной конвекции может служить расчетная длина такого наклонного «языка» загрязненных вод l_p по сравнению с общей длиной переноса L : величиной l_p можно пренебречь, примерно когда

$$\frac{L I K_x}{K_z m \Delta \bar{\rho} \cos \alpha} > 100, \quad (9.2)$$

где α — угол падения пласта мощностью m .

Влияние плотностной конвекции на форму ореола рассеяния отражает критерий (2.48). Для типичных условий, когда величина δ_T/L имеет порядок 10^{-3} – 10^{-4} , а градиенты — порядок 10^{-2} , получаем, что значение $\Delta \bar{\rho}$ не должно превышать десятых-сотых долей процента; для анизотропных толщ эти предельные значения могут быть увеличены в $\sqrt{K_x/K_z}$ раз.

В целом схематизация процесса, определяющегося параллельным действием поперечной дисперсии и плот-

ностной конвекции, связана с исключительными трудностями, особенно когда загрязняющие стоки поступают из источников ограниченной протяженности (по сравнению с характерной длиной переноса). В этих условиях трехмерный миграционный процесс часто принципиально не может быть сведен к двумерному, т.е. возможности предварительной схематизации структуры миграционного потока ограничиваются самыми общими соображениями. Так, при анализе начальной стадии загрязнения *поверхностными* стоками, когда они довольно интенсивно погружаются в глубь пласта, главные особенности такой субвертикальной миграции определяются ограниченностью пласта по мощности и его профильной анизотропией, в сочетании с плотностным градиентом, а внешние гидродинамические границы весьма слабо влияют на перенос (пласт можно считать неограниченным по простираанию). В более поздние периоды, когда стоки достигают подошвы пласта и перемещаются по потоку подземных вод, пространственное положение интрузии стоков контролируется в большей степени перепадами напоров вдоль напластования, так что пренебрежение профильной анизотропией и вертикальной скоростью фильтрации слабо влияет на общее развитие процесса.

Существенно по иному проявляется роль плотностной конвекции при субвертикальном подтягивании некондиционных вод от *глубинных* источников (как правило, естественного происхождения). При этом во многих типовых ситуациях недопустимо пренебрегать различиями в плотности природных вод; однако, обычно имеющая место четкая исходная стратификация разреза по плотности делает весьма эффективным использование традиционных приемов описания гидродинамических полей при помощи функций приведенных напоров (разд. 1.2.2).

Важнейшим аспектом схематизации здесь является упорядоченное представление водоносных толщ. Это объясняется тем, что надежность оценок во многом определяется корректностью задания начальных, чаще всего сильно неоднородных по характеру исходных концентрационных распределений, условий, контролирующих стратификацию природных растворов по плотности, а также степенью учета в модели профильной фильтрационной неоднородности и анизотропии пород. Достаточно типовыми здесь являются две расчетные ситуации, отражающие: а) особенности субвертикального движения соленых вод в толщах без выдержанных водоупорных слоев и б) особенности плановой фильтрации в гетерогенных слоистых толщах, где соленые воды отделены от эксплуатируемых горизонтов относительными водоупорами или формируют упругие запасы последних. При этом влиянием гидродисперсии (и продольной, и поперечной) можно в первом приближении пренебречь: она обычно затушевывается «кажущимся» рассеянием компонентов, обусловленным существенно разновременным подтягиванием к водозабору растворов из различных гидрохимических зон в условиях сильной деформации гидродинамической сетки движения подземных вод. Поэтому часто имеет смысл рассматривать миграцию преимущественно в рамках расчетной схемы поршневого вытеснения. Использование конечных аналитических соотношений упрощается в том случае, когда допустимо сведение водозаборного узла, включающего, как правило, совокупность скважин, к фиктивной водоприемной выработке — круговой или линейной.

9.3.4. Схематизация физико-химических условий и процессов миграции неконсервативных компонентов

Наиболее общие допущения физико-химической схематизации, традиционные для теории миграции подземных вод, сводятся к следующему:

1) термодинамические условия априорно заданы (чаще всего считаются постоянными) независимо от миграционного процесса;

2) миграция каждого из компонентов рассматривается обособленно, без учета взаимного их влияния при оценке физико-химического состояния изучаемой системы;

3) хотя для пластовых, особенно — загрязненных растворов характерно многообразие химических состояний содержащихся в них элементов, все оценки проводятся лишь для превалирующих миграционных форм с известными термодинамическими параметрами.

Несмотря на то, что эти допущения во многих случаях можно принять с довольно явной «натяжкой», они все же широко используются на практике из-за слабой разработанности иных подходов, трудности их реализации и необеспеченности их исходной информацией. В принципе, конечно, миграционная схематизация должна включать в себя элементы термодинамического анализа изучаемых многокомпонентных систем в их подвижном взаимодействии с горными породами.

Однако в настоящее время не разработаны ни теоретические, ни практические методы решения этой задачи, так что упомянутые предпосылки часто принимаются без дальнейших комментариев. Следует учесть, что тем самым в расчетные модели уже внесен элемент неопределенности, оценке значимости которой в каждом конкретном случае необходимо уделять особое внимание; возможными направлениями такой оценки яв-

ляются термодинамический анализ применительно к исходному раствору (первый ориентир в прогнозных построениях) и анализ фактических данных режимных гидрогеохимических наблюдений для интерпретации физико-химических процессов в мигрирующем растворе. В отдельных (относительно простых) случаях и при хорошей обеспеченности исходной информацией удастся хотя бы частично отказаться от упомянутых допущений и провести уточненный миграционный прогноз.

Итак, далее мы будем говорить, в основном, о возможностях дифференцированных — «покомпонентных» — оценок. Исследование процессов миграции высококонцентрированных промстоков (рассолов), для которых главным показателем, контролирующим качество вод, служит их общая минерализация, обычно можно ориентировать на анализ условий переноса какого-либо одного «маркирующего» компонента, например, хлорид-иона. Во всех других вариантах гидрогеохимическая схематизация опирается на эффективные приемы, обычно также позволяющие учитывать разнообразные взаимодействия в сложных многокомпонентных системах через традиционно используемые простейшие («однокомпонентные») модели. Такого рода упрощения достигаются благодаря выполнению ряда предпосылок.

Главная из них связана с собственно гидрохимическим характером мигрирующих растворов, образующих буферную систему «избыточных» ионов (так называемых макрокомпонентов) и систему «дефицитных» ионов (микрокомпонентов). Порядковые различия в концентрациях этих компонентов позволяют строить модели их переноса на основе иерархической соподчиненности. Считается, что физико-химические взаимодействия в системе дефицитных компонентов не меняют потенциал массопереноса в смежной системе; в то же время, концентрации макрокомпонентов и взаимодействия между ними и с породой служат потенциал-задаю-

щими характеристиками, определяющими активность и условия миграции микрокомпонентов.

Далее, для рассматриваемых слабоконцентрированных растворов (значения их ионной силы I не превышают 0,05-0,1, что обычно соответствует минерализации до 3-5 г/л), можно не принимать в расчет химические внутрифазовые реакции (такие, например, как комплексообразование) между анионами и катионами в системе макрокомпонентов. Учитывая при этом, что главные анионы — Cl^- , SO_4^{2-} , HCO_3^- (CO_3^{2-}) являются относительно инертными компонентами, их перенос может рассматриваться без учета взаимодействия с породой — на базе моделей миграции трассеров.

В трансформации катионного состава (главные компоненты — Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , Mg^{2+}) первостепенное значение имеют ионообменные реакции, причем в ряде случаев четырехкомпонентная система может быть сведена к двухкомпонентной — путем объединения пар катионов щелочных и щелочноземельных элементов — и даже к однокомпонентной системе — посредством «изотермического» представления ионообменных реакций (на основе принципа сохранения эквивалентности зарядов и емкости поглощения).

Данный тип межфазового взаимодействия характерен и для системы микрокомпонентов. Однако в ней, как правило, параллельно протекают процессы физической сорбции и реакции поверхностного комплексообразования, так что на практике реально приходится иметь дело с опытными изотермами, обобщенно отражающими интенсивность нескольких процессов, причем при характерных соотношениях между концентрациями микро- и макрокомпонентов эти процессы протекают в линейной (с позиций их изотермического выражения) области.

Анализ процессов осаждения-растворения целесообразно сводить к двум основным расчетным ситуациям:

1) осаждение (растворение) в первоначально пересыщенных (недонасыщенных) растворах; 2) осаждение (растворение), провоцируемое процессами смешения сточных и пластовых вод в пределах дисперсионных зон. Особыми являются случаи, когда эти процессы стимулируются другими параллельно протекающими реакциями, например, ионным обменом. Тогда возникают так называемые «барьерные» эффекты — происходит резкое разубоживание (или, наоборот, концентрирование) растворов в пределах узких гидрогеохимических зон с подвижными границами (разд.6.1.1.3).

Для катионов в системе дефицитных компонентов весьма характерны реакции комплексообразования, которые допустимо рассматривать в предпосылке о слабом влиянии этих реакций на изменение содержаний в мигрирующем растворе главных анионов — комплексообразователей, причем показатели степени закомплексованности катионов выступают здесь в качестве взаимонезависимых параметров.

Перейдем теперь к более частным аспектам схематизации физико-химических процессов. Из важнейших упрощающих предпосылок по поводу гетерогенного физико-химического взаимодействия подземных вод с горными породами выделим следующие:

1) пренебрежение кинетикой реакций, т.е. введение предпосылки о локальном равновесии (ПЛР);

2) аппроксимация зависимостей интенсивности реакций от концентрации соответствующих компонентов линейными изотермами.

Первое допущение часто оказывается вполне приемлемым для процессов сорбции, ионного обмена и некоторых других (см. разд.6.1.1); исключение для этих процессов должно делаться применительно к лабораторным и частично полевым экспериментам, продолжительность которых не превышает десятков ча-

сов, а иногда — первых суток. Процессы растворения-осаждения обычно нуждаются в учете кинетики.

Второе из упомянутых допущений диктуется преимущественно желанием максимально упростить математическую формализацию миграционных процессов, учитывая влияние гетерогенных реакций обмена в эффективных емкостных параметрах среды. В принципе от него можно отказаться, однако конечное уточнение описания процесса часто оказывается сомнительным. Поэтому в большинстве случаев можно, очевидно, ориентироваться на это допущение как на первое приближение. Так, принято считать, что равновесный характер межфазовых сорбционных и обменных процессов, имеющих линейные изотермические представления, позволяет аддитивно включать параметры этих процессов (прежде всего, коэффициент сорбционного распределения K_d) в расчетные, эффективные емкостные параметры пород — активную пористость (трещиноватость). Вместе с тем, такой эффективный прием не всегда допустим, о чем все больше свидетельств в литературе, посвященной исследованию поведения расчетных коэффициентов сорбционного распределения. Строго говоря, результаты статических экспериментов (даже с хорошо подобранными смесями растворов, отвечающих реальным загрязнителям), часто не дают значений параметра K_d , которые будут удовлетворительно «работать» в полевом масштабе, ибо миграционные потоки могут формировать гидрогеохимические условия, существенно отличные от воспроизводимых в лаборатории.

То же самое можно сказать о параметрах нелинейных изотерм, которые также оказываются неинвариантными по отношению к возможному диапазону изменения концентрации ионов. Такая неинвариантность усиливается при комплексообразовании и смене состава обменных катионов. С учетом сделанных оговорок, в некоторых частных вариантах путем включения в емкостные

параметры описываются процессы растворения и осаждения солей — если они протекают в рамках первой из упомянутых выше ситуаций.

Важно, что сочетание обеих упомянутых предпосылок позволяет свести формальный аппарат миграции к тем же моделям, что и без учета гетерогенных процессов физико-химического взаимодействия.

Что же касается возможных гомогенных реакций, протекающих непосредственно в подземном растворе (деструкция, радиоактивный распад и др.), то они обычно носят ярко выраженный кинетический характер. Как правило, удовлетворительная аппроксимация достигается в рамках моделей физико-химической кинетики первого порядка (см. разд. 5.2.3.3). В этом случае реакции преобразования растворов в пласте легко учитываются единственным показателем — обобщенным коэффициентом деструкции (распада). При этом могут формироваться стационарные ореолы — даже когда компоненты мигрируют по одномерной схеме, т.е. без дополнительного участия процессов поперечного рассеяния; в гомогенных породах такая возможность реализуется для любого расчетного сечения, расположенного за фронтом поршневого вытеснения ($x < x_0 = vt/n$), при выполнении условия $\alpha_p t > 2-3$ (где α_p — обобщенный коэффициент деструкции, см. разд. 6.1.3.3).

9.4. О значении схематизации для расширения границ применимости аналитических методов

Итак, можно констатировать, что принципы миграционной схематизации отличаются существенно более высокой сложностью, нежели привычные принципы геофильтрационной схематизации и лишь в редких случаях могут быть сведены к жестким количест-

венным критериям. В то же время, при изучении миграционных процессов, как правило, гораздо сильнее сказывается дефицит исходной информации, причем главным ограничивающим моментом чаще всего оказывается недостаточная обоснованность фильтрационной схемы (см. разд. 9.2). Поэтому, проводя собственно миграционную схематизацию, следует, по крайней мере, начальные ее этапы связывать по возможности с наиболее грубыми и простыми моделями миграции (обычно это модели миграции трассера в асимптотических режимах переноса), постоянно помня о необходимости соответствия модели качеству информации; с появлением новой информации реализуются следующие этапы миграционной схематизации согласно общим принципам адаптации и обратной связи.

Остановимся теперь на некоторых обобщающих выводах, касающихся возможностей теоретического описания переноса тех или иных мигрантов в характерных генетических комплексах горных пород, — имея, в частности, в виду, что для рассмотренных аналитических методов исследования миграционных процессов существует альтернативный вариант — обращение к математическому (численному) моделированию.

1. Для миграции консервативных компонентов (трассеров) в составе физически нейтральных растворов в однородных, гомогенных по фильтрационным свойствам пластах, как правило, нетрудно найти аналитическое описание. Соответствующие расчетные зависимости получены для основных типовых форм миграционных потоков, отражающих довольно разнообразные условия гидродинамического взаимодействия концентрационных источников с подземными водами. В таких условиях адекватность описания техногенеза конечными аналитическими формулами достигается на базе развиваемых здесь принципов миграционной схематизации.

2. Рассмотренные модели допускают обобщение и на случай миграции промстоков, отдельные компоненты которых участвуют в физико-химических взаимодействиях с породой и между собой. Правда, неясными до конца остаются возможности учета гидрогеохимических процессов при малых числах Пекле, когда формируются обширные зоны дисперсии, в пределах которых происходит интенсивное смешение техногенных и пластовых вод и, следовательно, меняется приоритетность миграционных форм и механизмов межфазового взаимодействия компонентов.

Кроме того, необходимо иметь в виду, что исследование физико-химических процессов выполнялось, в основном, в рамках одномерных моделей массопереноса, тем самым из рассмотрения исключались важные механизмы, обеспечивающие взаимодействие потоков подземных вод со смежными зонами гидросферы, прежде всего, с зоной аэрации, формирующей газовый и органосолевой режимы этих потоков. Ясно поэтому, что недоучет в аналитических решениях одной из составляющих механического переноса может иногда привести к качественно неверным представлениям о гидрогеохимической направленности миграции.

3. Весьма серьезные ограничения на использование рассмотренных аналитических моделей накладывает гравитационная дифференциация вещества при внедрении в пласт «тяжелых» (или «легких») промстоков. В этом случае влияние массопереноса на фильтрационную картину обычно не позволяет учесть на аналитическом уровне всю совокупность действующих факторов (в частности, роль профильной анизотропии фильтрационных свойств пласта в сочетании с гидродисперсионным рассеянием, что предопределяет ярко выраженный трехмерный характер ореолов засоления подземных вод при фильтрации стоков из техногенных бассейнов). Очевидно также, что плотностная кон-

векция — это главный фактор, снижающий надежность прогнозов субвертикального подтягивания высокоминерализованных растворов к несовершенным гидродинамическим границам на базе линейных кинематических уравнений.

4. Разработанные для исследования детерминированных моделей макродисперсии аналитические приемы позволяют довольно эффективно учитывать гетерогенность пород с регулярной структурой (в первую очередь, слоистые и трещиновато-пористые комплексы), если для описания внутрислоевого массообмена допустимы известные асимптотические приближения. При этом основой для долговременных миграционных прогнозов обычно может служить асимптотическая (осредненная) диффузионная модель макродисперсии, а для относительно ранних этапов миграции — последовательно сменяющие друг друга расчетные схемы послойного переноса, неограниченной и сосредоточенной емкости. Нерегулярная фильтрационная неоднородность, естественно, ограничивает возможности такого рода оценок; для диапазонного анализа степени их неопределенности иногда полезно привлекать стохастические модели макродисперсии, позволяющие исследовать роль неинвариантности расчетных схем и параметров по отношению к пространственно-временным диапазонам миграции. Это, впрочем, не исключает частичного «смыкания» моделей двух упомянутых типов, прежде всего, — по линии представления в диффузионной модели асимптотических параметров, отражающих стохастические свойства среды.

В расчетные схемы макродисперсии могут включаться и некоторые равновесные физико-химические процессы. Однако уровни проявления гетерогенности для различных процессов и участвующих в них компонентов могут не совпадать. Поэтому построение соответствующих моделей требует в каждом конкретном случае специ-

ального обоснования, проводимого, в частности, методами математического моделирования; впрочем, очень часто и это проблематично ввиду дефицита необходимой информации.

5. При оценке и прогнозе реальных процессов загрязнения подземных вод в конкретных условиях техногенеза огромное значение для определения эффективности того или иного теоретического описания массопереноса имеет обоснованность моделей исходной информацией. На деле степень адекватности любой модели натурной обстановке будет ограничиваться, прежде всего, качеством геофильтрационной информации, причем неполнота последней, как правило, не побуждает к использованию в практике сколь-нибудь усложненных — пусть и безупречных в теоретическом плане — моделей массопереноса. Если к этому добавить трудности параметрического обеспечения стохастических моделей, то становится понятным, что практические расчеты могут сейчас реально базироваться лишь на тех или иных модификациях детерминированных моделей (преимущественно, как уже отмечено, — диффузионного типа), с частичным, при необходимости, отражением в их параметрах стохастических свойств среды.

Именно слабости информационной базы сделали аналитические подходы вполне дееспособной, по нашему мнению, альтернативой или эффективным дополнением к методам численного моделирования прогнозных задач. Что же касается важнейшего элемента прогноза — схематизации, то здесь аналитическим методам должно обычно отдаваться явное предпочтение.

Особенности построения и использования прогнозных моделей миграции существенно различаются для двух главных типов источников загрязнения — поверхностных, связанных с техногенными бассейнами или полями площадной инфильтрации, и подземных, формирование которых обусловлено смещением природной гидрохимической зональности.

Для поверхностных источников загрязнения мы предлагаем, в свою очередь, различать две типовые расчетные ситуации: первая из них связана с оценками качества вод вблизи локализованных источников (такую роль выполняют обычно бассейны промстоков); вторая — обусловлена необходимостью прогнозирования последствий поступления (путем инфильтрации или перетекания) вод иного состава на площадях, сопоставимых с областью распространения водоносного горизонта. Локализованные источники загрязнения оказывают заметное влияние на плановую структуру сетки движения подземных вод или же создают предпосылки для интенсивного развития в пласте поперечного (планового) дисперсионного разноса вещества. Рассосредоточенные — площадные — источники загрязнения формируют миграционные потоки со слабоконтрастными плановыми границами, а специфика загрязнения определяется преимущественно характером профильного строения водоносного пласта и интенсивностью инфильтрации на различных участках. В прогнозных задачах оценка воздействия сосредоточенного источника чаще всего производится для области, многократно превышающей его размеры; для площадного же источника область, представляющая наибольший интерес при прогнозных

оценках, обычно более-менее совпадает с областью техногенного воздействия на подземные воды. Понятно, вместе с тем, что дифференциация источников загрязнения на локальные и площадные должна увязываться с пространственно-временным масштабом рассмотрения процесса: не исключено, например, что один и тот же источник может быть отнесен в зависимости от изменения упомянутого масштаба к двум различным типам.

В настоящем разделе, в основном, рассматриваются возможности аналитических методов в исследовании обозначенных задач, причем специально подобраны сравнительно простые варианты последних. Как уже отмечено, в ряде практически значимых ситуаций аналитические методы могут оказаться даже более эффективными по сравнению с альтернативными методами исследования миграционных процессов на математических (численных) однокомпонентных моделях. Например, это справедливо при необходимости учета в модельных построениях внутренней (регулярной) гетерогенности пород или профильной неоднородности их фильтрационных свойств — особенно, если имеет место деформация сетки движения подземных вод в разрезе в сочетании с гидродисперсионными эффектами. Вместе с тем, нам ни в коем случае не хотелось бы настаивать на антагонизме численных и аналитических методов: при умелом исполнении именно их сочетание обеспечивает наиболее качественные прогнозы. Возможности использования численных методов для изучения упомянутых прогнозных ситуаций будут отражены в разд. 10.4 и 10.5 на примерах компьютерных программ, нашедших широкое практическое применение.

10.1. Прогноз концентрационных полей на участках размещения поверхностных бассейнов промстоков и других локальных (сосредоточенных) источников загрязнения

10.1.1. Плановые миграционные модели

Они применяются при достижении асимптотического режима переноса, когда оправдано осреднение концентрации вещества по мощности пласта или в пределах выделяемых квазигомогенных его элементов. Как правило, такие предпосылки создаются при формировании *ореолов растекания* (разд. 9.3.2), так что контролирующим процессом является конвекция вдоль линий тока ψ_i . Для того, чтобы определить пространственное положение концентрационного фронта поршневого вытеснения в момент t_p , необходимо предварительно построить гидродинамическую сетку движения и рассчитать скорость фильтрации вдоль характерных линий тока. Тогда длины пробега меченных частиц вдоль выделенной линии тока l_o находятся посредством суммирования элементарных интервалов пути $\Delta l_j = v_{i_{cp}} \Delta t_j / n$:

$$l_o \approx \frac{1}{n} \sum_{j=1}^k v_{i_{cp}}(l_j) \Delta t_j; \quad (10.1, a)$$

здесь n — пористость (трещиноватость) пласта; $j = 1, 2, \dots, k$ (k — принятое при расчетах число интервалов пути (l_j) и времени); $v_{i_{cp}}(l_j)$ — осредненное значение скорости фильтрации на этих интервалах.

Наоборот, временная координата фронта поршневого вытеснения, т.е. время его продвижения вдоль траектории меченной частицы на расстояние L_1 , определяется из кинематического выражения

$$t_o \approx n \sum_{j=1}^k \Delta l_j / v_{i_{cp}}(l_j). \quad (10.1, б)$$

Расчеты по лентам тока дополняются оценками роли продольных гидродисперсионных эффектов, приводящих к смешению сточных и пластовых вод на фронте взаимодействия. С этой целью используется приближенное равенство:

$$\Delta l_{n_i} \approx 6,6 \sqrt{\delta_L l_o} — \quad (10.3)$$

аналог известного соотношения, полученного для фундаментальной задачи одномерной микродисперсии (2.11). Подобная детализация особенно важна при анализе миграции в трещиноватых пластах, обладающих высокими рассеивающими свойствами.

Для участков, прилежащих к источнику загрязнения, оправдано рассмотрение двумерного массового потока в квазистационарной постановке, когда пространственное положение ореола растекания определяется характеристиками нейтральной линии тока. Для идеализированного случая исходного (естественного) плоскопараллельного фильтрационного потока рассчитываются координаты некоторых характерных точек (x^0 , y^0 и y^∞), определяющие: а) максимальное продвижение трассера в направлении против естественного потока подземных вод (x^0); б) поперечный (конвективный) «разнос» компонентов в направлении, ортогональном направлению исходного потока, имеющего удельный расход $q_e = v_e m$ — вблизи границ источника (y^0) и в) на весьма большом удалении (y^∞). Так, если допустимо сведение бассейна к эффективному источнику (рис. 10.1), линейный размер которого в направлении, ортогональном направлению регионального потока, составляет $2b_0$, то x^0 , y^0 и y^∞ имеют значения:

$$x^0 = \frac{b}{\operatorname{tg}(2\pi b_0 q_e / Q_0)}, \quad y^0 = 2b_0 + \frac{Q_0}{2q_e}, \quad y^\infty = 2b_0 + \frac{Q_0}{q_e}. \quad (10.4)$$

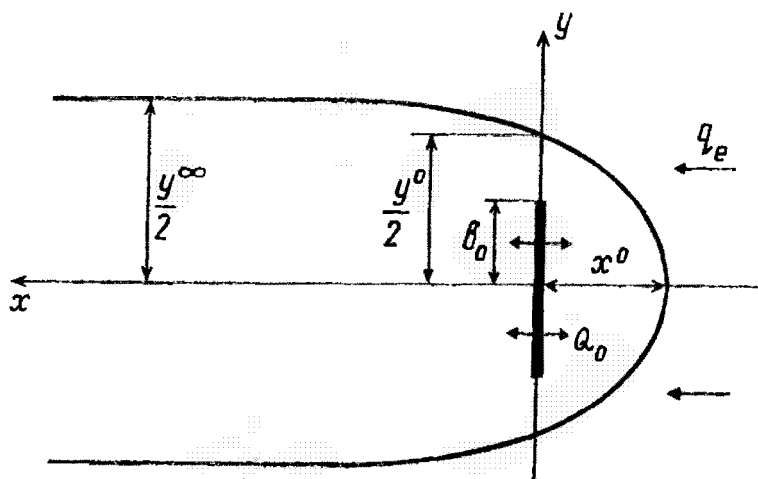


Рис. 10.1. Характерные точки нейтральной линии тока для условий гидродинамического взаимодействия линейного бассейна с естественным потоком подземных вод

При $2b_0 \rightarrow 0$ приходим к случаю точечного источника.

