

УДК 581.1:631.4

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЗАГРЯЗНЕНИЙ В ДОННЫХ ОТЛОЖЕНИЯХ.

2. АНАЛИЗ И ПРИЛОЖЕНИЯ

В. Л. ПОЛЯКОВ

Институт гидромеханики НАН Украины, Киев

Получено 18.07.2000

Выполнен анализ закономерностей переноса и накопления загрязняющих веществ в слое донных отложений, их выноса в подстилающий грунт в широком диапазоне изменения модельных параметров. На каждой из двух рассмотренных стадий выделены две характерные фазы. Обоснованы условия локализации загрязнений в донных отложениях. Установлены пределы, в которых кинетика обменных процессов играет важную роль при распространении загрязняющих веществ, повышая их мобильность на первой стадии и снижая подвижность на второй. Даны оценки времени характерного перераспределения загрязнений в донных отложениях, начала их существенного выноса.

Виконаний аналіз закономірностей переносу й накопичення забруднюючих речовин у шарі донних відкладень, їхнього виносу в підстилюючий ґрунт у широкому діапазоні зміни модельних параметрів. На кожній з двох розглянутих стадій виділені дві характерні фази. Обґрунтовані умови локалізації забруднень у донних відкладеннях. Встановлені границі, в яких кінетика обмінних процесів грає важливу роль при розповсюдженні забруднюючих речовин, підвищуючи їхню мобільність на першій стадії і зменшуючи рухомість на другій. Наведені оцінки часу характерного перерозподілу забруднюючих речовин в донних відкладеннях, початку їхнього суттєвого виносу.

A thorough analysis was performed of the regularities of contaminant transport and accumulation in sediment layer within a wide range of the changes in model parameters. Two characteristic phases are distinguished at each stage considered. The conditions under which contaminant is confined in sediment are found. The limits are established within which exchange processes kinetics is of importance at extending contaminant down the sediment layer due to increasing their mobility at the first stage and decreasing it at the second stage. The characteristic time of contaminant redistribution within the sediment layer, the beginning of essential contaminant discharge.

Распространение загрязняющих веществ (ЗВ) в слое донных отложений (СДО) описывается математической моделью, обоснованной и реализованной в [1]. Используемый при этом упрощенный подход к описанию массообмена между СДО и поверхностным водоисточником позволяет во многих случаях надежно моделировать поступление ЗВ в СДО. Принятые допущения в отношении структурных, физико-химических свойств СДО и водоисточника, характера их загрязнения существенно ограничивают область практического применения полученных теоретических зависимостей. Тем не менее, строгое аналитическое решение указанной модели весьма полно отражает специфику природных и техногенных условий для типичных водных экосистем, а анализ особенностей динамики ЗВ, выполненный на базе данного решения, позволяет сделать ряд полезных выводов, которые носят достаточно общий характер.

Для выполнения прогнозных расчетов и анализа особенностей формирования потока ЗВ в СДО при их распространении в экосистеме "водоисточник – СДО – подстилающий грунт" необходимо знать согласно принятой математической модели значения следующих размерных модельных параметров, характеризующих физико-химические

свойства экосистемы:

водоисточника – z_u, D_w, C_0 ;
СДО – $z_0, \theta_s, f_s, \chi, K_e, K_f, \alpha, V, C^0, S_f^0$;
ЗВ – λ, D_0 .

Значения параметров для количественной оценки свойств ЗВ (λ, D_0) приводятся в справочной литературе. Ряд параметров ($z_0, \rho_s, \theta_s, C_0, C^0, S_f^0$) могут быть определены в результате относительно простых измерений. Параметры f_s, D_w достаточно точно рассчитываются на основе известных эмпирических формул [2 – 4]. Для установления достоверных значений z_u, V нередко требуется проведение дополнительных модельных исследований фильтрационного режима в СДО и подстилающем грунте и массопереноса в водоисточнике, хотя чаще V вычисляется исходя из анализа водного баланса в рассматриваемой экосистеме. Наконец, параметры χ, K_e, K_f, α приходится определять вследствие многообразия природных условий в донных отложениях в результате сложных специальных экспериментов.