Для анализа миграции от пассивных в гидродинамическом отношении источников, дающих ореолы рассеяния (разд. 9.3.2), привлекаются плановые модели, учитывающие эффекты поперечной дисперсии. Характерной особенностью этих решений является наличие у них стационарных асимптотик (2.25)–(2.27), описывающих, таким образом, предельные масштабы загрязнения водоносных пластов.

Обращение к рассматриваемым здесь плановым моделям — наиболее эффективный способ учесть при описании миграции вещества плановую неоднородность и внутреннюю гетерогенность пластов, а также

сопровождающие миграцию физико-химические взаимодействия и трансформации.

Так, на весьма длительных этапах миграции в *гетерогенных* стратифицированных толщах поперечная дисперсия и перетекание приводят к выравниванию концентрационного профиля в пласте, что допускает рассмотрение процесса в рамках усредненных асимптотических моделей; расчетными параметрами при этом являются суммарная емкость пород — n^* (параметр, близкий к средневзвешенной по мощности пласта пористости) и коэффициент продольной макродисперсии D , в котором эффективно учитываются все кинетические механизмы межслоевого взаимодействия и соотношение мощностей хорошо и слабофильтрующих слоев. Правда, всегда надо помнить, что такого рода осредненные (квазигомогенные) схемы применимы на этапах миграции, по продолжительности нередко соизмеримых с периодом эксплуатации объекта.

Анализ переноса в трещиновато-пористых породах, пласты которых обычно не имеют выдержанных по площади водоупорных профильных зон, может эффективно проводиться на базе расчетных моделей, рассмотренных в разд. 3.2. При этом предварительная плановая и профильная фрагментация фильтрационного потока линиями тока ψ_i позволяет, пренебрегая в первом приближении поперечной дисперсией между фрагментами, использовать квазиодномерные варианты этих схем, вводя в соответствующие аналитические зависимости характерное время $t_0 = t_0(\psi_i)$. При $\tau > \eta > 10$ приходим к асимптотическому решению (2.13), в котором необходимо параметры n и δ заменить их «гетерогенными» аналогами:

$$n^* = n + n_0, \quad \delta_L^* = \nu / \alpha_M n_0. \quad (10.5)$$

В плановых моделях миграции, допускающих осреднение концентрации по мощности пласта, достаточно просто учитывается площадная инфильтрация. Для этого формально могут быть использованы приемы, разработанные для включения в модели процессов деструкции: в соответствующих аналитических решениях (разд. 6.1.3.3) коэффициент λ_p заменяется на соотношение $\varepsilon^* = \varepsilon/m$, где ε — величина инфильтрации, m — средняя мощность пласта, по которому идет перенос загрязняющих растворов.

Физико-химические взаимодействия обычно не искажают структуру миграционных потоков. Поэтому при описании миграции химически активных или неустойчивых компонентов базисными остаются расчетные зависимости, детально рассмотренные ранее. Если при этом оправдано обращение к асимптотическим квазигомогенным моделям, то в них легко учитываются равновесные механизмы сорбции: увеличение фактической емкости пород n на величину Δn , определяемую параметрами изотермы сорбции, позволяет скорректировать положение фронта поршневого вытеснения; например, при сорбции, подчиняющейся линейной изотерме Генри, $\Delta n = K_d \rho$ (K_d — коэффициент распределения). При описании фильтрации в гетерогенных средах дополнительная емкость Δn_0 вводится в модель и для тех элементов (слабопроницаемых глинистых слоев, пористых блоков трещиноватых пород), насыщение которых происходит диффузионным путем: часто именно в этих элементах сорбционные (а также ионообменные процессы) протекают наиболее интенсивно. При необходимости отражения в модели кинетики обменных процессов, она может быть учтена расчетными показателями дисперсии, хотя такой прием требует достаточно внимательного обоснования [7].

Для описания однонаправленных процессов распада неустойчивых ингредиентов целесообразно использовать простейшие (и в то же время наиболее общие — с позиций осреднения процессов) линейные кинетические модели. В гомогенных средах, где распад компонентов происходит только в фильтрующих зонах, за фронтом переноса весьма быстро достигается стационарное концентрационное распределение c_λ , причем

$$\frac{c_\lambda}{c} = e^{-\lambda_p t_0} \quad (10.6)$$

где λ_p — обобщенная константа скорости распада; c — концентрация инертного индикатора в тех же условиях, фронт которого проходит через расчетную точку в момент $t = t_0$ (ψ_i). Для плановых двумерных ореолов рассеяния в одномерном фильтрационном потоке $t_0 = xn/v$ (для сорбирующихся компонентов $t_0 = x(n + \Delta n)/v_e$).

10.1.2. Профильные миграционные модели

Они отражают возможность дифференциации компонентов вдоль вертикали, вызванной:

- 1) закономерной профильной неоднородностью водоносных толщ, коль скоро ее проявление не удастся учесть в эффективных параметрах макродисперсионных моделей;
- 2) поступлением вод иного состава в пределах ограниченной зоны водоносного пласта;
- 3) профильной двумерностью процессов, обусловленной, в частности, деформацией профильной структуры массового потока под влиянием плотностной конвекции или бассейна промстоков, существенно несовершенного по степени вскрытия водоносного комплекса (когда сам характер граничных условий определяет неоднородность гидрохимического разреза).

Рассмотрим сначала на частном примере совокупное воздействие первых двух факторов.

10.1.2.1. Локальный источник загрязнения в двухслойном пласте

Исследование задач миграции в профильной постановке имеет первостепенное значение для комплексов стратифицированных пористых пород, в которых выделяются выдержанные по простиранию зоны с заметно различающейся проницаемостью. Эти зоны рассматриваются в качестве базовых элементов при построении детерминированных моделей миграции, которые описывают этапы загрязнения подземных вод, допускающие пренебрежение ролью гидродисперсионного межслоевого обмена.

Пусть поступление загрязненных вод определяется положением локального поверхностного источника шириной a — рис. 10.2. Будем при этом считать, что протяженность источника в направлении y , ортогональном направлению потока x , достаточно велика, с тем чтобы пренебречь деформацией линий тока в плане. Влияние плановой поперечной дисперсии в этом случае также, как правило, невелико.

Водопроводимости верхнего T_1 и нижнего T_2 слоев равны, соответственно, $T_1 = \kappa_1 m_1$, $T_2 = \kappa_2 m_2$ (причем $T_1 + T_2 = T = \text{const}$), при значениях пористости n_1 и n_2 ; на границе области (при $x = 0$) суммарный расход потока $q = q^0$, удельная интенсивность фильтрационных потерь из источника равна ε_0 . В физической интерпретации такая постановка задачи примерно отвечает экранированному загрязненному водотоку или вытянутому в плане бассейну промстоков (фильтрация без подпора).

* Раздел написан совместно с Н. Ф. Карачевцевым.

Из решения фильтрационной задачи находятся компоненты скорости фильтрации $v_{xj}^{(i)}$ и $v_{zj}^{(i)}$ в каждом из i -х слоев в j -ой зоне [10]. Далее интегрирование системы кинематических уравнений

$$n_i \frac{dx}{dt} = v_{xj}^{(i)}, \quad (10.7)$$

$$n_i \frac{dz}{dt} = v_{zj}^{(i)}$$

при $i = 1, j = 1$ на отрезках $[0; t]$, $[x_0, x]$ и $[0, z]$ приводит к зависимостям:

$$\bar{x} = (\bar{x}_0 + \gamma) \exp \left(\frac{K_1 \varepsilon_0}{n_1 T} t \right) - \gamma, \quad (10.8)$$

$$\bar{z} = \frac{T}{T_1} \left[1 - \exp \left(\frac{K_1 \varepsilon_0}{n_1 T} t \right) \right],$$

где $\bar{x} = x/a$, $\bar{z} = z/m$, $\gamma = q_0/\varepsilon_0 a$. Исключая временную переменную, находим уравнение линий тока в верхнем ($0 \leq \bar{z} \leq 1$) слое:

$$\bar{z} = \frac{T}{T_1} \left(\frac{\bar{x} - x_0}{\bar{x} + \gamma} \right). \quad (10.9)$$

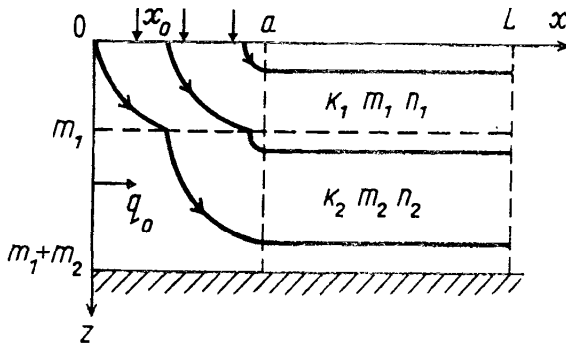


Рис. 10.2. Схема к расчету движения стоков в двухслойном пласте

Отсюда легко получить координаты характерных точек, а также условие попадания меченной частицы из первого слоя во второй:

$$\gamma \leq \frac{T_2}{T_1} (1 - \bar{x}_0) - \bar{x}_0, \quad (10.10)$$

или для крайней — «нейтральной» ($x=0$) — линии тока:

$$q^0/\varepsilon_0 a \leq T_2/T_1.$$

Время достижения меченной частицей контакта слоев ($\bar{z} = 1$) составляет $t = \frac{n_1 T}{\varepsilon_0 K_1} \ln \left(\frac{T}{T_2} \right)$. С учетом последнего соотношения, решение уравнений (10.7) имеет вид:

$$\bar{x} = (\bar{x}_0 + \gamma) \cdot \left(\frac{T}{T_2} \right)^{1 - k_2 n_1 / k_1 n_2} \cdot \exp \left(\frac{\varepsilon_0 K_2}{n_2 T} \cdot t \right) - \gamma, \quad (10.11)$$

$$\bar{z} = 1 + \bar{m}_2 \left[1 - \left(\frac{T}{T_2} \right)^{k_2 n_1 / k_1 n_2} \cdot \exp \left(\frac{\varepsilon_0 K_2}{n_2 T} \cdot t \right) \right],$$

где $\bar{m}_2 = m_2/m_1$. Отсюда следует уравнение траекторий движения частиц в нижнем слое ($1 \leq \bar{z} \leq 1 + \bar{m}_2$):

$$\bar{z} = 1 + \bar{m}_2 \left(1 - \frac{T}{T_2} \frac{\bar{x}_0 + \gamma}{\bar{x} + \gamma} \right). \quad (10.12)$$

На основе зависимостей (10.9) и (10.12) нами рассчитаны (рис. 10.3) траектории частиц вдоль нейтральных линий тока, берущих начало в точке с координатами (0,0). Как следует из этого рисунка, при заданной величине удельных фильтрационных потерь и фиксированном значении a характер субвертикального движения стоков по пласту зависит от соотношения проводимостей верхнего и нижнего слоев: с ростом проводимости верхнего слоя по сравнению с нижним, глубина проникновения уменьшается. На границе источника (при $\bar{x} = 1$) проникновение стоков вглубь пласта оценивается величиной:

$$\bar{z}_a = 1 + \bar{m}_2 + \frac{1 - \beta\gamma}{1 + \gamma} \quad \text{— при } \gamma < 1/\beta,$$

$$\bar{z}_a = \frac{1 + \beta}{\beta(1 + \gamma)} \quad \text{— при } \gamma > 1/\beta; \quad (10.13)$$

здесь $\beta = T_1/T_2$, $\bar{m}_2 = m_2/m_1$. С другой стороны, как следует из представленных графиков (рис. 10.4), мощность зоны, занятой инфильтрующимися стоками, увеличивается с ростом удельных фильтрационных потерь и проводимости нижнего слоя.

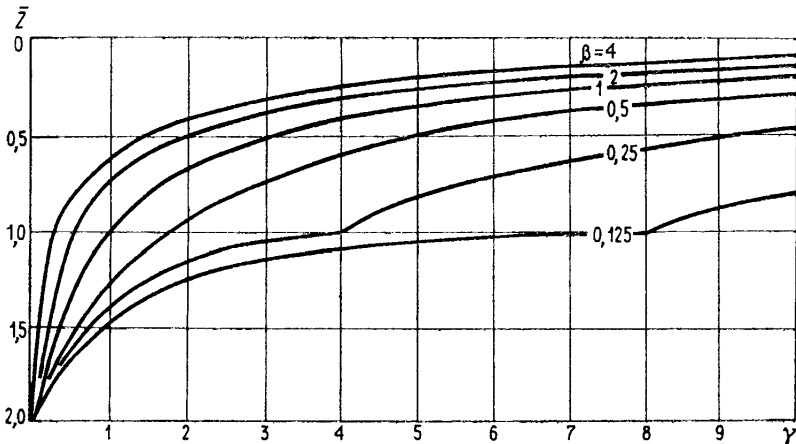


Рис. 10.3. Зависимость глубины проникновения загрязненных вод в сечении $x=a$ от безразмерного параметра $\gamma = q_0/(\epsilon a)$ при различных значениях $\beta = T_1/T_2$

Приведенные зависимости позволяют не только оконтурить область загрязнения подземных вод в профиле водоносного горизонта, но и оценить закономерности изменения концентрации компонентов, подверженных деструкции. Используя временные характеристики решений (10.8) и (10.11), находим:

$$i = \begin{cases} c_{\varepsilon} \left(1 - \frac{T_1}{T} \bar{Z} \right)^{\lambda_p n_1 T / K_1 \varepsilon_0} & \text{— при } 0 \leq \bar{Z} \leq 1 \quad (i = 1), \\ c_{\varepsilon} \left(\frac{T_2}{T} \right)^{K_2 n_1 / K_1 n_2} \cdot \left(1 - \frac{\bar{Z} - 1}{\bar{m}_2} \right)^{\lambda_p n_2 T / K_2 \varepsilon_0} & \text{— при } 1 \leq \bar{Z} \leq 1 + \bar{m}_2 \end{cases} \quad (10.14)$$

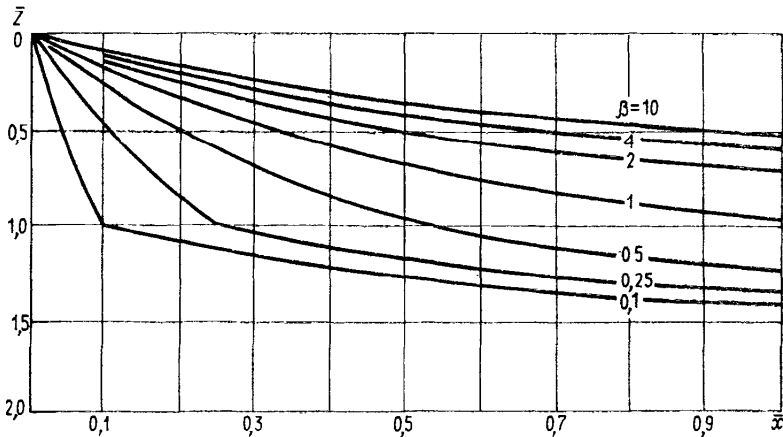


Рис. 10.4. Траектории меченных частиц в двухслойном пласте ($x_0 = 0$) при $\gamma = 1$, $m_1 = m_2$; шифр кривых — значение параметра $\beta = T_1/T_2$

Естественно, что решение (10.14) описывает концентрационное поле за фронтом поршневого вытеснения, положение которого в расчетный момент времени t для каждой траектории (10.9), (10.12) находится из соотношений (10.8)–(10.11). Далее, подставляя в эти зависимости значения $\bar{Z} = \bar{Z}_a(x_0)$, находим концентрации компонентов на линии $x = a$, ограничивающей источник вещества: $c_a^i = c_a^i|_{z=\bar{z}_a}$. Тогда решение для второй зоны ($a < x \leq L$) имеет вид:

$$c_2^i = c_a^i \exp [-\lambda_p (x - a) n_i T / k_i (q^0 + \varepsilon_0 a)] \quad (10.15)$$

— также за фронтом концентрационной волны. Очевидно, что решения (10.14) и (10.15) могут непосредственно использоваться для описания стационарных концентрационных полей (без дополнительных расчетных процедур).

Иллюстрацией практического приложения рассмотренных здесь теоретических представлений может служить анализ особенностей загрязнения подземных вод инфильтрующимися стоками хвостохранилища одного из ГОКов в районе КМА [8]. Двухслойный разрез (рис. 10.5, а) сложен обводненной меловой толщей, подстилаемой песчаными породами; условия на границах области фильтрации, а также соотношения между параметрами даны на том же рисунке (заметим лишь, что хорошо выраженная блоковая пористость мелов позволила принять для длительных — асимптотических — этапов переноса $n_1 = n_2$). Стационарное концентрационное поле (рис. 10.5, б) рассчитано по зависимостям (10.14) и (10.15) для распадающегося вещества — нитратного иона ($\lambda_p = 5 \cdot 10^{-4} \text{ сут}^{-1}$). Как видно, заметная денитрификация загрязненных вод наблюдается уже под дном водоема, где в распределении концентрации нитратов важную роль играет вертикальная составляющая скорости фильтрации. Однако, несмотря на заметное падение концентрации в песчаном слое вблизи входной границы потока, ореол загрязнения по пескам имеет заметно более широкое развитие (по сравнению с размером ореола в меловой толще), что объясняется их повышенной проницаемостью. В целом, получена довольно сложная и в определенной степени парадоксальная картина концентрационных изолиний; вряд ли к ней можно было бы прийти исходя из упрощенных представлений, пренебрегающих, в частности, реальным характером распределения скоростей фильтрации в неоднородном горизонте. Понятно также, что полученные результаты играют важную роль не только при прогнозных оценках, но и при анализе (или планировании) режимных гидрогеохимических наблюдений.

* За исключением узкой полосы вблизи подошвы песчаного пласта, куда при поршневом — без дисперсии — характере миграции стоки не попадают (см. сетку движения на рис. 10.5, а).

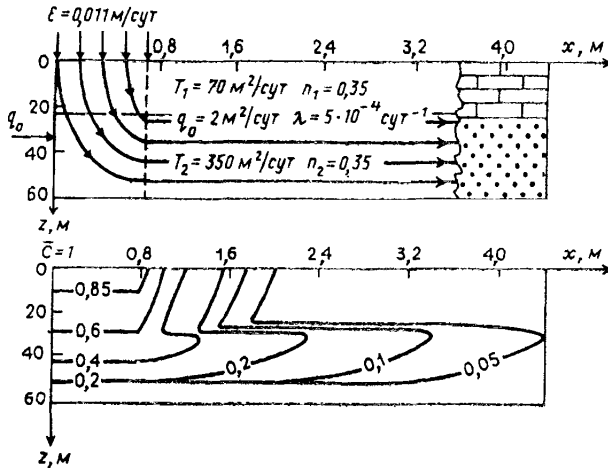


Рис. 10.5. Закономерности нитратного загрязнения подземных вод стоками хвостохранилища (стационарная задача):

а — структура потока и гидрогеологический разрез с исходными данными; б — изолинии концентрации (в относительных единицах)

10.1.2.2. О роли поперечной (профильной) гидродисперсии

Этот фактор проявляется наиболее заметно при миграции от гидродинамически пассивных источников загрязнения. Рассмотрим, для начала, линейный в плане (т.е. точечный — в проекции на вертикальную плоскость) источник вещества вблизи поверхности грунтовых вод, получающих равномерное инфильтрационное питание — рис. 10.6, а.

Будем полагать, что основной транспорт вещества осуществляется под действием горизонтальной конвекции, на фоне которой продольной дисперсией можно пренебречь ($D_L = 0$). При этом очевидно, что в перераспределении вещества по вертикали принимают участие вертикальная конвекция и поперечная гидродисперсия; о сопоставимой роли этих механизмов свидетельствуют низкие значения характерного параметра $Pe_z = (v_z)_{cp} m / D_T \approx m^2 / 2 \delta_T x_0 \delta_T = D_T / v_x$ — константа поперечной гидродисперсии). Приближенное аналитическое решение стационарной двумерной задачи гидродинамического рассеяния может быть получено с помощью базисной концентрационной функции для неограниченного пласта, аналогичной (2.40):

$$c_T = \frac{P_m / v_0}{\sqrt{4\pi \delta_T x'}} \exp [-(Z - Z_0)^2 / 4\delta_T x'], \quad (10.16)$$

где параметр

$$Z_0 = m x' / (x_0 + x') \quad (10.16, a)$$

отражает смещение концентрационных точек по вертикали за счет профильной деформации линий тока (рис. 10.6, а) — см. разд. 2.3.2; здесь P_m — мощность источника вещества, $v_0 = \varepsilon_\sigma x_0 / m$ — скорость фильтрационного потока в сечении $x = x_0$ ($x' = 0$). Как видно из соотношения (10.16а), значения Z_0 и $x(x')$ функционально связаны между собой: чем дальше от точки ввода вещества в пласт ($x_0, 0$) находится расчетная точка x' , тем больше значение Z_0 , которое может ассоциироваться с положением в разрезе (на линии $x = x_0$) некоторого фиктивного концентрационного источника. Тогда суперпозиция решения (10.16) путем последовательного отражения этого источника относительно кровли (граница I рода, где $c = 0$) и подошвы (непроницаемая граница II рода, где $\partial c / \partial Z = 0$) пласта позволяет учесть роль этих границ в формировании концентрационного профиля [10].

* Это ограничение не является принципиальным и вводится для упрощения математической записи.

часть за счет инфильтрационного разбавления оказывается свободной от загрязняющих компонентов.

Данное решение может быть распространено и на случаи другой геометрии источников загрязнения [10].

Рассмотрим теперь формирование профильных ореолов загрязнения от несовершенного (по степени вскрытия пласта) экранированного бассейна с заметной, однако, гидродинамической активностью (рис. 10.6, б), когда площадью инфильтрацией за его пределами можно пренебречь в сравнении с фильтрационными потерями из бассейна.

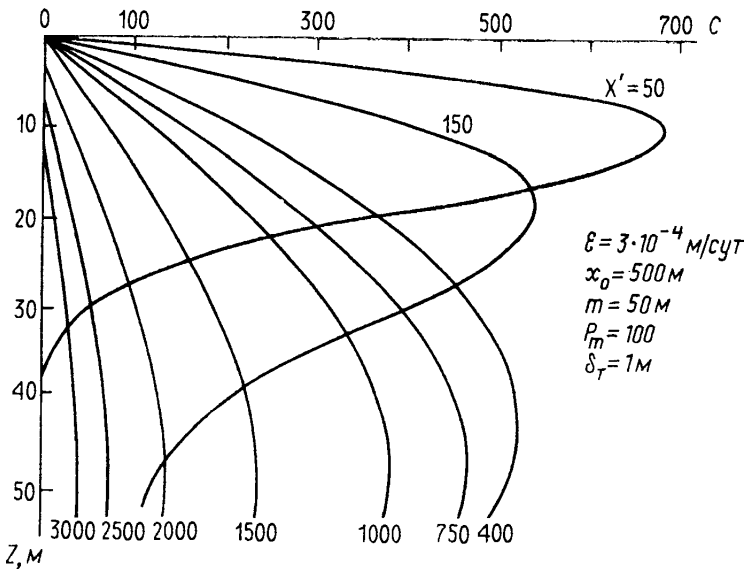


Рис. 10.7. Характер конвективно-дисперсионного распределения концентрации вещества от точечного источника загрязнения в безнапорном потоке при наличии свободной инфильтрации чистых (незагрязненных) вод на поверхность горизонта: $\epsilon = 3 \cdot 10^{-4} \text{ м/сут.}$, $P_m = 100 \text{ кг/м} \cdot \text{сут.}$, $\delta_T = 1 \text{ м}$, $x_0 = 50 \text{ м}$, $m = 50 \text{ м}$

Логично предположить, что в пределах зоны $0 \leq x \leq a$, характеризующейся резкой фильтрационной деформацией потока, значимость гидродисперсионных эффектов минимальна: они развиваются, главным образом, в области горизонтального движения стоков ($x > a$). Однако особенности формирования концентрационных фронтов (в том числе — их гидродисперсионное «размазывание») определяются конечной скоростью вертикальной миграции вод именно в первой зоне. Благодаря последнему обстоятельству, вещество в нижних частях разреза появляется с запаздыванием (по сравнению со временем загрязнения горизонта вблизи уровня подземных вод), так что «поршневая» граница раздела (в отсутствие гидродисперсии) имеет искривленную форму (рис. 10.6, б). Смещение точек данного фронта может быть легко описано, если принять во внимание зависимость:

$$z_a(t) = m (1 - e^{-\varepsilon^* t}) \quad (\varepsilon^* = \varepsilon_0 / mn), \quad (10.17)$$

которая дает представление о положении нижней границы раздела вод разного качества в сечении $x = a$ в момент времени t ; здесь ε_0 — удельная (на единицу площади бассейна) величина фильтрационных потерь. Таким образом, при решении миграционной задачи отрезок $z_a(t)$ может рассматриваться в качестве линейного концентрационного источника переменной длины, ориентированного ортогонально потоку подземных вод с постоянной скоростью фильтрации v_x . Для того, чтобы оценить влияние этого источника на любую из точек (x, z) , достаточно воспользоваться решением [10]:

$$c = \frac{c_E}{2} \sum_{k=-\infty}^{k=\infty} \left\{ \operatorname{erfc} \left[\frac{Z + Z_0(x, t) - 2km}{\sqrt{4D_T x / v_x}} \right] - \operatorname{erfc} \left[\frac{Z - Z_0(x, t) - 2km}{\sqrt{4D_T x / v_x}} \right] \right\} \quad (10.18)$$

где $Z_0(x, t) = m \{1 - \exp[-\varepsilon^*(t - xn/v_x)]\}$ ($t > xn/v$). Так как естественный (бытовой) поток подземных вод интенсивностью q^0 препятствует проникновению стоков в сечении $x = 0$ ниже некоторой практической глубины $\bar{Z}_{\max} = m/(m + \gamma)$, где $\gamma = q^0/\varepsilon_0 a$ (см. рис. 10.6, б), то на изменение вспомогательной функции $z_0(x, t)$ наклады-

вается соответствующее ограничение. Это значит, что в расчетах при $t - x\eta/\nu_x > t_{\max} = \ln(1 - \bar{z}_{\max})^{-1}$ необходимо принимать $z_0 = z_{a \max} = \text{const}$.

Из решения видно, что степень неоднородности формирующихся гидрохимических разрезов зависит не только от характерного соотношения q^0/ε_0 , но определяется также вкладом поперечной дисперсии в профильное распределение веществ, поступающих в водоносный пласт из поверхностного источника.

10.1.2.3. Об учете плотностной конвекции

Этот фактор резко усложняет пространственное распределение стоков, вызывая образование их внедряющихся «языков» в нижней (или верхней) части пласта. Кроме того, он вызывает сравнительно быстрые вертикальные перемещения стоков, которые могут усиливать поперечный (вкрест напластования) конвективно-дисперсионный перенос, или, наоборот, ослаблять, а иногда и полностью «забывать» его.

В случае гидродинамически активного бассейна деформация границы раздела разноплотностных жидкостей учитывается наиболее просто в условиях поршневого (профильно-двумерного) вытеснения, когда допустима плановая фрагментация потока линиями тока. Длина проекции «языка» минерализованных вод на горизонтальную плоскость в однородном гомогенном пласте постоянной мощности (m) определяется выражением

$$\Delta l_p \approx 1,5 \sqrt{T \Delta \bar{\rho} t / n}, \quad (10.19)$$

где $\Delta \bar{\rho} = (\rho_0 - \rho^0)/\rho^0$ — плотностной градиент (ρ_0 и ρ^0 — плотность минерализованных и пластовых вод), T —

проводимость пласта. При этом положение средней точки контакта l_0 может быть найдено по формуле (10.1).

Если в пределах $l_0 - \Delta l_\rho / 2 < l < l_0 + \Delta l_\rho / 2$ допустимо эффективное осреднение концентрации (минерализации) по мощности пласта, то для приближенных расчетов можно ввести обобщенную константу D_3

$$\sqrt{D_3} \approx \sqrt{D_L} + \sqrt{D_\rho}$$

($D_\rho \approx 0,1 T \Delta \bar{\rho}$), учитывающую суммарное влияние гидродисперсии и плотностной конвекции на длину переходной зоны между взаимовытесняемыми растворами. Таким образом, миграционная задача может анализироваться далее в плановой постановке.

В противовес рассмотренному традиционному случаю, особой спецификой отличаются условия сосредоточенного поступления стоков из поверхностных бассейнов с интенсивностью, сопоставимой с расходом естественного фильтрационного потока: процесс приобретает ярко выраженный трехмерный характер и в общем случае для его анализа целесообразно применять математическое или физическое моделирование (разд. 7.3.2, 2.3.2).

10.2. Прогноз качества подземных вод при их площадном загрязнении инфильтрацией или нисходящим перетеканием

10.2.1. Постановка задач прогноза

В отличие от предшествующего анализа для источников локального характера (сосредоточенных на ограниченных площадях), здесь нас будут интересовать расчетные оценки качества подземных вод в условиях

площадного загрязнения, источники которого рассредоточены по области распространения водоносного пласта.

Такого рода ситуации достаточно типичны для гидрогеологического анализа. Они требуют прямого отражения в расчетных моделях миграции особенностей инфильтрационного (природного или техногенного) питания грунтовых вод или площадного перетекания из вышележащих загрязненных горизонтов. В такой постановке, например, целесообразно рассмотрение задач по формированию качества вод верхних горизонтов на участках площадного складирования сухих отходов (крупные коммунальные свалки, отвалы «вскрышных» горных пород). Особую ценность развитие подобных модельных представлений имеет для анализа условий загрязнения грунтовых вод на удобряемых (орошаемых) сельскохозяйственных массивах, а также для изучения влияния на подземную гидросферу атмосферных осадков, загрязненных промышленными (в том числе аварийными) выбросами. Сюда же примыкают задачи определения возраста подземных вод инфильтрационного генезиса по изотопным данным. Наконец, оценка возможности инфильтрационного загрязнения представляет интерес при обосновании зон санитарной охраны водозаборов.

С другой стороны, площадное нисходящее перетекание может приводить к субвертикальному распространению загрязнений в напорные пласты из вышележащих, ранее загрязненных грунтовых потоков.

Во всех упомянутых вариантах дополнительная инфильтрация или перетекание загрязненных вод обуславливает изменение расходов естественного («бытового») фильтрационного потока. Имеющее при этом место смешение «фоновых» и загрязненных инфильтрационных вод является фактором, снижающим степень воздействия площадных источников загрязнения на качество подзем-

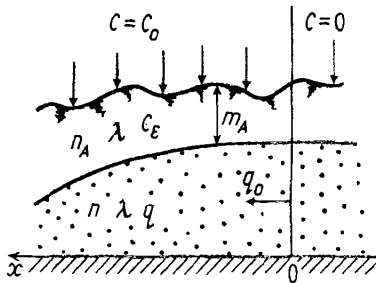


Рис. 10.8. Схема к построению расчетных зависимостей для оценки качества подземных вод при их площадном инфильтрационном загрязнении

ных вод. При построении расчетных зависимостей будем учитывать также самоочищение инфильтрационных вод в зоне аэрации и водоносном пласте за счет процессов сорбции и распада загрязняющих компонентов. Первый процесс, описываемый линейной изотермой, находит отражение в обобщенном параметре эффективной пористости (n_z), второй — непосредственно включается в исходные дифференциальные уравнения в виде кинети-

ческой реакции первого порядка (так что его показателем служит константа распада — λ_p).

Рассматриваемые ниже расчетные модели дифференцируются в зависимости от: а) выдержанности (постоянства) мощности зоны аэрации (m_A), контролирующей время прохождения через нее мигрантов $t_A^0(x)$ (x — текущая координата в направлении ленты тока — см. рис. 10.8) и б) временных закономерностей изменения концентрации загрязняющих веществ в инфильтрационных водах.

Что касается особенностей описания массопереноса в области транзита подземных вод, то, наряду с необходимостью отражения в расчетной схеме внутренней гетерогенности среды, принципиальное значение имеет выбор мерности модели, которая должна увязываться (посредством предварительной миграционной схематизации) с характером практической задачи. Так же, как и в задачах предыдущего класса, здесь возможно рассмотрение процессов как в плановой квазиодномерной

постановке, дающей осредненные по мощности пласта концентрационные профили, так и в профильно-двумерной, позволяющей дифференцировать распределение вещества по глубине фильтрационного потока.

10.2.2. Плановые миграционные модели

10.2.2.1. Основные балансовые уравнения для пласта с инфильтрацией и их решения

Одномерный конвективный массоперенос в пласте, который получает равномерно распределенное инфильтрационное питание, описывается следующим дифференциальным уравнением:

$$m n \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (q c) + \lambda_p m n c = \varepsilon c_\varepsilon, \quad (10.20)$$

где m — средняя мощность (глубина) водоносного горизонта; c_ε — концентрация загрязняющего компонента в момент его попадания в подземные воды, которая в общем случае может быть определена по формуле $c_\varepsilon = c_0 \exp(-m_A n_A \lambda_p / \varepsilon)$ (c_0 — концентрация компонента в атмосферных водах); $q = q(x)$ — удельный расход стационарного фильтрационного потока, приращение которого здесь связывается с инфильтрацией атмосферных осадков, так что

$$q = q^0 + \varepsilon x, \quad (10.21)$$

где q^0 — расход на границе $x = 0$, разделяющей в плане зоны инфильтрации чистых и загрязненных вод — см. схему на рис. 10.8. Например, к зависимости вида (10.21) приводит анализ типовых гидродинамических схем [6] для безнапорных потоков, формирующихся на водосборных площадях между двумя речными долинами.

Решение уравнения (10.20) имеет вид:

$$c = c_{\varepsilon} F(t), \quad (10.22)$$

$$F(t) = \frac{1}{1 + \lambda_{\varepsilon}} [1 - e^{-\varepsilon^*(1 + \lambda_{\varepsilon})t}] \text{ — при } t < t_o = \frac{1}{\varepsilon^*} \ln W, \quad (10.22, a)$$

$$F(t) = \frac{1}{1 + \lambda_{\varepsilon}} [1 - e^{-\varepsilon^*(1 + \lambda_{\varepsilon})t_o}] \text{ — при } t < t_o; \quad (10.22, b)$$

здесь $\lambda_{\varepsilon} = \lambda_p / \varepsilon^* = \lambda_p m n / \varepsilon$, $W = 1 + L \varepsilon / q^o$, t_o — время перемещения меченных частиц по пласту на расстояние L .

Таким образом, стационарная фаза процесса (при $t > t_o$) характеризуется распределением:

$$c = c_{\varepsilon} F_{\infty} = \frac{c_{\varepsilon}}{1 + \lambda_{\varepsilon}} [1 - W^{-(1 + \lambda_{\varepsilon})}]. \quad (10.23)$$

В работе [10] решение уравнения (10.20) развивается на случай экспоненциально меняющейся (в направлении x) интенсивности загрязнения грунтового горизонта, что может, например, объясняться линейным сокращением мощности зоны аэрации по направлению от водораздела к долине реки.

Особый интерес представляет анализ миграционного процесса в случае колеблющегося во времени содержания нестабильного вещества в инфильтрационных водах: $c_{\varepsilon} = c_{\varepsilon}(t)$. На вид функции $c_{\varepsilon}(t)$ влияют также процессы в зоне аэрации, которые таким образом могут быть опосредованно включены в расчетную модель миграции. Если функция $c_{\varepsilon}(t)$ допускает кусочно-однородное ("ступенчатое") представление, так что $c_{\varepsilon}^i = c_{\varepsilon}^{i-1} + \Delta c_{\varepsilon}^{i-1}$ ($\Delta c_{\varepsilon}^{i-1}$ — приращение граничной концентрации в момент времени t^{i-1} , $i = 1, 2, \dots$ номера временных интервалов, в течение которых полагается $c_{\varepsilon} = c_{\varepsilon}^i = \text{const}$), то соответствующие расчетные зависимости могут быть получены методом суперпозиции [5] рассмотренных здесь базисных решений $F(t)$:

$$c = \sum_{i=1}^N \Delta c_{\varepsilon}^{i-1} F(t - t^{i-1}) \text{ при } t^{i-1} < t \leq t^i. \quad (10.24)$$

Наконец, достаточно строгие аналитические выражения могут быть получены для описания процесса единовременного (например, при кратковременном выпадении радиоактивных осадков) загрязнения земной поверхности (рис. 10.9, а), когда поступление вещества в почвенный слой аппроксимируется $\delta(t)$ -функцией. Соответствующее балансовое уравнение имеет вид

$$mn \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (q c) + mn \lambda_p c = \delta(t) P_{\varepsilon}, \quad (10.25)$$

где P_{ε} — интенсивность поступления вещества на поверхность грунтового потока (размерность — M/L^2 , M — масса, L^2 — площадь), связанная с интенсивностью площадного радиоактивного заражения почвенного слоя (P_f) очевидным соотношением

$$P_{\varepsilon} = P_f e^{-\lambda_p t_A},$$

t_A — время миграции через зону аэрации; для стационарного одномерного потока влаги в зоне аэрации имеем $t_A = m_A n_A / \varepsilon$ (m_A и n_A — мощность и эффективная пористость пород, находящихся в состоянии неполного насыщения).

Решение уравнения (10.25) дается формулой:

$$c = \begin{cases} P_{\varepsilon}^* \cdot e^{-(\lambda_p + \varepsilon^*)t} & \text{при } 0 \leq t < t^0, \\ 0 & \text{—при } t > t^0 \end{cases}, \quad (10.27)$$

где $t^0 = \frac{1}{\varepsilon^*} \ln(1 + \varepsilon x / q^0)$ — характерное (приведенное) время миграции в пласте.

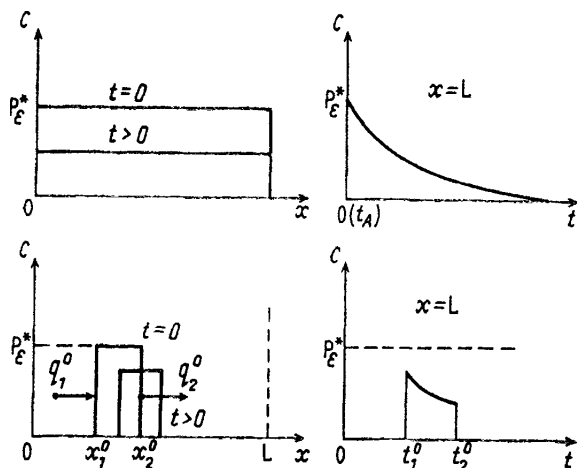


Рис. 10.9. Схема к решению задачи инфильтрационного загрязнения подземных вод (одномерный вариант):

а - распределение загрязнения в пределах всей расчетной области ($0 < x < L$); б - зональное распределение загрязнения (на интервале $x_1^0 < x < x_2^0$)

Аналогичным образом может быть получено решение, описывающее функции c при поступлении вещества на отрезке $x_1^0 < x < x_2^0$ (см. рис. 10.9, б), оно имеет вид:

$$c = \begin{cases} P_{\epsilon}^* e^{-(\lambda_p + \epsilon^*)t} & \text{при } t_2^0 < t < t_1^0, \\ 0 & \text{при } t < t_2^0 \text{ и } t > t_1^0 \end{cases}, \quad (10.28)$$

где $t_i^0 = \frac{1}{\epsilon^*} \ln \left(1 + \frac{\epsilon(x - x_i^0)}{q_i^0} \right)$, $x > x_1^0$ и x_2^0 .

Здесь q_i^0 — расход фильтрационного потока в граничных сечениях $i = 1$ и $i = 2$. Нетрудно заметить, что формула (10.27) является частным случаем решения (10.28).

Решение (10.28) может быть обобщено на случай переменной (в пространстве — по направлению оси x) инфильтрации $\epsilon = \epsilon(x)$, что

может ассоциироваться с изменчивостью фильтрационных свойств покровных отложений. Для этого целесообразно дать «кусочно-однородное» представление функций $\varepsilon(x)$ и $q(x)$, как это показано на рис. 10.10. Тогда искомое «ненулевое» решение

$$c = P_{\varepsilon}^* e^{-\lambda_p t} \exp \left(- \sum_{j=j^*}^{N_j} \varepsilon_j^* \Delta t_j^o \right) \quad (10.29)$$

будет иметь место в области $t_1^o < t < t_2^o$, где

$$t_i^o = \sum_{j=i}^{N_j} \Delta t_j^o; \quad \Delta t_j^o = \frac{1}{\varepsilon^*} \ln \left[1 + \frac{\varepsilon_j (x_{j+1} - x_j)}{q_j^o} \right], \quad (10.29, a)$$

причем j^* — отвечает номеру блока в пределах участка загрязнения подземных вод (при $t = 0$, т.е. в интервале $[x_1^o, x_2^o]$), который обеспечивает привнос вещества в расчетное сечение в момент времени $t = t_{j^*}^o$ ($t_1^o < t_{j^*}^o < t_2^o$), N_j — конечный номер интервала суммирования, отвечающий сечению $x = L$.

Наконец, использование принципа суперпозиции позволяет учесть в решении (10.29) разновременное поступление вещества с различной интенсивностью в водоносный горизонт на различных участках пласта:

$$c = \sum_{k=1}^K P_{\varepsilon_k}^* e^{-\lambda_p t} \exp \left(- \sum_{j=j_k^*}^{N_j} \varepsilon_j^* \Delta t_j^o \right), \quad (10.30)$$

где K — количество j_k^* зон, которые обеспечивают привнос вещества в сечение $x = L$ в момент времени $t = t_{j_k^*}^o$. Естественно, что в функции $P_{\varepsilon_k}^*$ и в характере ее распределения $P_{\varepsilon_k}^*(x)$ находят косвенное отражение процессы переноса вещества в зоне аэрации, физико-химические и фильтрационные параметры которой в региональном масштабе характеризуются заметной изменчивостью. Обобщенное

представление решения (10.27) для слоистой системы можно найти в работе [3].

10.2.2.2. Проявление гетерогенных свойств комплексов трещиновато-пористых пород

При выполнении определенных предпосылок, приведенные зависимости могут использоваться и для описания массопереноса в гетерогенных водоносных пластах. Например, для трещиновато-пористой среды это предполагает рассмотрение процесса на уровне предельной (асимптотической) расчетной схемы макродисперсии, когда одновременно выполняются два критерия:

$$\alpha_m t > 10 \text{ и } \alpha_m / \lambda_p > 10, \quad (10.31)$$

где $\alpha_m = S_b^2 D_m / n_0$ — коэффициент массообмена (S_b — удельная поверхность блока, D_m и n_0 — коэффициент молекулярной диффузии в нем и его пористость). Соотношения (10.31) отвечают условиям достаточно полного насыщения пористых блоков веществом, которое при этом не претерпевает существенной деструкции при своей диффузии от периферии к центру породного блока. В этом случае во всех базисных решениях допустима замена величины n на $n + n_0 \approx n_0$ (n — трещиноватость пласта).

Вторая расчетная ситуация отвечает предпосылке неограниченной емкости пористых блоков: к моменту установления стационарного концентрационного распределения вещества, распадающегося при миграции в блоках, их насыщение еще далеко от своего завершения. Это будет заведомо иметь место при выполнении соотношения:

$$\alpha_m / \lambda_p < 0,5 + 1,0. \quad (10.32)$$

Составим исходное дифференциальное уравнение, полагая, что вся кинетика процесса определяется деструкцией компонентов, диффундирующих в пористую матрицу, а емкостью трещин заведомо можно пренебречь ($n \ll n_0$)

$$(q^0 + \varepsilon x) \frac{\partial c}{\partial x} + \varepsilon c + W_s m = \varepsilon c_\varepsilon, \quad (10.33)$$

где $W_s = \lambda_m^{1/2} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t e^{-\lambda_p \Theta} \left(\frac{c d\Theta}{\sqrt{\pi(t-\Theta)}} \right)$ — удельный массовый поток из трещин в блоки. Решение уравнения (10.33) приводится в работе [10]. Там же показано, что при $\bar{t} = \lambda_p t > 3+4$ наблюдается стационарное распределение:

$$c_\infty = \frac{c_\varepsilon}{1+r} \left[1 - W^{-(1+r)} \right], \quad (10.34)$$

где $W = 1 + \varepsilon x/q^0$, $r = \sqrt{\lambda_m \lambda_p} m/\varepsilon$. Эквивалентная расчетная зависимость, учитывающая распад в трещинах, имеет вид

$$c_\infty = \frac{c_\varepsilon}{1+r+\lambda_\varepsilon} \left[1 - W^{-(1+r+\lambda_\varepsilon)} \right], \quad (10.35)$$

где $\lambda_\varepsilon = \lambda_p m n/\varepsilon$ (n — трещиноватость пород). Как видно, ранее полученное решение (10.23) является частным случаем решения (10.35): положив в последнем $\lambda_m = 0$ ($r = 0$), приходим к описанию массопереноса в гомогенном пласте.

Отсюда легко находится критерий значимости реакций распада, протекающих в пористых блоках:

$$\frac{r}{1+\lambda_\varepsilon} > 0,05 \div 0,1. \quad (10.36)$$

10.2.2.3. Роль диффузионных процессов при миграции загрязненных вод через покровные и разделяющие слои

Инфильтрационное загрязнение приповерхностных водоносных горизонтов чаще всего осуществляется через перекрывающие слабопроницаемые отложения, в которых, наряду с конвекцией, имеют место диффузионные процессы. Аналогично происходит загрязнение более глубоких горизонтов посредством нисходящего перетекания некондиционных вод из верхних зон разреза. И в том, и в другом случаях диффузия меняет интенсивность массообмена на контактах водоносных пластов и слабопроницаемых слоев, который характеризуется довольно низкими значениями параметра $Pe_z = \Sigma m_n / D_m$ (m_n — мощность слоя).

Комбинированное влияние инфильтрации (или равномерного перетекания) и диффузии может быть учтено в решении (полная математическая постановка задачи дается в работе [7]):

$$\bar{c} = 1 - \frac{1}{2} \left[e^{-P} \operatorname{erfc} \left(\frac{1-T}{2\sqrt{T/P}} \right) + \operatorname{erfc} \left(\frac{1-T}{2\sqrt{T/P}} \right) \right]; \quad (10.37)$$

здесь $P = \frac{\varepsilon t_o}{m_1 n_1}$, $T = \frac{\varepsilon m_1 n_1}{D_m n_2} \left(\frac{t-t_o}{t_o} \right)$, $t_o = \frac{m_1 n_1}{\varepsilon} \ln \left(1 + \frac{\varepsilon x}{q_o} \right)$, q_o — удельный фильтрационный расход «фоновых» вод ($c=0$) в начальном сечении ($x=0$) — выше по потоку от плановой границы зоны инфильтрации загрязненных вод; индексы 1 и 2 относятся к водоносному пласту и слабопроницаемому слою. Графики функции (10.37) приводятся также в монографии [7].

10.2.3. Профильные двумерные модели

Рассмотренные ранее модели плановых потоков обладают одним существенным недостатком: они не дают

реальное перераспределение загрязняющих веществ по глубине водоносного пласта. Например, такая постановка задачи является слишком грубой при исследовании вопросов, связанных с интерпретацией режимных гидрогеохимических наблюдений по скважинам, вскрывающим мощные (десятки метров) водоносные толщи. Предпосылки же для формирования контрастных профильных зон неоднородности создаются самим инфильтрационным характером загрязнения грунтов вод, когда проникновение загрязнения вглубь пласта часто сдерживается достаточно низкими показателями

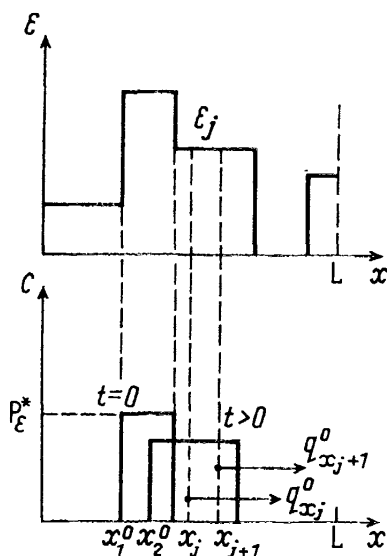


Рис. 10.10. К обоснований расчетной схемы: графическое представление функций $\varepsilon(x)$ и $c(x)$ при построении решения задачи инфильтрационного загрязнения подземных вод

вертикальной конвекции и поперечной (профильной) дисперсии, особенно в анизотропных породах. В результате глубокие части разреза могут оставаться «чистыми» достаточно длительный период, в то время как вблизи зеркала грунтовых вод реальные значения концентрации будут многократно превышать величины, рассчитанные по ранее полученным зависимостям для плановых потоков.