Для удобства динамика ЗВ в СДО изучалась на основе указанной модели в безразмерном виде, содержащей безразмерные параметры (комплексы) – $D_e, R_f, \lambda, \alpha, \gamma$. Таким образом, искомые безразмерные концентрации ЗВ в растворенной С и

необменной S_f формах являются функциями от безразмерных координаты (высоты) z , времени t и упомянутых выше комплексов. Так как исходные параметры на практике заметно меняются (от объекта к объекту) [5 – 9], то пределы изменения безразмерных параметров при общем анализе могут быть значительными. Данные экспериментальных исследований для ряда природных объектов свидетельствуют о том, что ориентировочный диапазон значений D_e составляет 0.05 – 0.2 (относительно малая его вариабельность объясняется действием двух взаимодополняющих механизмов диффузии ЗВ и стабильным температурным режимом в СДО). Второй важнейший параметр – R_f – часто имеет значение в пределах от 2 (при более слабом взаимодействии ЗВ с твердой фазой СДО) до 10 и более (при сильном взаимодействии ЗВ с твердой фазой). Значение λ приближенно изменяется от 0.05 (для мобильных быстродеградирующих ЗВ) до 0.5 и более (для малоподвижных более стабильных ЗВ). Диапазон возможных значений α является существенно более широким. В принципе этот параметр может меняться на несколько порядков. Выбор больших значений α (свыше 100) указывает на принятие в модели почти равновесного характера обмена между обменной и необменной формами ЗВ. Значения γ находятся в пределах от 0 до 1, причем, как отмечалось в [1], $\gamma = 1$ соответствует случаю постоянной концентрации ЗВ, а $\gamma = 0$ – постоянному потоку ЗВ на верхней границе СДО. Указанные диапазоны изменения исходных безразмерных параметров позволяют отразить в первом приближении разнообразные физико-химические условия, которые характерны для многих водных экосистем, содержащих донные отложения. Следует, конечно, иметь в виду, что такие диапазоны являются по существу ориентировочными и полностью не охватывают многообразие природных и техногенных условий, а поэтому должны устанавливаться в каждом конкретном случае.

На практике, за исключением, возможно, краткосрочных прогнозов, расчетное время часто соизмеримо с характерным временем установления равновесия между обменной и фиксированной формами ЗВ или заметно его превосходит. Очевидно, что временной масштаб, выбранный для построения безразмерного времени и не отражающий этот фактор, может быть недостаточно универсальным. Таким образом, для почти равновесных условий ($\alpha \gg 1$) удобнее результаты расчетов представлять с использованием обобщенного масштаба времени, выражение для которого включает R_f и вытекает из первого уравнения исходной

модели [1], если допустить $S_f = C$. Поэтому вводится обобщенное безразмерное время

$$T = \frac{\bar{t}}{R_f + 1}.$$

Подобное обобщение масштаба времени рассматриваемой математической задачи, однако, не позволяет исключить из нее параметр R_f , который остается в качестве множителя в слагаемом, описывающем деградацию фиксированных ЗВ. Следовательно, сохраняющаяся в явном виде зависимость расчетных величин (концентраций, расходов q) от R_f может служить в таком случае только для частичной оценки вклада деградации ЗВ в общую их динамику. Для полной же оценки вклада этого процесса необходимо, кроме того, выполнять анализ влияния на C и q также и параметра λ . Следует подчеркнуть, что поведение ЗВ в СДО в значительной мере зависит от R_f , причем в полной мере значимость R_f здесь может быть оценена в результате анализа динамики ЗВ с использованием принятого в исходной модели безразмерного времени (не учитывающего R_f). Анализ закономерностей загрязнения и очищения СДО выполнялся на многочисленных примерах. Ниже представлены в виде графиков наиболее характерные результаты. Уровень загрязненности и поток ЗВ рассчитывались отдельно для первой (критической при высокой загрязненности водоисточника) и второй (при низкой загрязненности водоисточника) стадий, и естественно, что обсуждение результатов включает два раздела. В свою очередь, каждый из этих разделов по существу состоит из двух частей. В первой анализируются особенности распространения ЗВ в СДО в условиях мгновенного обмена между различными формами ЗВ; во второй части оценивается значимость обменной кинетики. Основная цель подобных расчетов заключается в осуществлении экологических прогнозов для системы "водоисточник – СДО – подстилающий грунт". Выбор вида прогноза (кратко- или долгосрочный) диктуется характером хозяйственности деятельности человека на обследуемом промышленном или природном объекте и требованиями по охране окружающей среды. Формально можно принимать, что краткосрочные прогнозы должны базироваться на результатах расчета концентраций и потока ЗВ при малых значениях T (к примеру, < 0.1), а долгосрочные прогнозы соответственно при больших T (> 0.5). В начальный период загрязнения СДО, что является предметом краткосрочных прогнозов, важную роль могут играть условия поступления ЗВ в СДО из водоисточника и кинетика обме-