Как и прежде, будем рассматривать миграцию компонентов в пределах безнапорного водоносного горизонта, через верхнюю границу которого — зеркало грунтовых вод — осуществляется инфильтрационное питание. Необходимость установления траекторий движения час-

тиц требует оценки компонент скорости фильтрации (v_x и v_z), которые находятся из решения гидродинамической задачи.

Так, в случае однородного пласта можно воспользоваться решением, полученным в эквипотенциальной форме [9]. Из него следует, что для расчетной области, находящейся не слишком близко к выходной границе потока ($x < L - 2\sqrt{K_x/K_z}m$), влияние профильной анизотропии фильтрационных свойств пород (характеризующейся показателем $\sqrt{K_x/K_z}$) на структуру сетки движения подзаемных вод незначительно и вполне допустимо пользоваться приближенными формулами:

$$v_x = \varepsilon \bar{x}, v_z = \varepsilon (1 - \bar{z}), \bar{x} = x/m, \bar{z} = z/m \quad (10.38)$$

Отсюда легко находим текущую (в момент времени t) координату любой частицы (x, z), поступившей на поверхность горизонта $z = 0$ в точке $x = x_0$ в момент времени $t = 0$:

$$\bar{x} = \bar{x}_0 e^{\varepsilon^* t}, \bar{z} = 1 - e^{-\varepsilon^* t}, \varepsilon^* = \varepsilon/mn \quad (10.39)$$

(т.е. уравнение линии тока: $\bar{x}(1 - \bar{z}) = \bar{x}_0$). При равномерном поступлении вещества по всей площади водосбора оно появится на глубине ($\bar{z}$) от поверхности в момент $t = \frac{1}{\varepsilon^*} \ln(1 - \bar{z})^{-1}$. Если происходит деструкция вещества, то его концентрация будет:

$$c(\bar{z}) = c_\varepsilon \exp(-\lambda_p t) = c_\varepsilon \exp\left[-\frac{1}{\varepsilon^*} \ln(1 - \bar{z})^{-1}\right] = c_\varepsilon (1 - \bar{z})^{\lambda_\varepsilon} \quad (10.40)$$

где $\lambda_\varepsilon = \lambda_p mn/\varepsilon$. Таким образом, $c(\bar{z})$ является показательной функцией, которая сохраняет свой вид для всех сечений x^* .

Для нахождения средней концентрации в интервале $(0, z)$ проинтегрируем последнее выражение:

* Влияние типа граничного условия на депрессионной поверхности на концентрационное распределение $C(z)$ исследовалось в работах [4, 10].

$$c_{cp} = c_{\varepsilon} \int_0^{\bar{z}} (1 - \bar{z})^{\lambda_{\varepsilon}} d\bar{z} = \frac{c_{\varepsilon}}{1 + \lambda_{\varepsilon}} \left[1 - (1 - \bar{z})^{1 + \lambda_{\varepsilon}} \right]. \quad (10.41)$$

Переходя к временной переменной, получаем формулу:

$$c_{cp} = \frac{c_{\varepsilon}}{1 + \lambda_{\varepsilon}} \left[1 - e^{-\varepsilon^*(1 + \lambda_{\varepsilon})t} \right], \quad (10.42)$$

которая в точности совпадает с ранее найденным в рамках плановой модели решением (10.22) при $W \rightarrow \infty$.

Приведем также решение, отвечающее закономерному снижению концентрации распадающегося вещества в инфильтрационных водах:

$$c(\bar{z}) = \begin{cases} c_{\varepsilon} e^{-\lambda_p t} & \text{при } \bar{z} < 1 - e^{-\varepsilon^* t} \\ 0 & \text{при } \bar{z} > 1 - e^{-\varepsilon^* t} \end{cases}. \quad (10.43)$$

Отсюда, в частности, следует, что пик загрязнения реально может быть зафиксирован на отметках $\bar{z} < 1 - e^{-\varepsilon^* t / \lambda_p}$.

В заключение отметим, что влияние профильной анизотропии фильтрационных свойств пород особенно ощутимо сказывается на точности прогнозных оценок при включении в рассмотрение несовершенных границ потока, например, реки — см. рис. 10.11. Как видно, проекции траекторий движения частиц на горизонтальную плоскость, построенные с учетом и без учета профильной деформации сетки движения, заметно различаются. Максимальные отклонения (d_y), имеющие место на контуре береговой линии, могут быть определены из решения соответствующей миграционной задачи:

* Т.е. «более глубокие» линии тока выходят в реку ниже по ее течению, нежели «менее глубокие».

** Brainard E.C., Gelhar L.W. Influence of vertical flow on ground-water transport. — Ground Water, 1991, v.29, N5, p.693-701.

$$d_y = d_o \ln \left[\frac{\cos(\pi x_o / 2L)}{\cos(\pi x_o / 2L)} \right], \quad d_o = \frac{2k_x J_y m^2}{2\pi L}, \quad (10.44)$$

полученного для потоков с постоянной величиной инфильтрационного питания (ϵ), дренируемых несовершенной — по степени вскрытия пласта — рекой (шириной b и имеющей постоянный уклон J_y , совпадающий с градиентом потока на линии разгрузки). Оценки по формуле (10.44) показывают, что значения d_y реально могут измеряться многими сотнями метров, что должно учитываться, например, при расчетном обосновании зон санитарной охраны береговых водозаборов в крупных долинах рек.

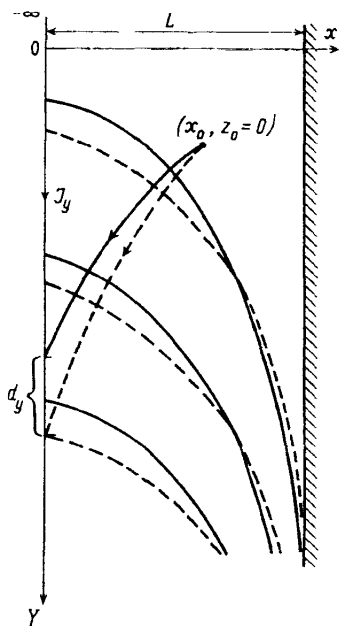


Рис. 10.11. Расчетные траектории движения меченной частицы жидкости при осреднении напоров по вертикали (сплошные линии) и при учете профильной деформации потока (пунктирные линии)

10.3. Прогноз загрязнения, вызванного подземными источниками некондиционных вод

При построении расчетных моделей необходимо учитывать следующие обстоятельства:

1) первостепенный интерес представляют расчетные зависимости, отражающие изменение содержания веществ в откачиваемой воде;

2) эти зависимости заметно упрощаются сведением водозабора к «большому колодцу» или к линейной дрене;

3) в отличие от ранее рассмотренных плановых задач миграции, надежность прогноза во многом определяется корректностью задания начальных условий, отражающих естественную гидрохимическую зональность;

4) влияние гидродисперсии обычно затушевывается одновременным подтягиванием к водозабору растворов из различных гидрохимических зон (в условиях сильной деформации гидродинамической сетки движения подземных вод), и поэтому имеет смысл рассматривать миграцию преимущественно в рамках расчетной схемы поршневого вытеснения;

5) если в этой схеме не учитывают различий в плотности и дисперсию, то в основе математических построений лежат уравнения квазистационарной фильтрации, дополненные кинематическими уравнениями;

6) в эксплуатационных условиях максимально проявляется плановая и профильная фильтрационная анизотропия пород.

10.3.1. Субвертикальное подтягивание глубоких некондиционных вод к водозаборным скважинам

В соответствии с основными положениями схематизации, изложенными в разд. 9.3.3, рассмотрим две характерные ситуации — для толщ без выдержанных водоупорных слоев и при наличии таковых (рис. 10.12).

10.3.1.1. Вариант отсутствия относительного водоупора между пресными и солеными водами

Для «большого колодца» в однородной *полуограниченной* (в разрезе) изотропной толще с исходной

горизонтальной границей соленых (концентрация маркирующего компонента c_1) и пресных (фоновая концентрация c_0) вод на глубине h_0 (рис. 10.12, а) решение [2] представимо в форме:

$$c = c_0 + (c_1 - c_0)f(t, t_0); f(t, t_0) = 1 - \left(\frac{t_0}{t}\right)^{1/3}, \quad (10.45)$$

где время подтягивания первых порций минерализованных вод к водозабору (t_0) определяется формулой

$$t_0 = \frac{\pi n h_0^3}{Q} R. \quad (10.46)$$

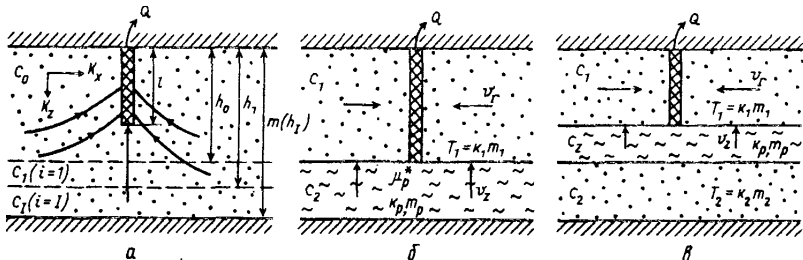


Рис. 10.12. Характерные схемы миграции природных некондиционных вод от подземных бассейнов:

а - субвертикальное подтягивание; б - перетекание через разделяющий слой; в - упругое отжатие из подстилающего слоя

Для рассматриваемого случая $l \ll h_0$ (l — заглубление дренажного устройства), $R = 2/3$. В более общем случае $R = \frac{2}{3} (1 - \bar{l})^2 (1 + 2\bar{l})$; при этом, однако, вид базовой функции $f(t, t_0)$ несколько меняется [2].

Формула (10.45) справедлива и для условий откачки из пласта двухслойного строения, верхняя, наиболее проницаемая (с коэффициентом фильтрации k_0 и мощностью m_0) зона которого полностью вскрывается

фильтрами скважин ($l = m_0$). При этом величина $f(t, t_0)$ заменяется на $f'(t, t_0) = \kappa_1 f(t, t_0) / \kappa_0$, а время t_0 подтягивания с глубины $z = h_0 > (3 \div 5) m_0$ (координата z отсчитывается от кровли верхнего слоя) контакта пресных и минерализованных вод к дренажному контуру определяется по формуле (10.46), где необходимо положить $R \approx 1/3 (1 + \kappa_0 / \kappa_1)$. Анализ показывает, что неоднородность разреза существенно влияет на процесс миграции уже при относительно небольших различиях в проницаемостях слоев, когда $\kappa_0 > (1,5 \div 2) \kappa_1$; в действительности эти различия обычно выражены гораздо резче: бассейны некондиционных природных вод приурочены, как правило, к породам с относительно низкой проницаемостью.

Наконец, при сугубо ориентировочных оценках формула (10.45) может использоваться и для однородных, но существенно анизотропных толщ; в этом случае в ней необходимо сделать замену $f(t, t_0)$ на $f_*(t, t_0) \approx \sqrt{k_z/k_x} f(t, t_0)$, а характерное время процесса t_0 устанавливается по зависимости (10.46) для анизотропного пласта: $R = 2\kappa_x / 3\kappa_z$ [7].

При наличии переходной зоны от пресных вод к минерализованным используется суперпозиция решений вида (10.45):

$$c = c_0 + \sum_{i=1}^I (c_i - c_{i-1}) f(t, t_{i-1}), \quad (10.47)$$

где I — номер нижнего расчетного слоя ($I+1$ — общее число слоев с постоянной концентрацией c_i , аппроксимирующих изменение содержания компонентов по мощности пласта); i — текущий номер слоя ($i = 0$ отвечает верхнему слою с фоновой концентрацией c_0) — см. рис. 10.12, а; t_i — время начала поступления минерализованных вод от верхней границы $(i+1)$ -го расчетной слоя (залегающей на глубине h_i); оно определяется по формуле (10.46), в которой h_0 необходимо заменить на h_i . Для стационарной фазы процесса, когда $(t_{c_{\max}} / t_{i-1} > 500 + 1000)$, из (10.47) получаем: $c_{\max} = c_1$ — в случае однородного пласта и $c_{\max} = c_0 + \kappa_1 / \kappa_0 (c_1 - c_0)$ — в случае двухслойного пласта.

Для ограниченных по мощности пластов процесс (на удалении от водозабора) считается плановым. Решение соответствующей краевой задачи для сосредоточенного водоотбора, полученное П.К.Коносавским, представлено графически на рис. 10.13, где $\bar{h} = h_0/m$; $t_m = 2\pi m^3 n/Q$. При $\bar{h}_0 \leq 0,9$ с погрешностью не более 15 % это решение может быть аппроксимировано первой зависимостью

$$(10.45) \text{ при } f(t, t_0) \approx (1 - \bar{h}_0) \left[1 - \left(\frac{t_0}{t} \right)^\alpha \right]; \alpha = 3(\bar{h}_0 - 1); t \geq t_0 \text{ где}$$

$t_0 = \frac{\bar{h}_0^3 t_m R}{2}$. В том случае, если заглубление дренажного устройства (l) сопоставимо с мощностью пласта (m), возможна корректировка параметра t_0 согласно разд. 20 (см. формулу (20.13) и график на рис. 20.4, б).

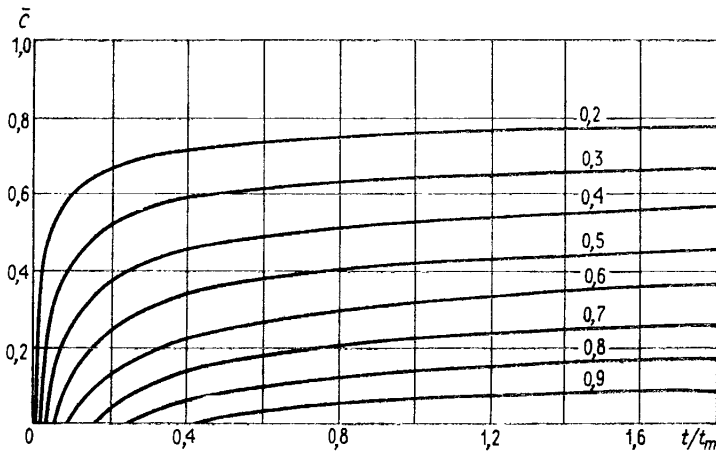


Рис. 10.13. График функции $c=f(t/t_m)$ для условий субвертикальной миграции в ограниченном по мощности пласте

При наличии переходной (по концентрации) зоны справедлива формула (10.47) при

$$f(t, t_{i-1}) = (1 - \bar{h}_i) \left[1 - \left(\frac{t_{i-1}}{t} \right)^{\alpha_{i-1}} \right], \quad \alpha_{i-1} = 3(\bar{h}_{i-1} - 1),$$

$$\bar{h}_i = \frac{h_i}{h_I}.$$
(10.49)

Расчеты характерного времени t_{i-1} производятся по формуле (10.46); при $t < t_{i-1}$ имеем $f(t, t_{i-1}) = 0$. Время достижения предельной концентрации

$$c_{\max} = c_o + \sum_1^I (c_i - c_{i-1}) (1 - \bar{h}_{i-1})$$
(10.50)

составляет

$$t > t_{c_{\max}} \approx t_{I-1} \Delta^{-3(1-\bar{h}_{I-1})} \quad (\Delta = 0,1).$$

При откачках из слоистых пластов предельная концентрация является средневзвешенной по проводимости:

$$c_{\max} = \frac{c_o K_o + \sum_1^I (c_i K_i - c_{i-1} K_{i-1}) (1 - \bar{h}_{i-1})}{K_o + \sum_1^I (K_i - K_{i-1}) (1 - \bar{h}_{i-1})}.$$
(10.51)

В приведенной расчетной схеме нетрудно учесть роль площадного инфильтрационного питания подземных вод (интенсивностью ε). Так, если расход откачки полностью компенсируется инфильтрацией, то приближенное выражение для текущей концентрации c_ε откачиваемых вод имеет вид:

$$c_\varepsilon \approx c_o + (c - c_o) e^{-\varepsilon^* t}, \quad \varepsilon^* = \frac{\varepsilon}{mn},$$
(10.52)

где c — концентрация неразбавленных растворов, определяемая выражением (10.45); c_o — концентрация компонентов в верхнем слое ($i = 0$), равная концентрации инфильтрационных вод.

В целом, для рассмотренного процесса выделяются три характерных этапа:

1) начальный (нестационарный), когда при подъеме минерализованных растворов снизу происходит интенсивное загрязнение пресных вод верхней части разреза, а в откачиваемых водах наблюдается довольно резкий рост содержания растворенных солей;

2) переходный (квазистационарный), когда в эксплуатируемом водоносном горизонте положение границы раздела вод с различными качественными показателями стабилизируется и концентрация солей в отбираемой воде медленно меняется во времени;

3) конечный (стационарный), характеризующийся постоянным концентрационным распределением в водоносном пласте и неизменными качественными показателями откачиваемых вод, когда они всецело определяются пропорциями смешения вод, поступающих к водоприемным выработкам из различных гидрохимических зон.

Если характер наблюдаемых концентрационных функций существенно отличается от приведенных теоретических распределений, то причину следует искать, прежде всего, в особенностях фильтрационного строения водоносной толщи, не нашедших отражения в представленных здесь моделях. Например, весьма ограничены возможности строгого теоретического описания миграции минерализованных растворов в планово-неоднородных толщах. Здесь зачастую целесообразно построение расчетных моделей для локальных зон субвертикального переноса, приуроченных к тектоническим нарушениям. Другим фактором, заметно смещающим расчетные оценки, является плотностная конвекция: наличие плотностного градиента $\Delta \bar{\rho}$, равного $(\rho_i - \rho^o)/\rho^o$, делает принципиально возможной ситуацию, когда тяжелые минерализованные растворы, залегающие ниже неко-

торой глубины z , равной h_p , вообще не достигают базиса дренирования водоносной толщи.

Для оценки критической глубины h_p можно воспользоваться трансцендентным соотношением:

$$\bar{h}_p = \bar{l}^{-1} \approx [1 + Q/(2\pi K_x l^2 \Delta \bar{\rho}_i)]^{1/2} R^{-1}(\bar{l}, \bar{m});$$

$$\bar{l} = l/h_p, \quad \bar{m} = m/h_p \quad (10.53)$$

Указанный фактор может оказаться решающим при оценках масштабов загрязнения и требует поэтому в каждом конкретном случае внимательного анализа.

10.3.1.2. Вариант наличия разделяющего водоупора между пресными и солеными водами

Пусть поступление загрязняющих компонентов в эксплуатируемый водоносный горизонт обусловлено только перетеканием некондиционных вод из смежного пласта.

Уравнение для текущей концентрации c_1 маркирующего химического компонента в эксплуатируемом горизонте имеет вид:

$$n_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r (v_r c_1) - \varepsilon' c_2] = 0, \quad (10.54)$$

где c_2 — концентрация в смежном пласте; $\varepsilon' = v_{z_2}/m_1$; v_{z_2} — скорость фильтрации в разделяющем пласте. Если пренебречь упругоёмкостью основного пласта, то уравнение (10.54) преобразуется к виду:

* Дополнительный анализ процесса субвертикального потягивания пластовых растворов с учетом фактора их гравитационной (по плотности) стратификации проводится в третьем томе данной топографии.

$$n_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} - v_r \frac{\partial c_1}{\partial r} + \varepsilon' (c_1 - c_2) = 0. \quad (10.55)$$

Общее решение уравнения (10.55) при $c_2 = \text{const}$ относительно концентрации компонента (c_1) в воде, откачиваемой скважиной

(«большим колодцем»), можно представить в форме:

$$\frac{c_{1c} - c_1^o}{c_2 - c_1^o} \equiv \bar{c}_{1c} = 1 - \exp \left[- \int_{r_c}^{r_t} \frac{\varepsilon'}{v_r} dr \right] \quad (10.56)$$

или

$$\bar{c}_{1c} = 1 - \frac{r_t v_{r_t}}{r_c v_{r_c}}, \quad (10.57)$$

где c_1^o — фоновая концентрация; r_t — максимальный путь миграции по основному пласту частиц маркирующего компонента, поступающих в скважины на расчетное время t (в предположении, что исходная концентрация в разделяющем слое также равна c_2), он находится из кинематического условия $v_r dt = -n dr_t$.

Это решение можно распространить на две характерные схемы: 1) перетекание через разделяющий слой из смежного водоносного горизонта (см. рис. 10.12, б) и 2) упругое отжатие растворов из слабопроницаемой толщи (см. рис. 10.12, в). Для нахождения функций v_r , ε' и характерной длины переноса r_t в (10.57) использовались решения соответствующих задач геофильтрации, приведенные в работах [1, 7].

Графическое представление результирующего решения (10.57) для схемы с перетеканием приводится на рис. 10.14, где безразмерный комплекс $v = \sqrt{Q t / \pi m_1 n_1 B^2}$ (B —

* К этой расчетной схеме приводится и случай отжатия поровых вод из блоков трещиноватых пород.

параметр перетекания, равный $\sqrt{T_1 m_p / K_p}$). Как видно, графики временного прослеживания характеризуются постепенным замедлением роста концентрационной функции, которая асимптотически стремится к предельному (максимальному) значению $\bar{c}_{\max}$; последнее определяется соотношением проводимостей взаимодействующих пластов $\gamma = T_1 / T_2$ $\bar{c}_{\max} = 1 / (1 + \gamma)$.

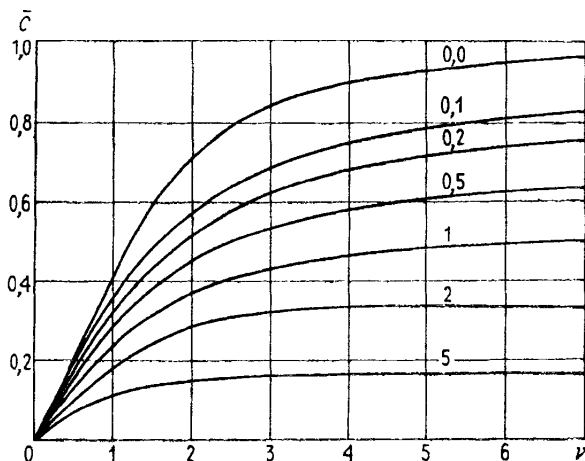


Рис. 10.14. Графики изменения относительной концентрации природного индикатора в откачиваемой воде (схема с перетеканием); числа на графике - параметр $\gamma = T_1 / T_2$

Время достижения предельных концентраций обычно намного превосходит характерную продолжительность опытных откачек и соизмеримо с длительностью эксплуатационного водоотбора, если последний осуществляется из пористых водоносных пластов.

Для иллюстрации сказанного оценим продолжительность начального этапа откачки $t_{0,1}$, в течение которого концентрация достигает 10 % от предельной; так как здесь $c / c_{\max} \approx \nu$, то время $t_{0,1}$ имеет

порядок $0,4m_1n_1B^2/Q$ и для пористых пластов измеряется десятками, чаще сотнями суток. Интересно, что в предельном случае ($\gamma = 0$) время $t_{0,1}$ во много раз превосходит длительность t_ϕ нестационарного (фильтрационного) режима откачки: $t_{0,1}/t_\phi \approx 0,1m_1n_1a_1^*/Q$ (где a_1 — пьезопроводность пласта); это является дополнительным доказательством того, что миграционные возмущения распространяются гораздо медленнее фильтрационных.

Для второй схемы время практической стабилизации гидрохимического режима относительно мало, но незначительна и максимальная концентрация в скважине $\bar{c}_{\max} \approx \sqrt{Q\mu_p^*/12\pi m_1 n_1 T_1}$. Последний результат — несколько неожиданный: несмотря на то, что откачка воды скважиной почти полностью компенсируется притоком из разделяющего пласта, величина $\bar{c}_{\max}$ обычно не превышает первых процентов. Это объясняется тем, что минерализованная вода, поступающая в водоносный пласт, разбавляется пресной водой, заключенной в порах последнего. Лишь в исключительных случаях, при водоотборе из трещиноватых коллекторов, контактирующих с сильно сжимаемыми толщами большой мощности, величина $\bar{c}_{\max}$ может достигать десятков процентов.

10.3.2. Субгоризонтальная миграция от подземного источника некондиционных вод*

При наличии в эксплуатируемом пласте плановой границы раздела пресных ($c=c_0$) и соленых ($c=c_1$) вод, произвольным образом ориентированной относительно осей фильтрационной анизотропии (рис. 10.15, а), решение для функции s имеет вид (10.45), где

* Раздел написан П.К. Коносавским.

$$f(t, t_0) = \frac{1}{\pi} \arccos \sqrt{t_0/t}, \quad (10.58)$$

$$t_0 = \pi m n L_0^2 / \varepsilon Q \quad (10.59)$$

— время прихода первых порций соленой воды по «кратчайшей» линии тока; $\varepsilon = \sqrt{K_x/K_y}$ — коэффициент анизотропии; L_0 — расстояние до границы раздела жидкостей вдоль оси большей проницаемости. В пределе: $c_{\max} = (c_0 + c_1)/2$.

В плано-неоднородном по фильтрационным свойствам пласте гидрогеохимическая граница нередко совпадает с границей раздела двух зон (рис. 10.15, б), различающихся гидравлической проводимостью, причем более минерализованные ($c = c_1 > c_0$) воды сосредоточены в зоне с низкой (T_1) проводимостью ($T_1 < T_0$). Соответствующее этому случаю решение (при $K = 1$ и $v_e = 0$) представлено графически на рис. 10.16. Как видно, максимальная (при $t \rightarrow \infty$) концентрация при этом определяется соотношением проводимостей:

$$c_{\max} = c_0 + (c_1 - c_0) / (1 + \bar{T}), \text{ где } \bar{T} = T_0/T_1. \quad (10.60)$$

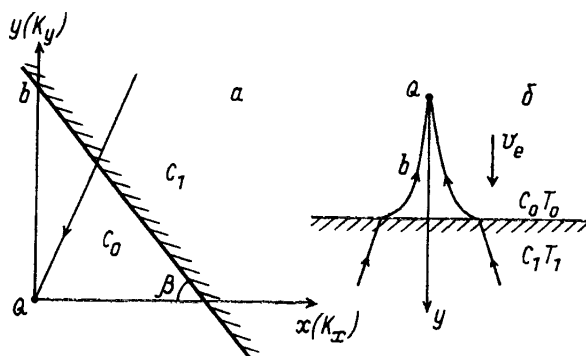


Рис. 10.15. К расчетной схеме для оценки смещения планового контакта между пресной (c_0) и соленой (c_1) водой:

а - исходное положение контакта в изотропном пласте (Q - точка водоотбора), б - то же при совпадении контакта с границей плановой фильтрационной неоднородности (v_e - направление скорости регионального потока)

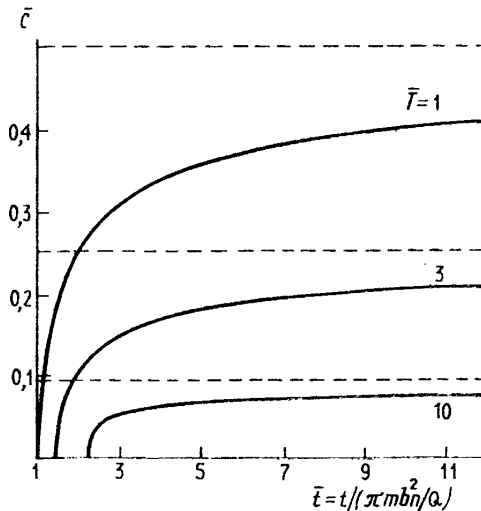


Рис. 10.16. График функции $\bar{c} \div \bar{t}$

Характер гидрогеохимических прогнозов существенно зависит от скорости (v_e) и направления естественного (регионального) фильтрационного потока. Так, при выполнении условия

$$\frac{\pi m L_o v_e}{Q} > \frac{1}{1 + \bar{T}} \quad (10.61)$$

«подпор» естественного потока (он направлен к границе, так что $v_e > 0$ — см. рис. 10.15, б) столь значителен, что подтягивания высокоминерализованных вод к водозаборному узлу не происходит. В противном случае, по истечении периода $t = t_0$ (t_0 — время подтягивания первых порций соленых вод — см. рис. 10.17), изменение концентрационной функции вполне ощутимо и носит экстремальный характер: как видно из графика на рис. 10.17, величина максимальной концентрации $\bar{c}_{\max} = (c_{\max} - c_0) / (c_1 - c_0)$ контролируется соотношением проводимостей $\bar{T} = T_0 / T$ и безразмерным параметром $\bar{v}_e = 2\pi v_e m L_o / Q$. После достижения предела $c_{\max}$ концентрационная функция асимптотически

стремится к своему фоновому значению c_0 : происходит постепенное «вымывание» солей из зоны, ограниченной нейтральной линией тока.

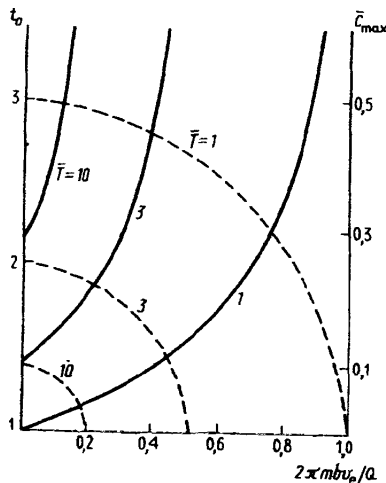


Рис. 10.17. График функций $\bar{t}_0 + \bar{v}_0$ и $\bar{c}_{max} + \bar{v}_e$ ($\bar{v}_e \equiv 2\pi mbv_e/Q$) для второй (б) схемы на рис. 10.15

10.4. О прогностических возможностях стохастических моделей миграции

Основополагающей здесь является предпосылка эргодичности (разд. 3.3), выполнение которой в данной конкретной модели должно, вообще говоря, проверяться специальными численными процедурами. В качестве критерия могут использоваться [17] закономерности перемещения центра ореола по ансамблю реализаций и

* Речь не идет о правомочности этой предпосылки «в принципе»: она остается всегда на уровне рабочей гипотезы.

стремление статистической дисперсии к постоянной величине по мере роста числа реализаций. По этим признакам могут проводиться сопоставления при разных объемах реализаций или оцениваться степень приближения к известным аналитическим решениям. Критическое значение при этом обычно имеет отношение размера области переноса (L) и интегрального масштаба корреляции (l), которое должно быть достаточно большим. Это условие является весьма жестким для ореолов, развивающихся от «точечных» источников вещества, причем наиболее важно настаивать на его выполнении по направлению (y), нормальному вектору основного — конвективного — переноса: в продольном направлении, отвечающем ориентации линий тока, пути частиц оказываются взаимокоррелированными через исходный ореол. До достижения ореолом размеров L_y , хотя бы на порядок превышающего интегральный масштаб l_y , процесс контролируется абсолютными значениями l_y и L , а центр ореола движется с большой степенью неопределенности. Нарушение предпосылки эргодичности при малых начальных размерах ореола физически вполне объяснимо: его развитие будет резко различаться в зависимости от того, к какой зоне (относительно хорошо или слабопроницаемой) от приурочен. С течением времени и расширением ореола, все более проявляется тенденция к сравнительно закономерному площадному распределению коэффициента вариации концентрации, который оказывается максимальным в периферийных частях ореола и растет со временем (в отличие от дисперсии); иначе говоря, качество предсказаний стохастической модели для этих частей ореола отнюдь не улучшается, несмотря на все лучшее соблюдение предпосылок

* Вдоль мощности пласта предпосылка эргодичности может при этом по-прежнему не выполняться.

эргодичности для площади ореола в целом. К этому следует добавить всегда существующие погрешности оценки проницаемости, конечно же, не исчезающие с улучшением «стохастического качества» модели. Более того, с ростом размеров ореолов плотность информации, как правило, падает, что наблюдалось даже на таких — исключительных по информационному обеспечению — полигонах, как Борден и Кейп Код [18]. В реальности все это приводит к тому, что, хотя предсказания «в среднем» могут со временем улучшаться, разрешающая способность модели, особенно для краевых частей ореола, неуклонно падает [13]. Между тем, именно необходимость оценки сравнительно мелкомасштабных флуктуаций поля скоростей (фильтрационных свойств среды), обеспечивающих важнейший диссипативный механизм по отношению к крупномасштабным флуктуациям, выдвигается сейчас рядом авторов как обязательное условие для улучшения качества стохастических моделей.

Дополнительную лепту в эту проблему вносит предпосылка о (статистической) стационарности поля проницаемости. Как справедливо отмечается многими авторами, предпосылка стационарности в стохастическом моделировании, на самом деле, очень часто не работает. В частности, причинами этого могут быть:

1) влияние границ, которое обычно практически неизбежно, по крайней мере, в профиле пласта:

2) анизотропия проницаемости и активной пористости (последняя, как утверждается в работе [11] может достигать двух-трех порядков); в частности, если поток ориентирован перпендикулярно главной оси проницаемости, то линии тока гораздо более извилисты и рассеяние намного сильнее;

* За счет решения обратных задач по данным наблюдений за развивающимся ореолом.

3) рост эффективной проницаемости с увеличением отношения характерного расстояния переноса к размеру расчетного элемента модели.

Последний аспект затрагивает еще одну важнейшую проблему — о соответствии масштабов неоднородности и дискретизации численной модели. Так, необходимое условие для использования эффективных параметров проницаемости выглядит, в принципе, следующим образом:

$$l \ll L \ll Z, \quad (10.62)$$

где l — масштаб локальных вариаций (характерный размер микрон неоднородности, грубо говоря), L — масштаб осреднения параметров, Z — масштаб макровариаций. В то же время, в пределах интегрального масштаба корреляции параметров должно укладываться, по крайней мере, 4–5 ячеек численной модели (в противном случае, параметры отдельных блоков модели взаимно зависимы). В частности, это условие должно выполняться и для поперечной дисперсивности — параметра, во многом определяющего только что упомянутые диссипативные механизмы; в реальности это требование почти никогда не выполняется, так что модели оказываются нечувствительными к данному параметру. Не лучше обстоит дело и с отражением ряда важнейших физико-химических механизмов, протекающих на микроуровне. Так, в стохастических моделях для несмешивающихся жидкостей изменения абсолютных проницаемостей должны коррелировать с изменениями капиллярного давления (на микроуровне) и относительных проницаемостей (разд. 1.1.5 и 4.2.2). С другой стороны, очевидно, что прямолинейное соблюдение всех этих условий потребует очень дробного разбиения сеточной области, т.е. весьма большого числа узлов, а это, наряду с необходимостью большого объема реализаций (порядка 1000), сделает исключительно высокими затраты модельного времени.

Думается, всего сказанного достаточно, чтобы, если не исключить вовсе, то хотя бы резко ограничить использование стохастических моделей для прогностических целей; очевидно, лучшее, на что можно здесь рассчитывать, — это попытки как-то оценить с их помощью возможный диапазон неопределенности наших прогнозов, традиционно осуществляемых на детерминированных моделях. Сделанный вывод, повторим, не снимает важных исследовательских функций стохастических моделей (разд. 3.3).

В качестве дополнительного примера, подтверждающего этот тезис, рассмотрим вариант профильной модели безнапорного пласта, которая отражает условия площадного поступления загрязнения вместе с инфильтрационными водами (т.е. $\varepsilon > 0$). В данной модели расстояние между водоразделом (профильная граница II рода $-\frac{\partial H}{\partial x} = 0$) и областью разгрузки ($H = \text{const}$) составляет 2 км.

Мощность насыщенной зоны по потоку подземных вод меняется от 60 м до 32,5 м. Величина инфильтрационного питания (ε) — $2,8 \cdot 10^{-4}$ м/сут. Фильтрационная часть задачи решалась с помощью программы MODFLOW, миграционная — MT3D (разд. 10.5.1 и 10.5.2).

На первом этапе модельных оценок фильтрационное поле задавалось однородным — постоянное значение коэффициента фильтрации составляло 0,5 м/сут. Рис. 10.18 отражает выходную кривую модельного решения для нейтрального компонента, фиксируемого в области разгрузки фильтрационного потока. Эта кривая находится в хорошем согласии с аналитическим решением (10.22), в котором мощность пласта (m) принималась постоянной величиной, равной среднему значению 50,8 м ($m = F/L$, где F — площадь насыщенной зоны в разрезе, L — длина модельной области).

Следующий шаг исследования был связан с модельной оценкой влияния реальной гетерогенности на характер выходной концентрационной функции. Для того, чтобы оценить поведение системы в данных условиях, было сгенерировано стохастическое, пространственно-коррелированное двумерное поле логарифма

проницаемости. Статистическая форма поля проницаемости определяется экспоненциальной ковариационной функцией вида:

$$\text{cov}_Y(\vec{r}) = \sigma_Y^2 \left[- \left(\frac{r_1^2}{l_x^2} + \frac{r_2^2}{l_z^2} \right)^{1/2} \right], \quad (10.63)$$

где r_i — пространственные координаты, l_x и l_z — корреляционные масштабы, σ_Y^2 — дисперсия величины $\ln K$.

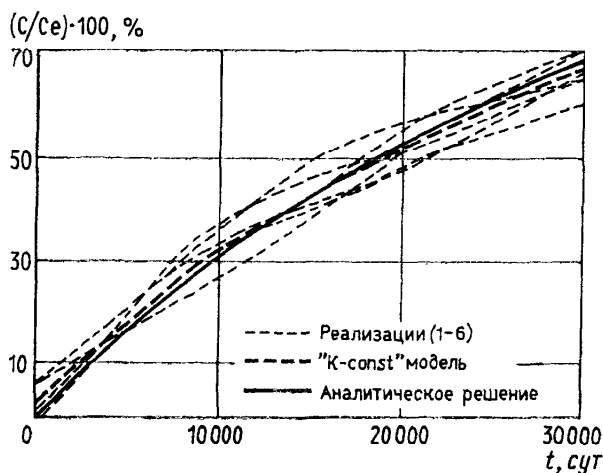


Рис. 10.18. Сравнение модельных и аналитического решений для случая площадного источника загрязнения (параметры стохастического фильтрационного поля: $\mu_Y = -1,7$, $\sigma_Y^2 = 2,0$, $l_x = 200$ м, $l_z = 6$ м); $\Delta x = 20$ м, $\Delta y = 4$ м (размер модельных блоков)

Все расчеты были выполнены для случая сильно анизотропного стохастического поля: $l_x \gg l_z$ (см. подрисуючную подпись к рис. 10.18). Решив последовательно фильтрационную и миграционную задачи для каждой стохастической реализации, получили набор выходных кривых, показанных на рис. 10.18. Как следует из его рассмотрения, вариации в проницаемости породы не ведут к сильному отклонению от результатов, полученных ранее на той же модели

для случая $K = \text{const}$, а также в рамках аналитических оценок. Столь неожиданное поведение системы может быть объяснено важной ролью вертикальной компоненты скорости фильтрации в безнапорном потоке, заставляющей загрязнение интенсивно двигаться через слои, заметно различающиеся по проницаемости. Тем самым достигается эффективное осреднение концентрационного поля. Кроме того, очевидно, определенную роль играет площадный характер источника загрязнения, т.е. в отличие от предшествующих примеров, входной концентрационный сигнал обеспечивает лучшее соответствие предпосылке эргодичности. Таким образом, мы столкнулись здесь с довольно редким классом миграционных задач, которые не столь чувствительны к вариациям поля проницаемости.

10.5. Краткая характеристика базовых компьютерных программ

10.5.1. Численная модель трехмерной фильтрации подземных вод – программа MODFLOW (авторы: М.Мак Дональд и А.Харбах, Геологическая служба США) [16]

Программа MODFLOW реализует численную конечно-разностную модель фильтрации подземных вод для расчета пространственно-временного распределения напоров в трехмерной постановке и базируется на известном уравнении неразрывности фильтрационного потока флюидов постоянной плотности. Алгоритмы решения неявной системы нелинейных (в общем случае) уравнений используют три возможные итерационные процедуры: метод SIP, метод верхней релаксации (SOR) и метод сопряженных градиентов (разд. 7.1.7).

Численный код представляется в модульном виде и состоит из основной программы и серии полностью независимых подпрограмм (модулей); последние группируются в отдельные пакеты. Подключение к основной программе пакетов, имитирующих влияние того или иного фактора, позволяет пользователю учесть многообразие гидрогеологических условий моделируемой области фильтрации (работу водозаборных и инъекционных скважин, дренажных систем,

влияние поверхностных водотоков, испарения и инфильтрации, а также различных граничных условий).

Программа предназначена для моделирования гидрогеологических задач в одномерной, двумерной и трехмерной постановках в условиях установившегося и неуставившегося режимов фильтрации. В программе реализуются как напорные, так и безнапорные условия фильтрации, а также сочетание этих условий (например, моделирование трехпластовой системы, включающей два напорных и один безнапорный горизонты). Модель базируется на центральной конечно-разностной сетке и предусматривает изменение граничных условий во времени путем задания ряда последовательных «стресс-периодов» возмущения пласта (работа скважин с переменным расходом и отключением их от работы, изменение напоров на внешних и внутренних границах во времени и др.).

Ввод исходной информации может осуществляться в форматном и бесформатном видах. Последний более удобен при моделировании относительно однородных полей фильтрации; для других условий (например, ярко выраженная кусочная неоднородность водоносных горизонтов) — предпочтителен форматный ввод. Результаты моделирования в виде рассчитанных напоров или понижений уровней по площади выдаются в табличной форме; выводится также баланс расходов системы и точность его подбора.

Программа написана на языке Фортран-77 и может быть реализована на быстросчитающих персональных компьютерах, в том числе типа IBM PC. Она прошла многолетнюю апробацию в многочисленных подразделениях геологической службы США.

Программа может быть использована для решения широкого круга гидрогеологических задач, связанных с проблемами водоснабжения, осушения месторождений полезных ископаемых, истощения и искусственного восполнения эксплуатационных запасов подземных вод. К программе прилагается подробное и весьма качественное описание теоретических основ моделирования трехмерной фильтрации подземных вод в конечно-разностной постановке, физического и математического подходов к созданию модульных структур программы. Даны практические рекомендации по работе с программой, проиллюстрированные типовым тестом.

Ближайший аналог этой программы в России — программа «GEOWS», разработанная предприятием «Геософт» (Москва).

Недостатки программы носят, в основном, технический характер: она создавалась и развивалась в течение более чем 10 лет, и поэтому не всегда использует наиболее эффективные элементы программирования, «наработанные» в последнее время. Два важных частных недостатка: 1) отсутствие хороших аппроксимаций для задания скважин в слоистых пластах, 2) невозможность прямого моделирования контуров разгрузки подземных вод с промежутками высачивания (что, например, создает определенные сложности при задании на моделях горных выработок).

10.5.2. Численная модель трехмерного массопереноса и дисперсии в подземных водах – программа MT3D (автор С.Зенг, «С.С.Пападопулос и К⁰») [19]

Программа полностью совместима с фильтрационным модулем MODFLOW (см. выше), являясь как бы его транспортным продолжением. Поле напоров, рассчитываемое с помощью MODFLOW, и заданные матрицы проницаемости используются для нахождения поля скоростей фильтрации. Последнее служит базой при решении задачи переноса одним из следующих методов: МОС, модифицированный МОС (ММОС) и комбинация (гибридизация) двух этих методов (НМОС). Предусмотрена также возможность решения уравнений миграции традиционным конечно-разностным методом. Среди физико-химических взаимодействий учитываются линейная равновесная сорбция и деструкция (распад) компонентов.

В качестве моделируемых источников поступления вещества в пласт выступают: скважины, инфильтрация, а также другие внутренние контуры (границы) I или II рода. При этом достигается полная совместимость с блоками «Скважина», «Инфильтрация», «Дрена» и «Река» программы MODFLOW.

Возможно задание на модели переменной в трехмерном пространстве пористости (трещиноватости) пород, а также всех трех компонент дисперсивности ($\delta_L, \delta_T, \delta_z$), в том числе в комбинации с коэффициентом молекулярной диффузии. С помощью «стресс-периодов», согласованных с MODFLOW, возможно изменение концентрации или массового потока вещества в точках его поступления в пласт.

Эффективность работы с такими программами, как MODFLOW и MT3D, резко повышается при использовании пре- и постпроцессоров, позволяющих в итеративном диалоговом режиме подготавливать исходные данные и анализировать результаты. Одним из известных пре- и постпроцессоров, отвечающих этим требованиям, является модуль РМЗ [12], с помощью которого достигается высокая степень визуализации процедур ввода-вывода информации.

10.5.3. Численная модель двумерного массопереноса и дисперсии в подземных водах – программа МОС (авторы: Л.Конилов и Д.Бредехофт, Геологическая служба США) [15]

Численная модель используется для расчета пространственно-временного распределения инертного вещества в потоке подземных вод. В основу программы положено совместное решение двух уравнений — уравнения фильтрации и уравнения миграции, описывающих, соответственно, двумерное (плановое) распределение напоров и концентрации вещества в водоносном горизонте. Программа использует либо неявный метод переменных направлений, либо полностью неявную схему для решения уравнения фильтрации методом конечных разностей; для решения уравнения массопереноса привлекается метод характеристик. В последнем случае используется процедура прослеживания расчетных частиц для представления в модели конвективного переноса и двухшаговая явная процедура для решения в конечных разностях уравнения гидродинамической дисперсии; эта явная процедура имеет различные критерии стабильности, и вытекающие из них ограничения на шаг по времени автоматически определяются самой программой.

Программа написана на Фортране-IV (в более поздней версии — на Фортране-77), содержит в исходном варианте около 2000 команд и может реализовываться на большинстве быстросчитающих компьютеров, в том числе — персональных типа IBM PC. Модель базируется на прямоугольной центральной конечно-разностной сетке. Это дает возможность задавать на модели инъекционные и водозаборные скважины, площадное питание (разгрузку) при переменных значениях мощности пласта, водопроводимости, граничных и начальных условий. Программа позволяет назначать до 5-ти

произвольных узловых точек в качестве наблюдательных, для которых по истечении счета выдается итоговая таблица напоров и концентраций в зависимости от времени. Входные форматы модели требуют наличия шаблонов карт исходных данных и от 7 до 9 наборов данных для описания параметров водоносного горизонта, граничных условий и внешних возмущений.

Предлагаемая модель может быть использована для решения широкого круга задач как в одномерной, так и двумерной (профильной и плановой) постановках в условиях установившегося и неуставившегося режимов фильтрации. Она рассчитывает изменение концентрации вещества во времени, вызванное конвективным переносом, гидродинамической дисперсией, процессами смешения (растворения) за счет поступления воды и вещества из дополнительных источников. В исходном варианте модель предполагает, что переносимое вещество является инертным, а градиенты плотности, вязкости и температуры не оказывают влияния на распределение скорости переноса. В более поздних версиях учитывается равновесная сорбция (по линейной изотерме) и кинетика реакций в рамках уравнений первого порядка. Водовмещающий пласт, в пределах которого осуществляется миграция вещества, может быть гетерогенным и (или) анизотропным. Предлагаемая численная программа является основополагающей и может быть усовершенствована по усмотрению пользователя для решения многих специальных задач, что сейчас и имеет место в США, если судить по ряду последних публикаций.

Программа широко используется в практических расчетах многочисленных фирм и организаций в США и за рубежом, занятых проблемами охраны подземных вод от загрязнения, подземного захоронения промстоков, обоснования качества водных ресурсов, гидрогеологического прогнозирования и др.

Последняя версия МОС (1995 г.) позволяет работать с большими расчетными сетками (до 82х82) в защищенном 32-разрядном режиме процессора ряда 386xx и выше с линейной моделью памяти.

В дальнейшем на основе программы МОС авторами разработана дополнительная программа, рассчитывающая в двумерной профильной постановке движение разноплотностных жидкостей. При этом плотность и вязкость рассматриваются как линейная функция одного из консервативных компонентов двухкомпонентной системы. Уравнения фильтрации решаются на конечно-разностной

сетке неявным методом (SIP). При этом, в отличие от программы МОС, используются: давления вместо напоров, значения проницаемости вместо коэффициентов фильтрации, коэффициенты упругоемкости вместо упругой водоотдачи. Изменена также процедура задания граничного условия первого рода: в узле задается непосредственно требуемый напор. В процедуре метода характеристик каждой расчетной частице придается две расчетные концентрации (по числу компонентов), так что конечно-разностные уравнения для дисперсии решаются дважды. После каждого временного шага делается проверка влияния изменения концентрации на плотность, так что при превышении заранее заданного пользователем критерия осуществляется пересчет на новые значения плотности. Тестовый пример для задачи об интрузии океанических соленых вод подтвердил работоспособность программы.