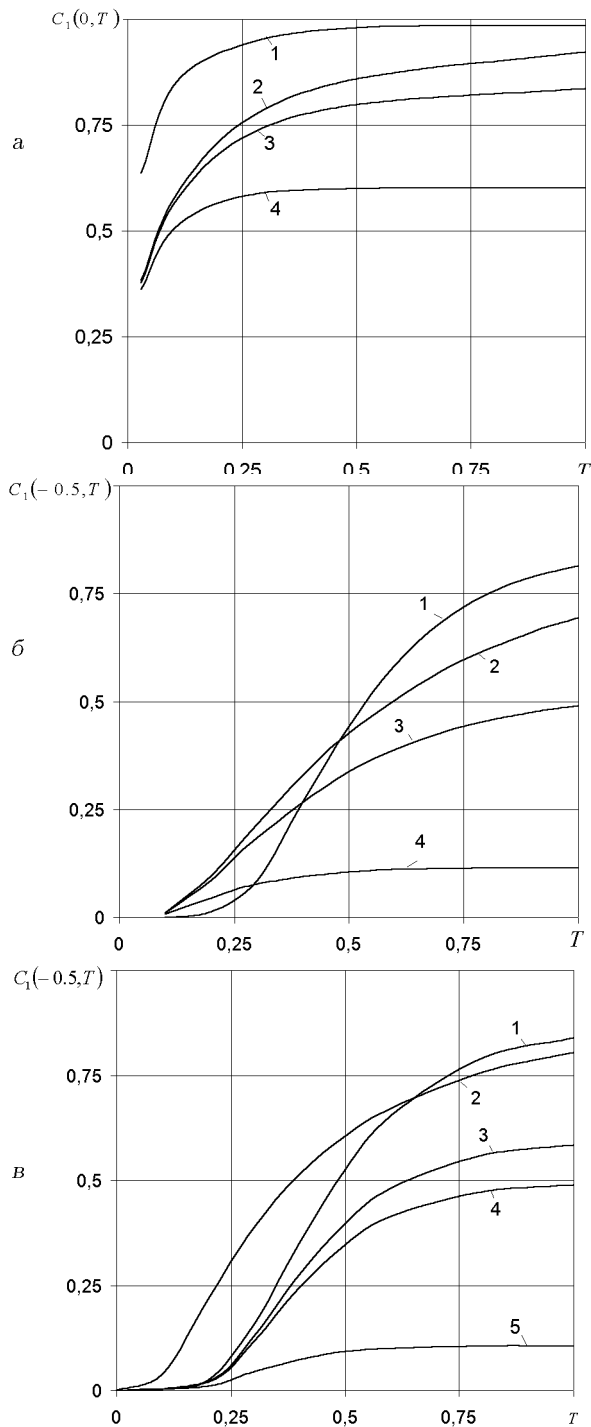


Рис. 1. Изменение концентрации ЗВ во времени:
 а, б - $\gamma = 0$, в - $\gamma = 1$,
 1 - $R_f = 2$, $D_e = 0.05$, $\lambda = 0.1$; 2 - $R_f = 2$, $D_e = 0.2$, $\lambda = 0.1$;
 а - 3 - $R_f = 10$, $D_e = 0.2$, $\lambda = 0.1$; 4 - $R_f = 10$, $D_e = 0.2$,
 $\lambda = 0.5$;
 б - 3 - $R_f = 10$, $D_e = 0.2$, $\lambda = 0.1$; 4 - $R_f = 10$, $D_e = 0.2$,
 $\lambda = 0.5$;
 в - 3 - $R_f = 10$, $D_e = 0.05$, $\lambda = 0.1$; 4 - $R_f = 2$, $D_e = 0.05$,
 $\lambda = 0.5$; 5 - $R_f = 10$, $D_e = 0.05$, $\lambda = 0.5$