10.5.4. SUTRA – численная модель фильтрации и массо-теплопереноса в водоносных пластах (с учетом переменной плотности подземных вод и наличия ненасыщенной зоны) (автор Клиффорд Восс, Геологическая служба США)

SUTRA (Saturated-Unsaturated Transport) — компьютерная программа, позволяющая вычислить движение жидкости, перенос тепла или соли в среде. Модель построена на основе двух методов — конечных элементов и конечно-разностного. Программой могут быть реализованы следующие процессы:

1) установившийся или неустойчивый поток подземных вод с учетом их плотности и связи с зоной аэрации;

2а) перенос вещества (соли) в подземных водах, в которых раствор находится в состоянии динамического равновесия с твердой фазой — в изотермических условиях;

2б) перенос тепла в подземных водах и в твердой фазе водоносного горизонта — при неизменных минерализации и составе подземных вод.

* Максимальное их число 6400.

В программе может быть реализован стационарный или нестационарный двумерный — как плановый, так и плоскорадиальный поток в водоносных комплексах, причем в радиальной модели дополнительно можно вводить слоистость. На модели может быть задан перенос одного компонента, включающий процессы равновесной сорбции (согласно изотермам Генри, Фрейндлиха и Ленгмюра), и выделения или распада этого компонента в рамках реакций первого и нулевого порядка. Программа может быть использована при моделировании изменения плотности в процессе движения жидкости; в частности, на профильной модели возможно изучение интрузии соленых вод в водоносные горизонты при наличии или отсутствии переходных зон между солеными и пресными водами. Имитация переноса тепла используется при моделировании термального режима в напорных водоносных горизонтах и в геотермальных системах, а также при термальном «загрязнении» водоносных горизонтов и при естественной конвекции в гидрогеологических системах. При этом плотность и вязкость флюида могут зависеть от температуры, но предполагается локальное температурное равновесие между флюидом и минеральной составляющей.

В программе предусмотрена разбивка либо в декартовых криволинейных, либо в радиальных цилиндрических координатах. Имеется возможность локального укрупнения масштаба модели (введение «лупы»). Проводимость и показатели дисперсии могут быть заданы различными по обоим направлениям. Граничные условия на скважинах (задание откачки или нагнетания) могут пересчитываться или меняться в процессе решения задачи. SUTRA предполагает ввод начальных исходных данных (давление, концентрация раствора или температуры) и последующее их изменение во времени по мере вычислений. Программой предусмотрены печать графиков в выбранном пользователем масштабе, расчет и печать массового или теплового баланса для системы; могут быть также выведены данные температурного режима по выбранным точкам наблюдения.

Численный алгоритм представляет собой сочетание метода конечных элементов и интегрального конечно-разностного метода в рамках принципа взвешенных невязок Галеркина. Стандартная ко-

* На четырехугольных элементах.

нечно-элементная аппроксимация используется только для тех членов балансовых уравнений, которые отражают поток флюида, вещества или энергии. Все остальные члены аппроксимируются на конечно-элементной сетке посредством интегральных конечно-разностных схем. Тем самым сочетаются преимущества конечно-элементных и конечно-разностных схем.

SUTRA использует новый метод расчета скоростей потока, который позволяет — при практически любых градиентах концентрации или температуры — избежать численных эффектов, характерных для конечно-элементных моделей потоков с переменной плотностью и приводящих к сильной дополнительной дисперсии вещества или тепла даже на мелкой сетке.

Временная дискретизация использует расчет части нелинейных коэффициентов по неявной схеме, а другой части — по явной (если расчет последних не предполагает итерационного процесса). Для устранения осцилляций используется взвешивание вверх по потоку, но только для случаев поршневого вытеснения; в противном, используются схемы с симметричным взвешиванием, не дающие большой численной дисперсии.

Численный алгоритм SUTRA не предназначен для нелинейных ненасыщенных потоков: программа требует фиксированной пространственной дискретизации для ненасыщенного водоносного горизонта и является потому неэкономичной для пространственной ненасыщенной модели. Однако нелинейные коэффициенты используются при расчете жидкости переменной плотности: они вычисляются по специальному алгоритму. Хотя программа считается двумерной, третье направление может быть частично учтено мощностью пласта, которая может меняться от точки к точке. Плотность раствора может быть задана постоянной или зависящей от концентрации или температуры раствора.

Текст программы написан на Фортране-IV (в более поздней версии — Фортран-77).

Программа широко используется в практических расчетах многочисленных фирм и организаций в США и за рубежом.

Модель SUTRA имеет модифицированную и упрощенную версию SATRA, которая объединена с программой SATRA-CHEM, что позволяет моделировать конвективно-дисперсионный многокомпонентный перенос с учетом сорбционного или ионного равновесного обмена. Модель основана на методике, использующей физико-хими-

ческие соотношения в рамках исходных масс-балансовых уравнений для подземного раствора; форма этих уравнений допускает их решение методами, которые не зависят от химических процессов. Химическая система регулируется условиями локального равновесия и в ней может быть задана либо линейная сорбция отдельных компонентов и одна-две реакции комплексообразования для тех же компонентов, либо бинарный ионный обмен с учетом одной реакции комплексообразования (анион-комплексообразователь является общим для двух катионов). Уравнения в частных производных, описывающие масс-баланс в жидкой фазе, записываются для каждой «текады» (элементарная химическая единица, общая масса которой не зависит от реакций, сопутствующих процессу) через ее общую концентрацию в растворе. Эти уравнения решаются численно в двумерной постановке посредством модификации уже существующих программ фильтрации и массопереноса. Моделирование заключается в совместном решении дифференциальных уравнений переноса и системы алгебраических уравнений, описывающих химические взаимодействия, чем достигается одновременное нахождение концентраций каждого компонента из общей массы всех переносимых веществ. Даются примеры, иллюстрирующие воздействие — индивидуальное и комбинированное — реакций в водном растворе, линейной сорбции или бинарного ионного обмена на одновременный перенос многокомпонентных растворов в условиях локального химического равновесия.

Необходимо подчеркнуть, что SUTRA, будучи одной из наиболее мощных и сложных программ для гидрогеологических расчетов, должна использоваться лишь для достаточно сложных прогнозных ситуаций с качественными исходными данными. Чаще же всего эту программу имеет смысл применять для исследования сложных процессов с целью лучшего понимания физического поведения системы.

10.5.5. Программа HST3D (автор К.Кипп, Геологическая служба США) [14]

Данная программа предназначена для моделирования в трехмерной постановке (в частном случае — в цилиндрических координатах) фильтрации, массо- и теплопереноса в неоднородных и анизотропных средах, причем эти процессы рассматриваются как

взаимообусловленные, сопряженные (разд. 1.2.2). Последнее особенно важно для изучения миграции растворов переменной плотности и вязкости. К числу типовых задач, решаемых с помощью этой программы, относятся: расчет инъекции токсичных (в том числе, радиоактивных) растворов в водоносные пласты через скважины, миграция от участков поверхностного складирования загрязняющих веществ, интрузия морских вод в прибрежные горизонты, миграция перегретых вод в геотермальных системах, «магазинирование» тепловой энергии в глубокозалегающих толщах.

Три типа управляющих дифференциальных уравнений (для функций давления, концентрации и температуры) являются связанными через рассчитываемое итеративным образом поле скоростей фильтрации. Коэффициенты этих уравнений включают эмпирические зависимости плотности мигрирующего раствора от давления, концентрации и температуры, а также его вязкости — от концентрации и температуры. Возможен учет линейной равновесной сорбции и однокомпонентной линейной деструкции (распада).

Для решения системы дифференциальных уравнений используются конечно-разностные подходы, причем эти уравнения предварительно модифицируются с помощью специальной процедуры, что обеспечивает более тесную их связь и повышенную устойчивость численных схем. При решении конечно-разностных матричных уравнений может использоваться либо метод прямого исключения диагональных членов, либо итерационный метод Гаусса-Зейделя с верхней релаксацией.

Фильтрационные задачи могут решаться в напорной и безнапорной постановке. Базовым источником-стоком является скважина, причем дополнительные численно-аналитические процедуры, включенные в программу, позволяют улучшить качество аппроксимации скважин на грубых сетках. На модели могут быть воспроизведены все основные типы граничных условий для зависимых переменных, например, может легко имитироваться взаимодействие пласта и реки с известным фильтрационным сопротивлением ложа. Подобно программе MODFLOW, возможно также задание меняющихся во времени граничных условий. Кроме того, для эффективного учета внешних областей потока, слабо влияющих на миграционный процесс вблизи источников-стоков, предусмотрены специальные аналитические приемы, позволяющие резко сократить

число блоков модели. Это особенно удобно при моделировании скважин в «неограниченных» пластах.

В целом, настоящая программа является одной из наиболее приспособленных для моделирования сопряженных процессов массо- и теплопереноса. На персональных компьютерах последнего поколения (типа «Pentium») с объемом оперативной памяти 16 МВ вполне доступными для работы являются сеточные области объемом $30 \times 30 \times 7$. Правда, время решения резко нелинейных задач может измеряться в этом случае первыми десятками часов.

10.5.6. Программа FLOWPATH (авторы: Т.Франц и Н.Гвигер, Университет Ватерлоо)

Программа предназначена для анализа на персональных компьютерах процессов двумерного (планового) конвективного переноса в стационарном фильтрационном поле. В практическом плане она рассчитывает поле скоростей фильтрации, линии тока, время переноса, зоны захвата и санитарной охраны водозаборов.

Программа коммерческая, рассчитанная на широкого пользователя, хорошо отработанная и опробованная. Она позволяет работать при разбивке по сетке, содержащей до 10000 узлов (100×100), до 100 работающих скважин, до 100 зон фильтрационной неоднородности. Хорошо разработанное графическое сопровождение позволяет выдавать результаты на экран, принтер, плоттер.

Программа использует конечно-разностный метод (центрально-блочная схема) решения стационарного уравнения плановой фильтрации в напорном или безнапорном пласте с учетом перетекания и поверхностных бассейнов (при неизменных уровнях в смежных горизонтах или питающих бассейнах), а также неизменной во времени инфильтрации. По боковым границам модели задаются постоянные условия первого или второго рода (по умолчанию граница задается непроницаемой).

Для решения уравнений используется итерационный неявный метод переменных направлений: итерации необходимы из-за возможного безнапорного режима и граничных условий 3-го рода при учете перетекания и поверхностных бассейнов. Окончание итерации ориентируется на относительную погрешность напора 0,2 % (по отношению к максимальному перепаду напоров). Максимальное число итераций — 100.

Проследивание движения частиц вдоль их траекторий может вестись в обоих направлениях. Сама траектория выстраивается интегрированием значений действительных скоростей по методу Эйлера, причем пространственная (вдоль траекторий) и временная разбивки подбираются автоматически с использованием схемы предиктора — корректора. Зона размером (R) — порядка 30 % от минимального размера сетки, окружающая откачивающую скважину (при прямом проследивании) или нагнетающую (при обратном), в расчетах не участвует. Во избежание осцилляций вблизи «застойных» точек, вычисление линий тока прекращается, если скорость частицы близка к 0 (частица проходит за один временной шаг менее 0,5 % от среднего размера сетки).

Зона захвата для откачивающих скважин или зона влияния для нагнетающих скважин определяется запуском воображаемых частиц по контуру R (прямое проследивание для нагнетающих и обратное — для откачивающих в пределах заданного периода времени).

Важнейшим достоинством программы является использование CAD (Computer Aided Design) — среды, позволяющей быстро и просто определить постановку сложной задачи и визуально проверять свои действия. Вместо курсоров при этом лучше использовать «мышь».

Описание программы сопровождается примерами: линейный поток в однородном пласте, дуплетное испытание в однородном пласте, откачивающая скважина в потоке подземных вод.

10.5.7. Программа FLOWNET (авторы: Н.Гвигер, Д.Мольсон, Э.Фринд, Т.Франц, Университет Ватерлоо)

Программа предназначена для изучения на персональных компьютерах стационарных двумерных потоков, оценки скоростей фильтрации и построения сетки движения. Наиболее целесообразно ее применение для моделирования профильных двумерных потоков.

* Эти значения интерполируются — для получения гладких траекторий; осредненные значения скоростей определяются по четырем соседним узлам с учетом взвешивания по фильтрационным сопротивлениям.

Программа — коммерческая, ориентирована на широкого пользователя, хорошо отработана и опробована; разработанное графическое сопровождение позволяет выдавать результаты на экран, принтер, плоттер.

В основе построения двумерной сетки движения лежит совместный анализ функций потенциала (напора) и тока, что делает, в частности, прослеживание линий тока существенно более точным, нежели их построение по полю напоров.

Уравнения для напоров и функции тока решаются методом конечных элементов в модификации Галеркина. Сетка представлена прямоугольниками, подразделенными на треугольники (до 51×21 линий в направлениях x и y , соответственно). Проницаемость и направления главных ее компонент могут меняться от узла к узлу, но пористость считается постоянной.

На внешних границах модели задаются граничные условия первого и второго рода.

Результирующая симметричная ленточная матрица размером $N \times NB$ (N — число узлов, NB — полуширина ленты) решается методом декомпозиции Холецкого.

Для безнапорного движения возникает нелинейная задача, требующая итерационных процедур: они ведутся на базе сравнения потенциала и геометрической высоты.

Описание программы сопровождается двумя, достаточно простыми примерами, подтверждающими надежность результатов расчета по ней, а также тремя типовыми примерами расчетов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ К ГЛАВЕ 10

1. Бочеввер Ф.М., Лапшин Н.М., Орадовская А.Е. Защита подземных вод от загрязнений. — М.: Недра, 1979. — 254 с.
2. Гольдберг В.М. Гидрогеологические прогнозы качества подземных вод на водозаборах. — М.: Недра, 1976. — 152 с.
3. Дубинчук В.Г., Поляков В.А., Дубинчук Г.В. Прогноз миграции радиостронция и радиоцезия в зоне аэрации и защищенности грунтовых вод на основе концепции времени пребывания и фактора задержки. Геологические исследования и охрана недр. — М.: АОЗТ «Геоинформмарк», 1995. — с.22-34.

4. Куранов Н.П. Теория массопереноса в безнапорных фильтрационных потоках. Методы расчета процессов массопереноса в гидрогеологических исследованиях/Тр.ВНИИ ВОДГЕО. — М., 1984. — с.14-18.
5. Лукнер Л., Шестаков В.М. Моделирование миграции подземных вод. — М.: Недра, 1986. — 208 с.
6. Мироненко В.А. Динамика подземных вод. — М.: Недра, 1983. — 357 с.
7. Мироненко В.А., Румынин В.Г. Опытнo-миграционные работы в водоносных пластах. — М.: Недра, 1986. — 240 с.
8. Мироненко В.А., Румынин В.Г., Учаев В.К. Охрана подземных вод в горнодобывающих районах (опыт гидрогеологических исследований). — Л.: Недра, 1980. — 320 с.
9. Полубаринова-Кочина П.Я. Теория движения грунтовых вод. — М.: Наука, 1977. — 664 с.
10. Румынин В.Г., Карачевцев Н.Ф. Оценка качества подземных вод при их площадном загрязнении нестабильными компонентами (модельные представления). — М.: Водные ресурсы, 1992. — с.50-72.
11. Carrera J.An. Overview of Uncertainties in Modeling Groundwater Solute Transport. — Journal of Contaminant Hydrology, vol. 13, N1/4, 1993. — p.23-48.
12. Chiang W.-Hs., Kinzelbach W. Processing MODFLOW, Version 3, Department of Civil Engineering, Kassel University, Germany, 1991, 62 p.
13. Kapoor V., Gelhar L. Transport in 3-D Heterogeneous Aquifers. — Water Resources Research, vol. 30, N6, 1994. — p.1775-1802.
14. Kipp Kenneth L., Jr. HST3D: A Computer Code for Simulation of Heat and Solute Transport in Three-Dimensional Ground-Water Flow Systems. U.S. Geological

Survey. Water-Resources Investigations Report 86-4095. Denver, Colorado, 1987, 394p.

15. Konikow L.F. & Bredehoeft I.D. Computer Model of Two-Dimensional Solute Transport and Dispersion in Ground Water. Techniques of Water-Resources Investigation of the United States Geological Survey, 1983, Chapter C2, Book 7, 90 p.

16. McDonald M.G. and Harbough A.W. MODFLOW, A Modular D3 Finite-Difference Ground-Water Flow Model USGS. Tec. Water-Resources Inv., 1988, Chapter A1, Book 6. Washington. DC., 194p.

17. Tompkins J.A., Gan K.C., Wheeler M.S., Hirano F. Prediction of Solute Dispersion in Heterogeneous Porous Media. — Journal of Hydrology, vol. 159, N1/4, 1994. — p.p.105-123.

18. Transport and Mass-Exchange Processes in Sand and Gravel Aquifers. Proc. of the International Conference. AECL Research, 1990, 1370 p.

19. Zheng C. MT3D: A Modular 3D Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion and Chemical Reactions of Contaminants in Ground Water Systems. S.S.Papadopoulos & Associates, Inc., 1990, 70 p.

Название настоящей главы, уже само по себе, достаточно отчетливо оттеняет ограниченность ее целевого назначения: нас будет интересовать не столько пространственно-временная оценка гидрогеоэкологического состояния самой зоны аэрации, сколько защитная роль последней при загрязнении подземной гидросферы. Важность этой проблемы подчеркивается, в частности, необходимостью надежного обоснования зон санитарной охраны питьевых водозаборов, когда недоучет защитного эффекта зоны аэрации может приводить к качественно неверным (негативным, в данном случае) представлениям о возможностях нормального функционирования таких водозаборов. В то же время, мы не будем, конечно, вовсе сбрасывать со счетов анализ геохимического состояния ненасыщенной зоны (влаги и грунтов в ней), но ограничимся здесь упрощенными представлениями для условий зоны аэрации достаточно большой мощности, не заостряя особого внимания на особенностях процессов в ее приповерхностной подзоне. Это позволяет, в частности, уйти от анализа как специфических характеристик среды в данной подзоне, так и повышенной динамики внешних воздействий на нее.

11.1. Общая характеристика основных прогнозных ситуаций и методических подходов к их анализу

Прогнозные построения должны учитывать, что представления о защитной роли зоны аэрации достаточно условны: скорее следует говорить о ее буферном, демпфирующем эффекте, сводящемся к полной иммобили-

зации одних загрязнений или к частичному перехвату и удлинению времени миграции других. При этом грунты и влага в самой зоне аэрации могут становиться источником длительного загрязнения нижележащих водоносных горизонтов, поступающего в них с последующими циклами естественного инфильтрационного питания или с техногенными водами. Именно в таком качестве нас здесь и будут интересовать, в частности, загрязненные грунты ненасыщенной зоны, имея в виду процессы растворения и десорбции в них. Необходимо подчеркнуть, что, независимо от точности исходных физико-математических моделей, прогнозы переноса загрязнений через зону аэрации на больших площадях достаточно условны. Определяется это, в первую очередь, дефицитом исходной информации о действительном строении зоны аэрации на различных участках изучаемой площади. Получая такую информацию по отдельным скважинам, мы вынужденно распространяем ее на прилежащую к скважине зону в виде слоистой системы. Между тем, выдержанная по площади слоистость в пределах тех или иных крупных геологических элементов зоны аэрации — скорее исключение, чем правило. В таких условиях особенно важны диапазонные оценки, позволяющие хотя бы приближенно охарактеризовать степень неопределенности прогнозных построений. По той же причине, предпочтение должно отдаваться вариантам прогноза, в которых фигурируют осредненные по площади значения параметров, определенные по данным полевых наблюдений (прежде всего, речь идет о естественном инфильтрационном питании).

11.1.1. Постановка задач для исследования и их типизация

Исходя из того, что миграция загрязнений через зону аэрации в решающей мере определяется процессами вла-

гопереноса (фильтрации), разрабатываемые далее рекомендации вынужденно соотносятся с крайне ограниченными возможностями достоверной оценки этих процессов и (или) определяющих их параметров, дающих основу для идентификации защитных свойств зоны аэрации и прогноза условий переноса в ней загрязнений. При этом будем пока считать, что оценки проводятся для возможных — гипотетических или проектируемых (т.е. еще не действующих) — источников загрязнения, имея в виду следующие основные типовые ситуации при гидрогеологической разведке (изысканиях):

1) потенциальный источник загрязнения представляет собой длительно действующий поверхностный бассейн промстоков;

2) загрязнения поступают с атмосферными осадками (в частности, при их просачивании через поверхностные или подземные хранилища твердых отходов) или с техногенными стоками, не образующими сколько-нибудь длительных поверхностных скоплений (случайные «разливы» загрязнителей).

Уместность такого подразделения ясна уже из чисто практических соображений. Так, первая из названных ситуаций требует достаточно надежной количественной оценки на сравнительно небольших площадях, конкретный выбор и изучение которых чаще всего возможны лишь при наличии достаточно целенаправленных проектных разработок, учитывающих назначение бассейна, ожидаемые объемы и состав промстоков, вероятную технологию их сброса и т.п. Такое изучение обычно осуществимо лишь на заключительных стадиях разведки, в рамках дополнительных специализированных изысканий, хотя подобная постановка дела и не может считаться повсеместно оправданной. В отличие от сказанного, вторая ситуация характерна для изучаемой территории (гидрогеологической структуры) в целом, с особым, однако, упором на предполагаемые зоны санитарной

охраны действующих или намечаемых водозаборов, а также на участки расположения потенциальных источников загрязнения, таких как хранилища твердых отходов, нефтепроводы, зоны сельскохозяйственных работ и др. На практике соответствующие оценки носят, как правило, весьма ориентированный, качественный характер и выполняются в рамках традиционных разведочных работ, без постановки специализированных исследований — за исключением намечаемых хранилищ твердых отходов*.

Можно, конечно, справедливо усомниться в правомерности устоявшихся практических подходов (мы к ним еще вернемся) и тем самым поставить под вопрос и целесообразность проводимой нами дифференциации. Важно, однако, что она диктуется не столько упомянутыми практическими соображениями, сколько физическими аспектами гидродинамических процессов: в первой ситуации перенос загрязнений идет преимущественно в фильтрационном режиме (можно считать, в условиях полного водонасыщения), а во второй — в режиме свободной инфильтрации (при неполном водонасыщении). Если в последнем случае естественная инфильтрация, носящая площадный характер, позволяет обычно ограничиться одномерным рассмотрением прогнозируемого процесса, то техногенные локальные изменения в интенсивности инфильтрационного питания требуют, как правило, двумерного или даже трехмерного анализа.

Наконец, существенную роль в типизации прогнозных условий может играть физико-химическая природа загрязнителей — аналогично насыщенной зоне (разд. 9.3.4); особую важность для зоны аэрации приобретает выделение класса загрязняющих веществ, не

* В этом смысле ситуация здесь может трактоваться подобно хранилищам жидких отходов.

смешивающихся с водой, прежде всего — жидких углеводородов, особенностям миграции которых в дальнейшем будет посвящен специальный раздел в третьем томе монографии.

Также в особом разделе далее предполагается рассмотреть специфику постановки и решения прогнозных задач на участках действующего загрязнения зоны аэрации и связанных с нею подземных вод. Целесообразность выделения подобных ситуаций диктуется двумя соображениями. Во-первых, все чаще на таких участках проводится более-менее интенсивный гидрогеоэкологический мониторинг, что дает повышенную информацию (в частности, о конкретных загрязнителях) и позволяет эффективно увязать прогнозные построения с анализом обратных задач по данным мониторинга (гл. 23). Во-вторых же, прогнозные задачи в этих случаях нередко затрагивают не только оценку развития собственно процессов загрязнения, но и анализ ожидаемой эффективности возможных водоохраных мероприятий; в предельном варианте, прогноз может иногда проводиться при наличии первой фазы наблюдений за такими мероприятиями (опытно-эксплуатационный подход).

Заметим, что рассматриваемым далее оценкам, носящим, по возможности, количественный характер, предшествует общий качественный (преимущественно геолого-структурный и вещественный) анализ зоны аэрации, выводящий на исходное районирование территории по защищенности [1]; суть и методы такого анализа достаточно общеизвестны и здесь нами не рассматриваются. Полезно лишь подчеркнуть ограниченную ценность подобного районирования — не только из-за его ориентации на узкий круг принимаемых во внимание признаков, но и ввиду необходимости его увязки с общей гидрогеологической ситуацией (в частности, с положением того или иного участка в

гидродинамической структуре района), чего обычно не делается.