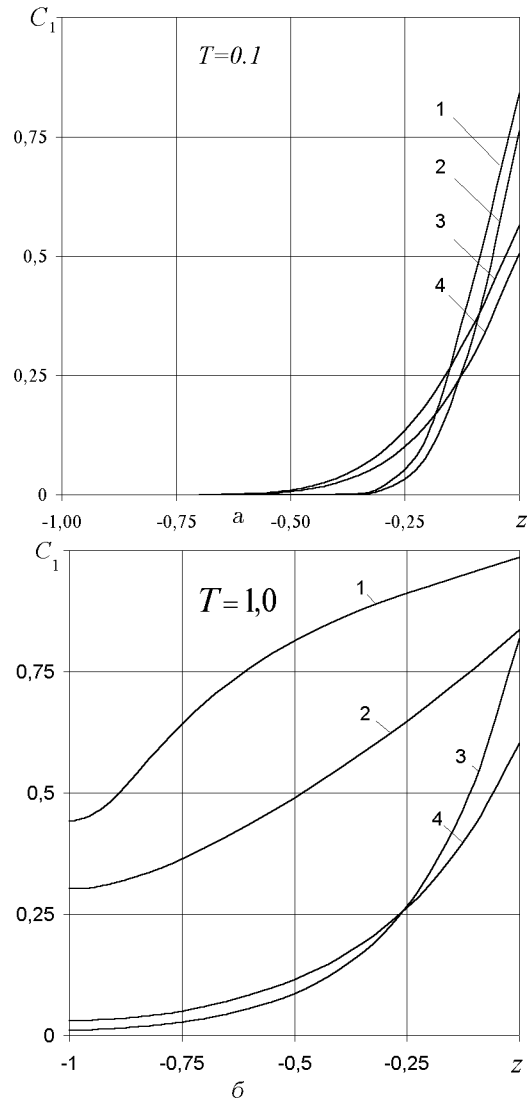


Рис. 2. Профили концентрации растворенных ЗВ:
 1 - $R_f = 2$, $D_e = 0.05$, $\lambda = 0.1$; 4 - $R_f = 10$, $D_e = 0.2$, $\lambda = 0.5$;
 а - 2 - $R_f = 10$, $D_e = 0.05$, $\lambda = 0.5$; 3 - $R_f = 10$, $D_e = 0.2$,
 $\lambda = 0.1$;
 б - 2 - $R_f = 10$, $D_e = 0.2$, $\lambda = 0.1$; 3 - $R_f = 10$, $D_e = 0.05$,
 $\lambda = 0.5$

на между растворенной, обменной и необменной формами ЗВ. Отмеченный момент должен учитываться при разработке методологии экспериментальных исследований.

ПЕРВАЯ (КРИТИЧЕСКАЯ) СТАДИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЗВ В СДО

При расчете первой группы примеров кинетический параметр α полагался равным 1000, то есть фактически принимался мгновенный харак-

тер обмена между растворенными и фиксированными ЗВ. На рис. 1 а, б представлены кривые изменения концентрации растворенных ЗВ на первой стадии C_1 во входном сечении ($z = 0$) и по середине ($z = -0.5$) при постоянном расходе ЗВ на верхней границе СДО ($\gamma = 0$ в условии (10)). Здесь и в дальнейшем даются только ссылки на формулы, приведенные в работе [1]. Для расчетов использовалась формула (19). При $z = 0$ величина C_1 (рис. 1 а) в начальный период ($T < 0.1$) резко возрастает, а после $T = 0.2$ стабилизируется. При относительно малом λ ($\lambda = 0.1$) C_1 асимптотически стремится к значению, практически равному 1, а при существенно большем λ ($\lambda = 0.5$) значительная часть ЗВ, поступающих в СДО, деградирует и тем самым заметно тормозится рост C_1 . Также снижается темп накопления ЗВ в верхней части СДО при увеличении D_e и R_f (влияние этих параметров сопоставимо). Рост C_1 в середине СДО (рис. 1, б) начинается с некоторым запаздыванием, величина которого зависит от исходных параметров D_e , R_f , λ . Позднее всего ($T \approx 0.15$) в рассчитанных примерах начался быстрый подъем C_1 в случае $D_e = 0.05$, $R_f = 2$, $\lambda = 0.1$, что объясняется малым значением D_e . По этой же причине при $T > 0$ концентрация C_1 при $z = 0.5$ становится наибольшей из рассмотренных примеров. Решающее влияние на C_1 в верхней части СДО оказывает деградация ЗВ при $\lambda = 0.5$. Во втором предельном случае, когда поступление ЗВ в СДО не лимитируется их переносом в водоисточнике к верхней границе СДО и моделируется граничным условием первого рода при $z = 0$ ($\gamma = 1$, условие (3)), получена с использованием также формулы (19) динамическая картина для $C_1(T)$ (рис. 1, в). В качественном отношении она подобна такой же картине в случае постоянной концентрации растворенных ЗВ при $z = 0$ (рис. 1, б). Однако интенсивный подъем кривой $C_1(T)$ здесь начинается заметно раньше (в примере с $D_e = 0.05$, $R_f = 2$, $\lambda = 0.1$ $T \approx 0.1$), а в любой момент времени расчетного периода величина C больше аналогичной величины, рассчитанной в тот же момент времени при $\gamma = 0$, вследствие более интенсивного притока ЗВ в этом предельном случае.