11.1.2. Оценка по предполагаемым участкам размещения поверхностных бассейнов промстоков

В этом случае можно исходить из предпосылки, что подлежащие изучению интервалы зоны аэрации окажутся впоследствии частью зоны насыщения — или непосредственно под бассейном или в области его гидродинамического влияния (техногенного повышения уровня подземных вод). На деле, конечно, возможно существование ненасыщенной зоны и под дном бассейна, но с точки зрения условий длительного переноса загрязнений это обстоятельство не слишком принципиально: они зависят, главным образом, от фильтрационных потерь из бассейна, определяемых в первую очередь слабопроницаемыми образованиями, которые будут находиться в состоянии, достаточно близком к полному насыщению. Соответственно, главное значение для прогноза техногенной фильтрации имеет вертикальная (чаще всего, это непосредственно экранирующие его грунты или искусственные противофильтрационные экраны), а также горизонтальная — плановая — проницаемость и емкость пород в зоне предполагаемого техногенного подтопления; необходимые параметры могут изучаться применительно к водонасыщенному состоянию пород. При этом можно уточнить, что анализ последней задачи (для области плановой фильтрации), строго говоря, лежит вне проблематики данной главы и упоминается здесь лишь в силу очевидных научно-методических параллелей. Так, особая значимость — в свете рассматриваемой проблемы — учета профильной фильтрационной анизотропии пород в основании бассейна промстоков подчеркивается,

например, опытом эксплуатации хвостохранилища на Кингисеппском месторождении фосфоритов. Благодаря различию проницаемости подстилающих ленточных глин вдоль и вкрест напластования примерно на три порядка, основная доля фильтрационных потерь из хвостохранилища образует медленно мигрирующий в горизонтальном направлении приповерхностный ореол загрязнения, который периодически устраняется за счет «промывки» в паводок водами р. Луги.

Сказанное предполагает, что получаемая контрольная цифра возможных утечек из бассейна является достаточной для оценки степени защищенности подземных вод на участке. На самом деле, конечно, эта оценка будет носить лишь предварительный характер, ибо она никак не учитывает возможных трансформаций конкретных загрязнителей в донных отложениях или очищающей способности экранирующих грунтов и подстилающих их пород зоны аэрации. Подобные оценки, которые способны лишь улучшить прогнозную ситуацию, изучаемую при изысканиях, можно отнести на период детальных проектных проработок, когда имеются более четкие представления о составе стоков и техногенных донных отложений.

Хуже обстоит дело с трудно достижимым учетом возможного увеличения проницаемости экранирующих отложений за счет их взаимодействия с промстоками, что особенно характерно при хранении техногенных рассолов. Имеющийся опыт диктует пока довольно простое решение этой проблемы: грунтовые экраны — как естественные, так и искусственные — окажутся в конечном счете малоэффективными для таких бассейнов,

так что в период разведки (изысканий) под них можно исходить из априорного предположения о недостаточной защищенности подземных вод на участке, по крайней мере при длительной эксплуатации бассейна*. Отказ от подобной консервативной оценки в случаях низкой исходной проницаемости экранирующих грунтов (менее 10^{-4} - 10^{-5} м/сут) или большой их мощности (десятки метров) должен быть обоснован специализированными исследованиями, выходящими за рамки традиционных изысканий.

Кратко остановимся теперь на возможной защитной роли нижней части зоны аэрации, попадающей в область подтопления бассейна промстоков. В отличие от традиционной проблемы подтопления, здесь возникает необходимость оценки значения этой зоны в переносе и трансформации загрязнений, что особенно важно для пород с доминирующей трещинной проницаемостью: часто именно зона, залегающая непосредственно под естественным (безнапорным) уровнем подземных вод и (или) в пределах его сезонных колебаний, обладает фильтрационными свойствами, существенно отличными от нижележащих водоносных пород — даже при той же их литологии. Наиболее типичный пример — характерная для многих карбонатных массивов повышенная проницаемость или емкость пород над меженным уровнем подземных вод (см. также следующий раздел главы). С другой стороны, для пористых и трещиновато-пористых образований специфика этой зоны связана с капиллярными эффектами и частой сменой окислительно-восстановительной обстановки, способствующими консервации загрязнителей непосредственно над

* Время засоления экрана (с коэффициентом фильтрации примерно до 10^{-3} м/сут) и потери им защитных свойств может быть оценено, исходя из скорости конвективного переноса при градиенте порядка единицы; при меньших проницаемостях засоление идет существенно диффузионным путем.

депресссионной кривой. Такого рода эффекты имеют принципиальное значение при оценке, например, загрязнения подземных вод нефтепродуктами. В целом, породы нижней части зоны аэрации могут играть особую роль в переносе и трансформации загрязнений, мигрирующих от поверхностных бассейнов промстоков или поступающих с инфильтрационными водами. Наиболее важно учитывать это применительно к легким загрязняющим растворам, тяготеющим к данной зоне в силу плотностной конвекции.

С учетом всего сказанного, в остальном прогнозные оценки для участков бассейнов промстоков могут проводиться согласно принципам и методам, изложенным ранее для зоны насыщения.

11.1.3. Оценки защитных свойств зоны аэрации по территории в целом

Наиболее важными и вместе с тем практически доступными при подобных оценках являются два предельных варианта: 1) расчет по величине естественной инфильтрации и 2) расчет по вертикальной проницаемости относительно водоупорных элементов разреза при полном их водонасыщении. Исходным ориентиром, определяющим целесообразные условия применимости этих двух подходов, может служить, соответственно, отсутствие или наличие верховодки над слабопроницаемыми образованиями в пределах зоны аэрации. В целом же, эти два подхода должны рассматриваться как во многом взаимодополняющие друг друга.

Первый подход предполагает наличие сведений об инфильтрационном питании, что более-менее достижимо на достаточно изученных территориях; здесь возможна хотя бы осредненная по большой площади и во времени оценка инфильтрации в результате балансовых построений. В

относительно редких случаях таким оценкам могут способствовать лизиметрические определения, в общем мало характерные для гидрогеологических и инженерно-геологических изысканий*. К этому надо добавить, что для оценки скорости переноса загрязнений с естественной инфильтрацией необходимо еще достаточно детальное определение исходной объемной влажности пород, отождествляемой с их емкостью по отношению к нейтральным загрязнителям. Наконец, данный подход не содержит необходимого запаса надежности, так как не учитывает возможных случайных «разливов» загрязнителей, а также характерных природных «всплесков» инфильтрационного питания (при паводках, снеготаянии, интенсивных дождях и т.п.), сопряженных со временным затоплением поверхности и, соответственно, резким усилением переноса загрязнителей по карстовым каналам, макротрещинам, трещинам. Поэтому, рассуждая сугубо теоретически, ориентация на естественные (осредненные во времени — обычно в многолетнем цикле) скорости инфильтрации, будучи разумной при конкретных миграционных прогнозах, должна рассматриваться при анализе защитных свойств зоны аэрации как желательная дополнительная (относительно *менее безопасная*) оценка, позволяющая уточнить возможный диапазон этих свойств. На деле, однако, польза этой оценки обычно целиком определяется ее надежностью: при проведении изысканий в районах с хорошей геофильтрационной изученностью, позволяющей определить значения инфильтрационного питания, а иногда и их изменение во времени достаточно уверенно, трудно предложить лучшую альтернативу данному подходу. То же можно сказать

* Примерно то же можно сказать и об оценке инфильтрации по результатам лабораторных испытаний влагопереноса в образцах естественной плотности-влажности, хотя для гомогенных, однородных пористых грунтов такая оценка не исключается.

и об участках складирования «сухих» отходов, если величина инфильтрационного питания (обычно существенно отличного от естественного) определена здесь длительными, по крайней мере двух-трехлетними, наблюдениями по совокупности лизиметров, заранее установленных в основании складированных масс. Одновременно, тем самым решается и другая важная задача — установление граничных концентраций загрязнителей; в трудностях ее решения мы убедились при исследовании выщелачивания сульфидных минералов из горных отвалов Ковдорского железорудного месторождения [2]: отсутствие прямых наблюдений за инфильтрацией через отвалы вскрышных пород не позволило до сих пор количественно оценить истинную интенсивность процесса, приводящего здесь к обширному сульфатному загрязнению откачиваемых дренажных вод.

Переходя ко второму из вышеупомянутых подходов, будем учитывать, что поставленная задача — оценка защитных свойств зоны аэрации — обычно исключает необходимость рассмотрения однородных комплексов сравнительно высокопроницаемых гомогенных (трещиноватых или раздельно-зернистых) пород. Конечно, при большой мощности зоны аэрации в районах с ограниченным инфильтрационным питанием раздельно-зернистые породы тоже могут выполнять защитные функции. Мы не будем, однако, рассматривать далее подобные условия, так же как и гомогенные глинистые толщи — в силу тривиальности соответствующего анализа и сравнительной простоты определения исходных параметров. Сказанное позволяет сосредоточить анализ на неоднородных (слоистых) песчано-глинистых толщах и комплексах гетерогенных пород с двойной емкостью. Оба этих варианта могут быть сведены к предельной — с запасом удовлетворяющей требованиям безопасности — оценке вертикальной проницаемости относительно водопорных пород или проводящих свойств сла-

бопроницаемых блоков (макроагрегатов) при полном их насыщении, — наряду с оценкой емкостных свойств, определяемых общей пористостью. Справедливость этого положения, вытекающего из достаточно очевидных общих соображений, подкрепляется, конечно не без огороков, и более детальным анализом процессов влагопереноса в названных типовых комплексах.

Так, в *слоистых песчано-глинистых толщах* распределение влажности (степени насыщения $\bar{W}$) при длительной свободной инфильтрации (ε) устанавливается согласно условию равенства коэффициентов влагопереноса ($\bar{K}$) в отдельных слоях, обеспечивающему неразрывность стационарного нисходящего потока влаги: $K_i(\bar{W}_i) = K_j(\bar{W}_j)$, что заведомо справедливо при отсутствии латеральной (вдоль напластования пород) ее миграции. Уже отсюда ясно, что даже для сравнительно невысоких значений удельной инфильтрации, по крайней мере, слои глини и тяжелых суглинков в зоне аэрации будут вести себя во многом подобно водонасыщенным образованиям. Подтверждением такого состояния может служить наличие «верховодки» или зон повышенной влажности в относительно более проницаемых образованиях, непосредственно перекрывающих упомянутые слои; в противном случае, последние, вероятнее всего, находятся в недонасыщенном состоянии, т.е. $K_i < K_r$. Следовательно, определив проницаемость (коэффициент фильтрации K_f) вкrest слоистости для относительно водоупорных** образований, мы получаем исходную ориентировочную меру возможной интенсивности ($\bar{v}$) и скорости $\bar{v}_d$

* Далее мы уточним, что в случаях пород с двойной емкостью это справедливо лишь при достаточно больших мощностях зоны аэрации.

** Без учета возможного дополнительного напора на участке образования «верховодки».

переноса загрязнений через зону аэрации: $\bar{v}_i \leq K_i$, $\bar{v}_{di} < K_i/n_i$, где n_i — общая пористость пород i -го слабопроницаемого слоя. Однако, если первый из этих показателей, соотнесенный с наименее проницаемым слоем, вполне характеризует ситуацию (предельную интенсивность загрязнения) для зоны аэрации в целом, то второй отражает лишь совокупность минимальных значений скорости и может быть использован для оценки времени загрязнения «снизу», часто — с неоправданно большим запасом надежности.

Для сокращения этого запаса необходимо оценить скорость переноса по всем остальным (ненасыщенным) элементам разреза, что потребует, как минимум, определения исходной объемной влажности $W(z)$ по всему разрезу; приравнивая ее расчетной емкости пород и считая, по условию неразрывности, коэффициент влагопереноса $\bar{K}(W)$ примерно равным коэффициенту фильтрации смежного относительно водоупорного слоя, получаем ориентировочную оценку скорости ($\bar{v}_d = \bar{K}/W$)* и времени переноса. Уточнить ее можно, если независимо определена инфильтрация ε : тогда время t_A достижения загрязненными водами поверхности грунтового потока может быть рассчитано из балансового соотношения (для инертных загрязнителей):

$$\varepsilon t_A = \int_0^{m_A} W dz, \quad (11.1)$$

где m_A — суммарная мощность пород зоны аэрации.

Заметим еще раз, что приведенные рассуждения предполагают доминирование вертикального переноса влаги, инфильтрующейся на большой площади с неизмен-

* Напомним, что в изменчивости отношения $\bar{K}(W)/W$ в зависимости от колебаний текущей влажности породы решающую роль играет изменение параметра $\bar{K}(W)$.

ной интенсивностью во времени; последнее более-менее справедливо для усредненного инфильтрационного цикла при большой мощности зоны аэрации и не учитывает, конечно, сезонных и суточных его колебаний. В частности, возможное ускорение переноса загрязнений в верхней части зоны аэрации после интенсивных дождей или снеготаяния проявится преимущественно в относительно более фильтрующих образованиях, но мало скажется в водоупорных слоях; более того, в принятой расчетной схеме последнее нетрудно учесть, имея представления о колебаниях уровня «верховодки» над водоупорным слоем. В этом смысле излагаемый подход оказывается достаточно универсальным.

Конечно, предложенные оценки приблизительны, но зато они ориентируются на относительно реальную исходную информацию, хотя даже эту ограниченную информацию часто получить непросто. С другой стороны, мы должны помнить о необходимости запаса в наших оценках, учитывающего возможные случайные «разливы» загрязнителей. Такой запас, правда, часто создается уже самой спецификой процесса влагопереноса от локальных и временных поверхностных источников загрязнения (увлажнения).

В самом деле, теоретическое и опытное рассмотрение задачи о локальном «*пакетном*» запуске влаги [12] показывает, что на фронте увлажнения существенно недонасыщенных пород проявляется исключительно сильная анизотропия расчетного коэффициента влагопереноса $\bar{K}$ (разд. 4.1.3): благодаря капиллярно-сорбционным эффектам в слоистых образованиях, величина его для горизонтальной миграции влаги ($\bar{K}_x$) превосходит на несколько порядков величину $\bar{K}_z$; эффект этот сильно проявляется на фронте увлажнения, но слабо выражен на фронте осушения (гистерезис). Поэтому, в конечном счете, поступивший в зону аэрации объем влаги

распространяется на гораздо большую (нежели исходная) площадь и, соответственно, интенсивность, скорость и конечная глубина вертикального переноса загрязнений оказываются резко сниженными по сравнению с миграцией от постоянно действующих протяженных источников загрязнения (увлажнения). Более того, при сильно изрезанном рельефе, когда $d < m_d \sqrt{\chi}$ (d — среднее расстояние между эрозионными врезами, m_d — мощность зоны аэрации выше отметок врезов, $\chi = K_x/K_z$ — коэффициент анизотропии для эффективного параметра влагопереноса), подобные эффекты могут приводить к интенсивному латеральному отводу просочившейся влаги даже при больших площадях дополнительной инфильтрации. Детальный анализ такого рода процессов под силу лишь численному моделированию (разд. 11.4).

Таким образом, можно заключить, что в слоистых песчано-глинистых толщах ориентировочные (как правило, с запасом*) оценки защитных свойств пород зоны аэрации могут быть получены на основе представлений о коэффициентах вертикальной фильтрации относительно водоупорных пород, дополненных контрольными измерениями влажности: чем выше последняя, тем с большей вероятностью данный слой может считаться экранирующим в рассматриваемой ситуации.

В достаточно мощных толщах твердых *трещиновато-пористых пород* вертикальное перемещение влаги при длительной свободной инфильтрации может идти только по пористым блокам. Условия для этого возникают, когда даже в периоды наиболее интенсивной инфильтрации в нижней части зоны аэрации сохраняется существенно недонасыщенное со-

* В этом смысле, излагаемые два подхода взаимно перекрывают друг друга, т.е. позволяют оценить прогнозируемый процесс и «сверху» и «снизу».

стояние: из-за высокого всасывающего давления блочной матрицы, трещины здесь оказываются практически осушенными, и в них остаются лишь небольшие (порядка 10-15 % от площади стенок трещин) «пятна» воды, в пределах которых возможен переток влаги из одного блока в другой. Так как фильтрационное сопротивление трещин, заполненных преимущественно связанным с атмосферой воздухом, намного больше сопротивления влажных пористых блоков, то интенсивность свободной инфильтрации определяется коэффициентом влагопереноса пористой матрицы. Если заменить последний коэффициентом фильтрации, то соответствующие оценки интенсивности влагопереноса будут получены с некоторым запасом (тем большим, чем меньше степень их насыщения), значение которого реально будет дополнительно увеличено за счет недоучета сокращенной площади влажностного взаимодействия блоков. Подобные оценки могут быть, таким образом, сделаны в рамках одних только лабораторных определений проницаемости пористых блоков, дополняемых контрольными определениями их пористости и влажности (степени насыщения): последние, в частности, дают представления о возможном запасе надежности, создаваемом ввиду недоучета неполной насыщенности блоков, и о целесообразности уточнения интенсивности влагопереноса по образцам с естественной влажностью. Получив, таким образом, характерное значение интенсивности инфильтрации и зная исходную объемную влажность (или общую пористость — в расчетах по коэффициенту фильтрации при полном насыщении), нетрудно оценить предельную скорость вертикального загрязнения консервативными компонентами.

Отмеченный выше существенный «запас прочности» подобных оценок позволяет считать их достаточно надежными и в ситуациях, когда будут иметь место случайные «разливы» загрязнителей на поверхности. Это допущение

тем более справедливо, что влияние локальных и временных поверхностных источников загрязняющих веществ (даже несорбируемых и не подвергающихся деструкции) будет сильно сглаживаться горизонтальным перераспределением влаги и вещества — подобно тому, как это описано выше для пористых образований. Впрочем, здесь нельзя не отметить одно важное исключение — загрязняющие компоненты, не усваиваемые пористыми блоками; для таких веществ, помимо отмеченных особенностей влагопереноса, можно рассчитывать лишь на емкость трещин (с учетом сорбционной способности их стенок) и на эффекты биodeградации в сочетании с весьма высокой транспортирующей способностью трещиновато-пористых пород по отношению к газообразным продуктам распада.

Итак, комплексы трещиновато-пористых пород достаточно большой мощности (существенно превышающей, повторим, зону интенсивного промачивания по трещинам, или, что близко по смыслу, выявляемую по kernовому материалу зону полного водонасыщения пористых блоков) могут считаться вполне надежными защитными образованиями. Ясно, что количественные оценки защитных свойств этих образований могут проводиться почти исключительно на основе лабораторных определений, не пренебрегая, конечно, возможными сведениями об инфильтрационном питании. Это обстоятельство особенно важно и в том плане, что на сегодняшний день практически не разработаны сколь-нибудь надежные полевые методы оценки проницаемости трещиновато-пористых пород в зоне аэрации (см. разд. 22.2), хотя имеющиеся на этот счет предложения по опробованию воздухом вполне перспективны (в том, что касается проницаемости по трещинам).

Остается заметить, что при перенесении материалов гидродинамических опробований любых комплексов пород на прогнозные условия всегда существует

определенный запас надежности: он возникает из-за недоучета реальной неконсервативности многих загрязняющих компонентов, вступающих в обменные реакции с породой (почвой) или деградирующих. В частности, очень большую роль может играть биodeградация, переводящая загрязняющие компоненты в газообразное состояние, после чего они интенсивно мигрируют (диффундируют) вверх вместе с поровым воздухом, коэффициент диффузии которого на четыре порядка превышает коэффициент молекулярной диффузии в жидком состоянии [6,13]. Более подробно такого рода процессы рассмотрены в третьем томе монографии.

Возвращаясь теперь еще раз к сопоставительной оценке двух изложенных здесь подходов к прогнозным построениям, нужно учесть, что второй из них требует более детальной характеристики структуры и свойств пород ненасыщенной зоны, а это обычно реально лишь при локальных прогнозах. В то же время, первый подход наиболее чувствителен к основному исходному параметру — удельной инфильтрации, опосредованно учитывающей сравнительно мелкомасштабные вариации структуры и свойств среды. Поэтому на локальном уровне лучших результатов можно, в среднем, ожидать от второго подхода, а на региональном — от первого. Впрочем, нелишне повторить, что эти два подхода являются во многом взаимодополняющими.

11.2. Особенности прогноза миграции загрязнений, вносимых в водоносные пласты с площадной инфильтрацией

Изложенный в последнем разделе обобщенный подход позволяет достаточно просто учесть влияние зоны аэрации на миграцию в водоносном пласте загрязнений,

поступающих в него с площадным инфильтрационным питанием.

Допустимость использования упрощенных процедур здесь оправдана инвариантностью характеристик переноса загрязнений в зоне аэрации по отношению к миграционному процессу в нижерасположенном водоносном горизонте. Исключение составляет малоинтересный для нас класс задач, в которых должно учитываться изменение уровня сравнительно неглубоко залегающих подземных вод, приводящее к заметной трансформации режима влагопереноса. Если же такой «обратной связи» нет, то выходная концентрационная функция c_E , являющаяся решением задачи субвертикального соле-влагопереноса в ненасыщенной зоне, используется для независимого расчета величины массового потока q' через верхнюю границу (кровлю) водоносного горизонта:

$$q' = \varepsilon c_E, \quad (11.2)$$

где ε — инфильтрационное питание. Данная предпосылка допускает широкое применение принципа суперпозиции для учета площадных и временных вариаций величин ε и c_E , что, в частности, делает довольно эффективными аналитические и численно-аналитические методы решения соответствующих краевых задач. Примеры «сшивания» одномерных уравнений миграции в зоне аэрации с балансовыми уравнениями плановых и профильных потоков уже рассматривалось нами в разд. 10.2. Решения подобных задач оказываются весьма чувствительными к инфильтрационному питанию, одновременно контролирующему и фильтрационное поле, и интенсивность внешнего (входного) массового потока; эти особенности системы наиболее рельефно проявляются в прогнозных оценках инфильтрационного загрязнения подземных вод на площадях, тяготеющих к региональным водоразделам.

11.3. О прогнозных оценках развития процессов загрязнения в породах зоны аэрации

До сих пор мы интересовались зоной аэрации лишь с позиций ее защитной роли при загрязнении подземных вод. Понятно, что во многих практических ситуациях самостоятельных интерес может представлять прогноз развития процессов загрязнения непосредственно в породах ненасыщенной толщи, рассматриваемых как охраняемый и/или наблюдаемый объект.

В этом смысле, приведенные выше (разд. 11.1) упрощенные подходы к анализу и прогнозу процессов переноса влаги в зоне аэрации могут рассматриваться как сильно усредненные асимптотические приближения, пригодные лишь при достаточно больших пространственно-временных масштабах. На первых этапах миграции или при малой мощности пород зоны аэрации, исключающих развитие такого рода асимптотических процессов, эти подходы имеет смысл модифицировать в зависимости от конкретных ситуаций, в частности, граничных и начальных условий; последнее особенно важно для приповерхностной части зоны аэрации мощностью в несколько метров: здесь имеют место сильные колебания влажности, связанные с сезонными изменениями в естественном поступлении и расходовании влаги. Понятно, подобные модификации тем более необходимы при техногенных изменениях интенсивности потока влаги или других граничных условий на земной поверхности.

Так, при просачивании влаги с *подтопленной поверхности* используется приближенная гидравлическая модель, предполагающая полное насыщение грунта под действием капиллярных и гравитационных сил [4]:

* Для несмешивающихся с водой загрязнителей требуется специфический дополнительный анализ (т. III)

$$v = K^o \frac{h_n + h_k + l}{l}, \quad (11.3)$$

где l — глубина промачивания, h_n — высота слоя воды на поверхности*. Фронт промачивания продвигается в зависимости от дефицита влаги $\mu_n = W_n - W_o$ (W_o здесь — начальная влажность):

$$v_\phi = \frac{dl}{dt} = \frac{V}{\mu_n}, \quad (11.4)$$

так что для времени перемещения фронта получаем:

$$t = \frac{\mu_n}{K^o} \left[1 - (h_k + h_n) \ln \left(1 + \frac{l}{h_k + h_n} \right) \right] \quad (11.5)$$

Отсюда видно, что на начальных стадиях, когда $l \leq h_k$,

$$l = 2 \sqrt{\frac{K^o H_k t}{\mu_n}}; \quad v = \frac{\mu_n}{2} \sqrt{\frac{2K^o h_k \mu_n}{t}}, \quad (11.6)$$

а для больших времен, когда $l \gg h_k$,

$$l = \frac{K^o t}{\mu_n}; \quad v = K^o,$$

т.е. выполняются асимптотические приближения для насыщенной среды. Как уже отмечалось в разд. 4.1, этот вариант граничных условий приводит к гораздо более гомогенному поведению пород зоны аэрации при влаго- и массопереносе, нежели рассматриваемый ниже. В частности, практическое исключение эффекта застойных зон может резко ускорять процессы переноса при подтоплении поверхности в периоды обильного выпадения осадков или снеготаяния.