Данные расчетов профилей концентрации $C_1(z)$ по формуле (19), приведенные на рис. 2, свидетельствуют о крайней неравномерности распределения ЗВ в СДО в начальный период его загрязнения и о постепенном выравнивании уровня загрязненности в СДО со временем. На рис. 2 представлены профили $C_1(z)$ для случая $\gamma = 0$ при $T = 0.1$, которые могут быть базовыми при составлении краткосрочных прогнозов. Естественно, что

при малых значениях T ЗВ почти исключительно сосредоточены в верхней части СДО. Вглубь СДО проникает несопоставимо малая часть от общего количества ЗВ, поступивших из водоисточника. С течением времени ЗВ под действием диффузионно-конвективного механизма транспортируются в нижнюю часть СДО, а затем начинают интенсивно выноситься в подстилающий грунт. Результаты вычислений $C_1(z)$ при $T = 1$ (рис. 2, б) указывают на значительное загрязнение СДО в целом при $\lambda = 0.1$. Однако существенная неоднородность загрязнения СДО сохраняется и при высоком значении λ ($\lambda = 0.5$). В общем, основываясь на рис. 2, можно утверждать, что наряду с R_f , важнейшее влияние на загрязнение СДО оказывает D_e . Значимость же деградации ЗВ по мере роста загрязненности СДО возрастает и уже при T порядка 1 этот фактор может играть очень важную и положительную роль, содействуя снижению уровня загрязненности не только СДО, но и других компонентов окружающей среды.

СДО, главным образом, благодаря способности его твердой фазы адсорбировать и фиксировать, ЗВ часто способен аккумулировать их значительное количество и существенно сдерживать широкое распространение ЗВ. Однако возможности СДО в снижении подвижности ЗВ, определяемые, прежде всего, параметрами K_e , K_f , α , являются ограниченными. Поэтому при длительном и сильном загрязнении водоисточника и в условиях стабильного фильтрационного потока с течением времени (T в этом случае имеет порядок 1) существенное количество PH транспортируется в нижнюю часть СДО. Как следствие этого, концентрация C_1 около нижней границы СДО начинает расти. Тем самым сначала создаются предпосылки для интенсивного выноса ЗВ в подстилающий грунт, а затем начинается загрязнение этого грунта, которое особенно нежелательно в гидрогеологических условиях, способствующих последующему быстрому переносу ЗВ вдоль хорошопроницаемых слоев. Для количественной оценки выноса ЗВ из СДО рассчитаны расходы ЗВ на нижней границе СДО для предельных случаев лимитированного и нелIMITированного притока ЗВ из водоисточника. Соответствующие величины q_{b1} в зависимости от T для различных значений исходных параметров рассчитаны по формуле (21) и приведены на рис. 3. Начало интенсивного выноса ЗВ определяется параметрами R_f и D_e , а характер нарастания выноса уже во многом зависит от λ . Вид граничных условий при $z = 0$, определяемый условиями поступления ЗВ из водоисточника, слабо влияет на время начала интенсивно-

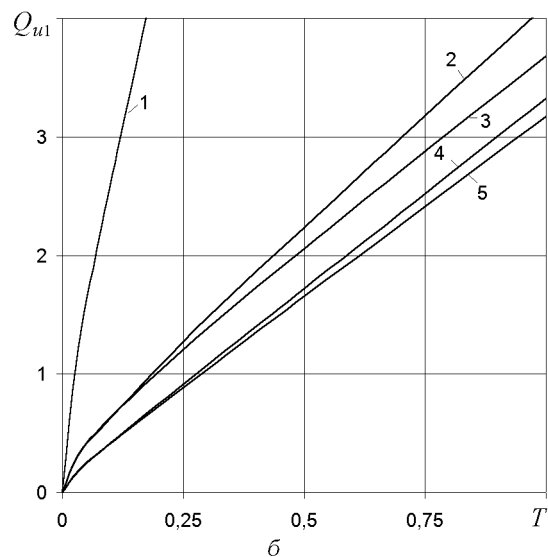
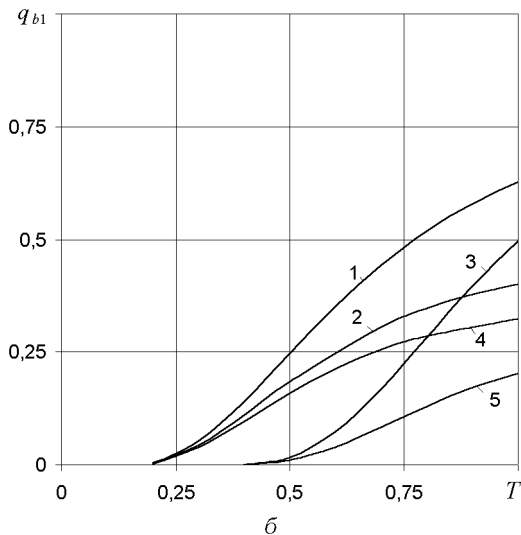
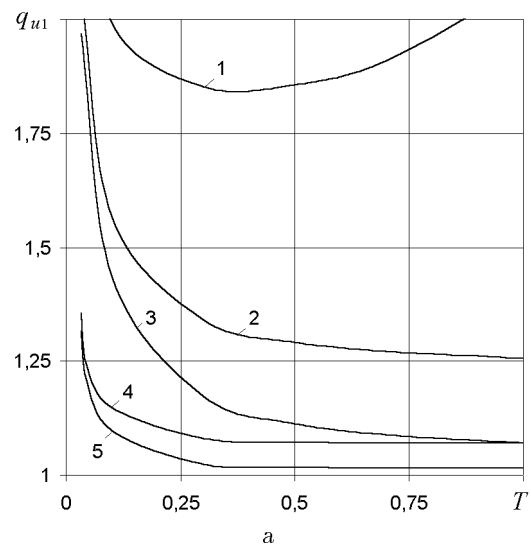
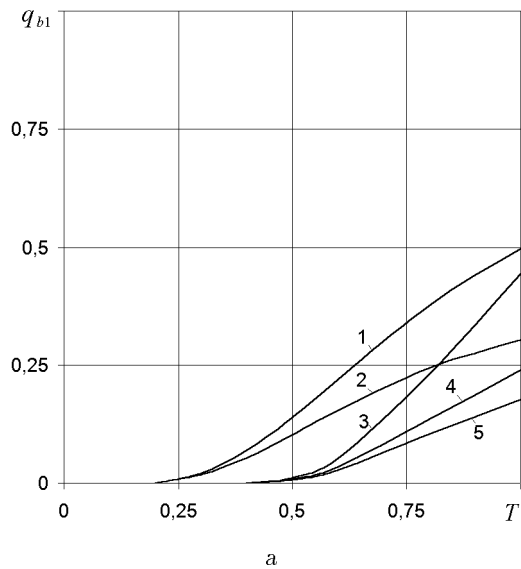


Рис. 3. Расход ЗВ на нижней границе СДО:

- а - $2 - \gamma = 0$; б - $2 - \gamma = 1$
 1 - $R_f = 2, D_e = 0.2, \lambda = 0.1$; 2 - $R_f = 10, D_e = 0.2, \lambda = 0.1$;
 3 - $R_f = 2, D_e = 0.05, \lambda = 0.1$; 4 - $R_f = 2, D_e = 0.2, \lambda = 0.5$;
 5 - $R_f = 2, D_e = 0.05, \lambda = 0.5$

Рис. 4. Расход (а) и суммарное поступление (б) ЗВ в СДО:

- 1 - $R_f = 10, D_e = 0.2, \lambda = 0.5$; 2 - $R_f = 2, D_e = 0.2, \lambda = 0.5$;
 3 - $R_f = 2, D_e = 0.2, \lambda = 0.1$; 4 - $R_f = 2, D_e = 0.05, \lambda = 0.5$;
 5 - $R_f = 2, D_e = 0.05, \lambda = 0.1$

го выноса ЗВ. Однако, в целом, если на верхней границе СДО поддерживается постоянная концентрация ЗВ, то их вынос растет быстрее, чем во втором предельном случае ($\gamma = 1$) и, например, к моменту времени, характеризуемому значением $T = 1$, различия в расходе для обоих случаев достигают 20 – 30%.