При дождевании с постоянной интенсивностью q_n , меньшей K^o , подтопление отсутствует и справедливыми окажутся приведенные ранее асимптотические представления. Так, при однородном строении зоны аэрации образуется четко выраженная область просачивания (глубиной l), в пределах которой влажность остается прак-

* Для учета начальной влажности можно приближенно считать $h_k = h_k^o (1 - W_o)$, где h_k^o — высота всасывания для сухого грунта

тически постоянной. Этот факт доказан теоретически и экспериментально. Для примера, на рис. 11.1 приведены характерные эпюры влажности для конкретного эксперимента [4]. Движение влаги в упомянутой области происходит за счет свободного стекания при градиенте, равном единице (т.е. $v_z = KJ = K(W)$), а влажность на фронте просачивания меняется скачком от начального значения W_0 до постоянного значения W в области просачивания (отметим, что из-за наличия верхнего кольтатационного слоя $W < W_n$, т.е. полного насыщения нет). Составляя балансовое уравнение для бесконечно малого продвижения фронта просачивания dl за время dt , получаем:

$$(W - W_0) dl = K dt,$$

или

$$v_l = \frac{dl}{dt} = \frac{K(W)}{W - W_0}. \quad (11.7)$$

Так как в рассматриваемом случае $q_n = K$, то с учетом (4.4)

$$v_l = \frac{q_n}{(W_n - W_0)(q_n/K^0)^{1/n}}. \quad (11.8)$$

Если начальная влажность невелика ($W_0 \ll W_n$), то

$$v_l = \frac{q_n}{W_n(q_n/K^0)^{1/n}}. \quad (11.9)$$

Полагая для простоты $n=3$ (см. раздел 4.1.2), приходим к решению [4]:

$$v_l = \frac{1}{W_n} \sqrt[3]{q_n^2 K^0}. \quad (11.10)$$

Этот результат может быть использован для оценки коэффициента фильтрации грунта, если из наблюдений известны скорость просачивания v_l и величина расхода инфильтрации q_n . Нужно, однако, сказать, что это решение удовлетворительно описывает лишь движение влаги в однородных, сравнительно хорошо проницаемых грунтах. В глинистых грунтах, в частности, большое значение имеет перенос влаги диффузионным путем (см. первый член в правой части

уравнения (4.16), что приводит к «размыванию» фронта увлажнения и образованию широкой переходной зоны (аналогично случаю конвективно-дисперсионного переноса солей). Еще более серьезное влияние оказывает профильная неоднородность пород в зоне аэрации (см. далее).

Заметим еще, что если $q_n > K^0$, то после первого этапа интенсивного впитывания продолжительностью порядка

$$t_0 = \frac{\mu_n K^0 h_k}{2(q_n - K^0)^2}. \quad (11.11)$$

наблюдается подтопление поверхности [4]. При резко нестационарных граничных условиях на земной поверхности, предпосылка о постоянстве расхода влаги может приводить к большим погрешностям; в частности, вертикальная скорость переноса обычно резко завышается, а для случаев подтопленной поверхности, наоборот, занижается.

В условиях гетерогенных (прежде всего, макропористых) грунтов приведенные зависимости нуждаются в существенной корректировке, как это ясно уже из упрощенного анализа ситуации в разд. 4.1.4; в частности, формулы (4.24) и их асимптотические приближения дают ориентировочные представления о скорости промачивания по макропорам (трещинам) и по пористой матрице, а формула (4.25) позволяет оценить квазистационарный профиль влажности.

Для уточненных расчетов следует ориентироваться на численное моделирование, которое, однако, усложняется сильной нелинейностью процесса, прежде всего резкой изменчивостью влагопроводящих свойств трещинного (макропорового) пространства в зависимости от степени его влагонасыщенности (разд. 4.1.4). Именно этим может объясняться глубокое проникновение влаги и растворенных в ней соединений по трещинам при временном подтоплении поверхности.

В реальности необходимо учитывать, что структура трещинного и, особенно, макропорового пространства неоднородна по глубине. В частности, зона интенсивного развития макропор в *верхнем, актив-*

ном слое почвы не превышает обычно 1 м [4], структуру и параметры ее оценивать сложно, и поэтому ее лучше исключить из долговременных прогнозных расчетов путем введения обобщенного параметра ее влагоемкости (v_a) опытным путем. После подобной операции прогноз ведется только для транзитной доли инфильтрационного питания (q_{nt}), проходящего через активный слой [4]:

$$q_{nt} = q_n - \frac{\partial v_a}{\partial t} \cdot \quad (11.12)$$

Ниже приповерхностного активного слоя располагается *подзона переменной влажности*, мощность которой чаще всего лежит в пределах нескольких метров (хотя для хорошо проницаемых песчаных грунтов она может достигать и двух-трех десятков метров); влажность здесь меняется сезонно в зависимости от соответствующих колебаний поступающего в нее расхода влаги. Именно для этой подзоны и могут оказаться целесообразными все только что приведенные особенности количественного анализа, но их применение для всего годового цикла требует внимательного учета динамики граничных и начальных условий. Поэтому для прогнозов применительно к данной подзоне разумно ориентироваться на численное моделирование, тем более что калибровка такой — одномерной — модели, несмотря на нелинейный характер последней, может быть осуществлена сравнительно надежно благодаря обычно довольно обильной информации по приповерхностной части зоны аэрации. Особенно полезна такая калибровка в случае гетерогенных трещиновато-пористых пород, где глубина подзоны периодического водонасыщения трещин является сама по себе важнейшей характеристикой для всех последующих прогнозов процессов загрязнения подземных вод. Между тем, определение этой характеристики прогнозным путем без контроля по фактическим замерам — операция весьма ненадежная в силу отсутствия или больших погрешностей части необ-

ходимых для этого входных данных, да и трудностей численного моделирования.

Если мощность зоны аэрации превышает глубину сезонных колебаний влажности, то ниже фиксируется *подзона транзита*, в которой влажность сохраняется примерно постоянной и отвечает средне-многолетнему инфильтрационному питанию ϵ_0 . На участках, где естественный инфильтрационный цикл не искажается существенно техногенными факторами, влагоперенос в этой подзоне достаточно надежно прогнозируется в рамках обобщенных асимптотических подходов, изложенных в разд. 11.1. В частности, стационарное значение влажности примерно отвечает здесь зависимости

$$\bar{W} = \sqrt{\epsilon/K^0}, \quad (11.13)$$

что следует с очевидностью из формулы (4.4). Однако, для учета локальных техногенных воздействий, и для данной подзоны могут потребоваться численные прогнозные модели — коль скоро упомянутые изменения в поверхностном питании достаточно велики по своей амплитуде и продолжительности. При этом лучше искать решения в терминах напора, а не влажности, — тем самым проще осуществляется сопряжение различных слоев и переход от зоны аэрации к зоне насыщения [11].

Сказанное можно проиллюстрировать и на примере аналитических подходов. Так, если связь $K(\Psi)$ описывается в виде

$$K(\Psi) = K^0 \exp(-\alpha \Psi), \quad (11.14)$$

то, решая третье уравнение системы (4.5), получим [11]:

$$\Psi = \frac{-1}{\alpha} \ln \left\{ \exp \left[-\alpha (Z + \Psi_0) + \frac{q}{K^0} \exp(-\alpha Z) \right] - \frac{q}{K^0} \right\}, \quad (11.15)$$

где Ψ_0 — высота всасывания при $Z = 0$; для насыщенных слоев

$$\Psi = \Psi_0 - Z \left(1 - \frac{q}{K^0} \right). \quad (11.16)$$

Эти две зависимости и используются в прогнозном расчете, последовательно переходя от самого нижнего слоя к перекрывающим слоям, причем каждый раз плоскость отсчета $Z = 0$ переносится на нижнюю границу расчетного слоя.

Вместе с тем, важно подчеркнуть неправомерность в общем случае одномерных построений, ориентированных на идеально слоистую среду: ввиду сильной зависимости влагопроводящих свойств от степени насыщенности, представления о потоке влаги и скорости переноса вещества, получаемые по совокупности одномерных расчетных «колонок» в пределах данной площади, могут резко отличаться от действительных в сторону занижения. Так, если глинистые включения представлены прерывистыми линзами, а не слоями большой протяженности, то вблизи «окон» и пережимов в относительно водоупорных образованиях насыщенность и влагопроводность проводящих пород растут, в результате чего наличие таких образований может и не приводить к существенному снижению расхода инфильтрационного потока, вызывая в то же время заметное *ускорение* (а не замедление, как это казалось бы логичным) переноса по отдельным наиболее проводящим зонам [10]. С одной стороны, это еще раз напоминает о важности контрольных пространственных численных моделей — в противовес одномерным оценкам; с другой же стороны, подчеркивается необходимость накопления материала о реальной трехмерной структуре зоны аэрации и ее имитации на стохастических моделях (разд. 4.1.3). Кстати, такого рода моделирование приводит к выводам, скорее, негативного свойства относительно наших прогностических возможностей: для оценки распространения локальных загрязнений при их случайных поверхностных разливах необходимо знание конк-

ретной структуры и свойств гетерогенной среды именно на участке разлива, а не «в среднем» по району (разд. 4.1.3).

Наконец, в нижней части толщи ненасыщенных пород фиксируется динамическая *подзона, приуроченная к уровню грунтовых вод*. При отсутствии промежуточной транзитной зоны, прогноз влажностного режима здесь должен осуществляться в рамках общей задачи влагопереноса для *всей* зоны аэрации и грунтовых вод. При наличии же транзитной подзоны, задача резко упрощается, и ситуация вблизи депрессионной кривой может описываться обособленно, исходя из квазистационарных представлений. В частности, высота всасывания в точке с координатой Z над уровнем подземных вод описывается зависимостью [4]:

$$Z = \int_0^{\Psi} \frac{d\Psi}{1 - \varepsilon_0/K(\Psi)}, \quad (11.17)$$

допускающей элементарное численное интегрирование при известной связи $K(\Psi)$.

При зависимости $K(\Psi)$ вида (4.6) [4],

$$Z = \Psi - \frac{1}{\alpha} \ln \frac{1 - \frac{\varepsilon_0}{K^0} e^{-\alpha\Psi}}{1 - \frac{\varepsilon_0}{K^0}}. \quad (11.18)$$

Изменение уровня подземных вод приводит к трансформации режима влагопереноса: при снижении (подъеме) уровня профиль влажности над ним растягивается (сжимается) до нового равновесного состояния, обеспечивающего постоянный расход влаги. Процесс этот — весьма длительный, чем определяется растянутость процесса водоотдачи (водонасыщения) для грунтовых потоков [4]. Характерное время запаздывания имеет порядок [4]:

$$t_3 \sim 50 \frac{h_k v_d}{(K^o)^2}, \quad (11.19)$$

где v_d — скорость изменения уровня.

При близком расположении уровня подземных вод относительно земной поверхности (менее $(3-4)h_k$) отмечается ярко выраженная зависимость коэффициента водоотдачи (насыщения) от глубины уровня Z_d [4]:

$$\mu \approx \frac{\mu_o Z_d}{2 h_k} \left(1 - \frac{\varepsilon}{K^o} \right). \quad (11.20)$$

Если в этом варианте зона аэрации представлена гетерогенными макропористыми или трещиновато-пористыми грунтами, то процессы осушения и подтопления различаются особенно резко: в последнем случае насыщение пород происходит весьма быстро из-за возможности перемещения воды по макропорам и трещинам.

Изложенные подходы позволяют получить прогнозные представления о распределении влажности, а также о динамике потоков влаги в зоне аэрации и ее мощности. Последующий расчет переноса растворенных в воде консервативных загрязнителей не представляет существенных *формальных* сложностей: он осуществляется согласно описанным ранее (разд. 4.1.4) моделям гомогенной или гетерогенной среды аналогично водонасыщенным породам с заменой в них активной емкости на текущее значение объемной влажности. Такой подход обычно вполне допустим даже для гетерогенных сред: насыщение пористой матрицы влагой идет обычно на один-два порядка быстрее, чем насыщение солями (разд. 4.2.2). Необходимо, вместе с тем, подчеркнуть решающее значение для прогнозов надежной оценки степени насыщения влагой макропор и трещин: не слишком сильно меняя общий

* Напомним, что при длительных прогнозах главное значение приобретает конвективный (а не диффузионный) механизм переноса в блоках.

расход инфильтрации, периодическое их насыщение может вызвать глубокое проникновение загрязнителей в виде сравнительно кратковременных импульсов. Опасность такого проникновения резко усиливается в случае загрязнителей, не усваиваемых пористыми блоками, что, например, характерно для некоторых высокомолекулярных соединений; так, при разливах дизельного топлива на поверхности меловых образований оно проникало в пористую матрицу лишь на глубину в несколько миллиметров [5]. В этом варианте загрязнитель остается, преимущественно, на стенках трещин и перемещается все дальше вниз, к уровню грунтовых вод, с каждым новым импульсом влаги. Именно таков, очевидно, механизм углеводородного загрязнения водоносных комплексов, перекрываемых ненасыщенными меловыми породами в Англии [15] или в районах Курской Магнитной Аномалии (т. III).

Прогнозы переноса загрязнений через ненасыщенные трещиновато-пористые среды привлекают в последнее время особое внимание в связи с оценкой роли трещин в покровных глинистых образованиях. Многими работами, опубликованными за последние годы преимущественно канадскими специалистами, создано мнение о решающем влиянии трещин в глинах на условия переноса вещества. Сошлемся для примера на работу [8], в которой соответствующий вывод сделан на основе численного моделирования. Между тем, ни простейшие физические соображения, ни опытные данные не подтверждают столь далеко идущих выводов. Достаточно упомянуть результаты наблюдений за миграцией «бомбового» трития в покровных трещиноватых глинах [16], скорости которой были практически независимыми от наличия трещиноватости. Что же касается проведенных результатов численного моде-

* Прогнозы миграции несмешивающихся с водой загрязнителей рассматриваются на примере жидких углеводородов в третьем томе монографии.

лирования, то они оказались следствием достаточно экстремальных постановок соответствующей задачи миграции: так в упомянутой работе [8] градиент миграции через водонасыщенные глины был задан близким к единице.

Сформулируем принципиальные выводы по обсуждаемой проблеме более четко.

1. Наличие трещин в слабопроницаемых глинистых образованиях может решающим образом изменить (интенсифицировать) протекание в них фильтрационных процессов в условиях полного насыщения.

2. Влияние трещин на перенос загрязнений через глинистые водонасыщенные толщи чаще всего носит ограниченный характер или пренебрежимо мало, за исключением следующим типовых ситуаций: а) загрязнение фиксируется из поверхностного бассейна, достаточно интенсивно подпитывающего подземные воды ; б) природа загрязняющих компонентов такова, что они не диффундируют в пористую матрицу, т.е. мигрируют только по трещинам.

3. Перенос загрязнений через глинистые породы зоны аэрации может заметно зависеть от их трещиноватости лишь при их сравнительно малой мощности и интенсивном инфильтрационном питании, когда соотношение между мощностью покровной (защитной) глинистой толщи и величиной естественной инфильтрации таково, что последняя обеспечивает возможность хотя бы периодического заполнения трещин инфильтрующейся загрязненной водой по всей их длине.

Итак, в целом, проблема прогнозов загрязнения ненасыщенной зоны консервативными компонентами представляется достаточно ясной.

* Глубинным аналогом этой ситуации является перетекание загрязнений из одного водоносного горизонта в другой при наличии больших перепадов напоров (вертикальных градиентов) между ними.

Гораздо сложнее обстоит дело с учетом кинетики физико-химических взаимодействий и трансформаций, которая в породах зоны аэрации выражена обычно намного сильнее, чем в зоне насыщения. Объясняется это и повышенной динамикой физико-химической обстановки вблизи границ зоны аэрации (земной поверхности и уровня грунтовых вод), и важной ролью межфазовых взаимодействий жидкой и газовой компоненты, и активной микробиологической деятельностью.

11.4. Численная модель влаго- и массопереноса в зоне аэрации — VS2DT (авторы: Е.Г. Лаппала, Р.В. Хили, Е.П. Викс, Геологическая служба США)

Программа предназначена для решения двумерных задач влаго- и массопереноса в непористых водонасыщенных породах и является модифицированной версией программы VS2D, моделирующей только закономерности влагопереноса в зоне аэрации. По сравнению с последней, программа VS2DT дополнительно включает новые подпрограммы, моделирующие процессы миграции с учетом физико-химического взаимодействия вещества и породы.

Программа использует конечно-разностную аппроксимацию нелинейного уравнения влагопереноса и конвективно-дисперсионного уравнения миграции. Для решения неявной системы уравнений применяется итерационный метод SIP. Моделирование может осуществляться в одномерной (вертикальная колонна) и двумерной (профильная плоская и осесимметричная задачи) постановках. Модель базируется на центральной конечно-разностной сетке в прямоугольных и цилиндрических координатах и предусматривает задание широкого круга начальных и граничных условий, отражающих многообразие различных природных факторов. Основными переменными являются объемная влажность как функция потенциала (или наоборот), удельная влагоемкость и относительная проницаемость породы (отношение коэффициента влагопереноса к коэффициенту фильтрации при полном водонасыщении породы) как функции потенциала. При отсутствии экспериментальных данных могут быть использова-

ны табличные (типовые) зависимости насыщения и относительной проницаемости от потенциала.

Начальными условиями являются исходные распределения влажности или потенциала (всасывающего давления) и концентрации; граничными условиями — фиксированные напоры, инфильтрация, испарение с поверхности земли, эвактранспирация, участки сосредоточенного стока (границы, вдоль которых вода «покидает» систему и вдоль которой общий потенциал равен геометрической высоте — водоемы, родники, самоизливающие скважины). Предусмотрено и задание «точечных» источников-стоков (инъекционные и водозаборные скважины, лизиметры). Если граничные условия учитывают поступление воды в скважину, то в этом случае обязательно задается и концентрация вещества в воде; при оттоке флюида из системы допускается, что концентрация вещества является идентичной той, которая была в конечно-разностной ячейке на момент «ухода» из нее воды.

Для текущих расчетов коэффициентов влагопереноса, которые являются функцией потенциала (влажности), предусмотрены соответствующие подпрограммы, моделирующие изменение потенциала от влажности породы. Работа этих подпрограмм базируется на привлечении известных аналитических зависимостей Ван Генухтена, Брука и Кори, Гарднера, а также предлагаемой авторами программы табулированной функции. Потребитель может по своему усмотрению воспользоваться одной из перечисленных зависимостей, вводя в программу соответствующие коэффициенты (набор и численные значения их для широкого круга литологических разностей пород приводится в описании, прилагаемом к программе).

В пределах моделируемой области может быть задано любое число слоев различных текстурных (литологических) классов, сопровождаемых вводом для каждого из них численных значений параметров, а также соответствующих коэффициентов выбранной для моделирования аналитической зависимости потенциала от влажности.

Решение конвективно-дисперсионного уравнения массопереноса может быть сопровождаться попутным учетом влияния физико-химических процессов в системе «вода-порода»: равновесной сорбции, описываемой изотермами Фрейндлиха и Ленгмюра; распада вещества I-го порядка; катионного обмена; предусмотрен вариант моделирования сорбции с учетом ее кинетики.

Для ввода исходной информации и вывода результатов моделирования в программе предусмотрены специальные файлы. При этом на печать могут быть выведены начальные и граничные условия, а также значения потенциалов, влажности, степени водонасыщения породы, концентрации вещества на все задаваемые в модели или оговоренные пользователем временные шаги (по всей ячейке сетки или только в заданных наблюдательных точках); вывод баланса масс предусмотрен на конец моделирования.

Программа написана на языке Фортран-77 и может быть реализована на персональных компьютерах, в том числе типа IBM PC. Она прошла апробацию в ряде подразделений Геологической службы США.

Программа может быть использована для решения широкого круга гидрогеологических задач, связанных с количественной и качественной оценками влагопереноса и разного рода загрязнителей от поверхностных источников к подземным водам, прежде всего, для оценки защитных свойств зоны аэрации. К программе прилагается подробное описание теоретических основ моделирования влаго- и массопереноса, приводятся практические рекомендации по работе с программой, проиллюстрированные серией тестовых задач.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ К ГЛАВЕ 11

1. Гольдберг В.М., Газда С. Гидрогеологические основы охраны подземных вод от загрязнения. М., Недра, 1984, 262 с.
2. Мироненко В.А., Мольский Е.В., Румынин В.Г. Изучение загрязнения подземных вод в горнодобывающих районах. Л., Недра, 1988, 287 с.
3. Мироненко В.А., Румынин В.Г. Оценка защитных свойств пород зоны аэрации (применительно к загрязнению подземных вод). Инженерная геология, 1990, N2, с. 3-18.
4. Шестаков В.М., Пашковский И.С., Сойфер А.М. Гидрогеологические исследования на орошаемых территориях. М., Недра, 1982, 244 с.

5. Ashley R.P., Lerner D.N., Lloid J.W. Distribution and degradation of diesel oil in unsaturated zone. *Journal of Hydrology*, 1994, v. 159, N1-4, p.p. 43-59.
6. Corapcioglu M.Y, Baehr A.L. A compositional multiphase model for groundwater contamination by petroleum products (papers 1 and 2). *Water Resources Research*, 1987, v. 23, N1, p.p. 191-213.
7. Gardher W.R. Some steady-state solutions of the unsaturated moisture flow equation with applications to evaporation from a water table. *Soil Sci.*, 1958, 85, p.p. 228-232.
8. Harrison B., Sudicky E.A., Cherry J.A. Numerical analysis of solute migration through fractured clay deposits. *Water Resources Research*, 1992, v. 28, N2, p.p. 515-526.
9. Healy R.W. Simulation of solute transport in variably saturated porous media with supplemental information on modifications to the U.S. Geological Survey's computer program VS2D. U.S. Geological Survey. *Water-Resources Investigations Report 90-4025*. Denver, Colorado, 1990, 125 p.
10. International conference and workshop on the validation flow and transport models for the unsaturated zone. New Mexico, May 22-25, 1988, 548 p.
11. Jeh T. - C.I. One-dimensional steady state infiltration in heterogeneous soil. *Water Resources Research.*, 1989, v.25, N10, p.p. 2149-2158.
12. Mantoglou A., Gelhar L.W. Effective hydraulic conductivities of transient unsaturated flow in stratified soils. *Water Resources Research*, 1987, v.21, N1, p.p.57-67.
13. Marshall T.I. Diffusion of gases through porous media. *Journal of Soil Sci.*, 1959, v.10, N1, p.p. 79-82.

14. Myrand D., Gillham R.W., Cherry J.A., Johnson R.L. Diffusion of volatile organic compounds in natural clay deposits. University of Waterloo, 1987, 22 p.
15. Parker I.M., Dooth S.K., Foster S.S.D. Penetration of nitrate from agricultural soils into the groundwater of the Norfolk Chalk. Proc. Inst. Civ. Engrs. Part 2. 1987, v.83, Mar., p.p. 15-32.
16. Recent trends in hydrogeology. Geol. Society of America. Special paper. 1982, N189, 448 p.
17. Tsang Y.W., Pruess K. A study of thermal induced convection near a high-level nuclear waste repository in partially saturated fractured tuff. Water Resources Research, 1987, v. 23, N10, p.p. 1958-1966.
18. Wilson L.G., Everett L.G., Cullen S.J. Handbook of vadose zone characterization and monitoring. 1994. Geraghty and Miller environmental science and engineering series. 720 p.

Валерий Александрович Мироненко
Вячеслав Гениевич Румынин

ПРОБЛЕМЫ ГИДРОГЕОЭКОЛОГИИ **ТОМ 1**

Теоретическое изучение и моделирование геомиграционных процессов
Монография в 3-х томах

Выпущено в авторской редакции

Набор – *Е.В. Воронцова*

Подготовка оригинал-макета – *Е.В. Воронцова*

Макет переплета – *Е.Б. Капралова*

Печать – *А.А. Данильчук*

Переплет и ниткошвейное производство –

Т.Д. Герасимова, Н.Д. Урбушкина

Компьютерная верстка на настольной издательской системе IBM

Подписано в печать 12.09.98. Формат 30×42/8. Бумага высшего качества, сорта ВХИ, 97 % бел. Гарнитура «Dutch». Ризография. Усл. печ. л. 38,25. Тираж 750 экз. Заказ 316.



ИЗДАТЕЛЬСТВО

МОСКОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ГОРНОГО УНИВЕРСИТЕТА

Лицензия на издательскую деятельность ЛР № 062809 от 30.06.98 г.
Код издательства 5Х7(03)

Отпечатано в типографии Издательства Московского государственного горного университета

Лицензия на полиграфическую деятельность ПЛД № 53-305 от 05.12.97 г.

Изготовление штампов и переплетных крышек – полиграфкомбинат «Пресса»

117935, Москва, ГСП-1, Ленинский проспект, 6; Издательство МГГУ;
тел. (095) 236-97-80; факс (095) 956-90-40