При отсутствии ЗВ в СДО к моменту возникновения аварийной ситуации и высоких уровней загрязнения и транспортирующей способности воды в водоисточнике в начальный период распространения ЗВ их расход при $z = 0$ может достигать больших значений. На это указывают данные рас-

четов q_{u1} , представленные на рис. 4, а. Кривые $q_{u1}(T)$, вычисленные по формуле (21), показывают, что расход ЗВ на верхней границе СДО существенно зависит от D_e и λ и с увеличением T стремится к 1. Вместе с тем при больших значениях D_e , концентрации ЗВ в твердой фазе СДО и быстрой деградации ЗВ возможен их интенсивный приток из водоисточника в СДО в течение длительного времени (кривая 1). Также было рассчитано и суммарное количество ЗВ, поступившее в СДО в течение периода $[0, T]$. Для этого использовалась формула (22), а результаты расчетов при-

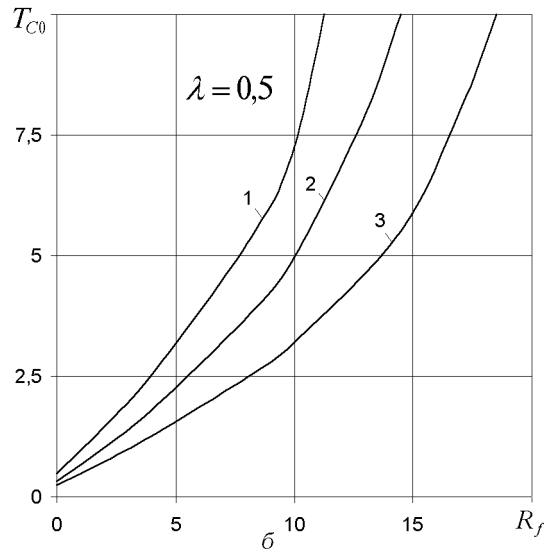
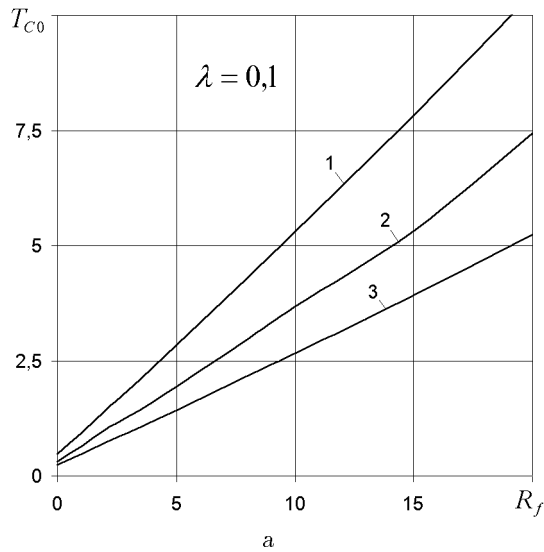


Рис. 5. Графики зависимостей $T_{C0}(R_f)$ при $\lambda = 0.1$ (а) и $\lambda = 0.5$ (б):
 1 - $D_e = 0.5$; 2 - $D_e = 0.1$; 3 - $D_e = 0.2$

введены на рис. 4, б. Полученные кривые за исключением начального периода загрязнения СДО имеют почти линейный характер. Существенно большее количество ЗВ накапливается в СДО при $D_e = 0.2$, $R_f = 10$, $\lambda = 0.5$, что объясняется большим расходом $q_{u1}(T)$ (кривая 1, рис. 4, а).

Из рис. 2, 3 видно, что в начальной (первой) фазе первой стадии поступившие из водосточника ЗВ практически полностью локализируются в верхней части СДО, а профили концентрации ЗВ в растворенной форме $C_1(z)$ (далее будет показано, что это справедливо и для концентрации ЗВ в необменной форме) имеют форму языка. Вследствие линейности исходной модели при любом $t > 0$ и,

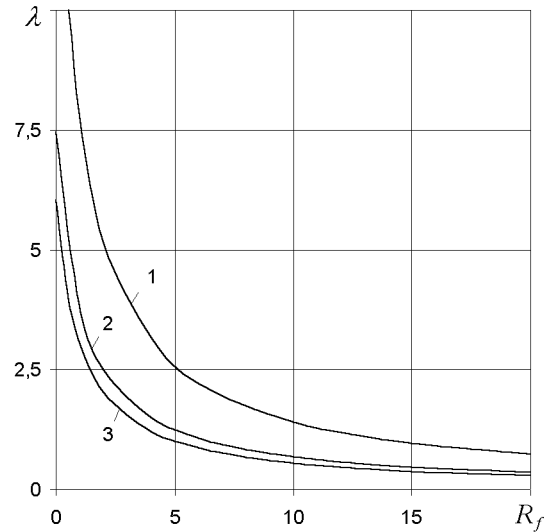


Рис. 6. Графики зависимостей $\lambda(R_f)$:
 1 - $D_e = 0.5$; 2 - $D_e = 0.2$; 3 - $D_e = 0.05$

например, однородных начальных условиях расчетное C_1 везде в СДО также больше 0. Тем не менее можно и удобно для последующего анализа выделить зону, в пределах которой концентрация C_1 уже заметно отличается от начальной величины. Такая зона имеет выраженный передний (нижний) край, координата (глубина) которого и соответствующий момент времени будет обозначаться через z_C , T_C . Положение нижнего края определяется из условия, что C_1 при $z = z_C$ имеет заданную очень малую величину C_b (в расчетах принималось 0.005, хотя, конечно, такой выбор является условным). Момент T_{C0} достижения передним краем указанной зоны нижней границы СДО, по существу, есть момент начала интенсивного выноса ЗВ в подстилающий грунт и является важнейшим параметром для экологических оценок. На рис. 5 показаны результаты расчетов времени T_{C0} как функции от R_f при значениях $D_e = 0.05$; 0.1; 0.2 и $\lambda = 0.1$ и 0.5, иллюстрирующие специфический характер зависимостей $T_{C0}(R_f)$. При $\lambda = 0.1$ в рассмотренном диапазоне R_f указанные зависимости являются практически линейными, так что удвоение R_f приводит к почти аналогичному увеличению T_{C0} . Однако при $\lambda = 0.5$ отчетливо проявляется их нелинейный характер. Более того, зависимости $T_{C0}(R_f)$ имеют вертикальные асимптоты с абсциссами 12.27, 14.71, 19.07, соответствующими принятым значениям D_e , которые отвечают экологически безопасному режиму загрязнения СДО. При таком режиме передний край зоны существенного загрязнения может формально достигнуть нижней границы СДО только при $t \rightarrow \infty$.

Данный режим в определенном смысле является предельным, так как ограничивает совокупность благоприятных в экологическом отношении режимов, при которых ЗВ по существу консервируются внутри СДО. Существование предельного режима возможно только при определенных соотношениях между R_f , D_e и λ . Строго говоря, в фазовом пространстве с координатами R_f , D_e и λ существует поверхность, описываемая уравнением

$$C_b = a_0 e^{(\frac{1}{2D_e} - \delta)} + b_0 e^{(\frac{1}{2D_e} + \delta)}, \quad (28)$$

которая ограничивает множество точек, соответствующих безопасным режимам. Очевидно, что интенсивный вынос ЗВ становится возможным только при выполнении условия

$$C_b < a_0 e^{(\frac{1}{2D_e} - \delta)} + b_0 e^{(\frac{1}{2D_e} + \delta)}.$$

Для фиксированных значений D_e (0.05, 0.2, 0.5) были построены с использованием уравнения (1) кривые $\lambda(R_f)$ (рис. 6), которые определяют положение совокупности точек с координатами λ , R_f , допускающими вместе с соответствующим D_e формирование важного для практики экологически безопасного предельного режима.

До сих пор расчеты примеров выполнялись при значении α , подобранном таким образом, чтобы концентрация C_1 при любых больших α почти не менялась. Физически это означает, что обмен между фиксированной и обменной (растворенной) формами ЗВ протекает с высокой скоростью и кинетикой подобного обмена можно пренебречь. Вследствие этого концентрации растворенных C_1 и фиксированных S_{f1} ЗВ в рассчитанных примерах практически не отличались. В приложениях обычно такой подход оправдан при проведении долгосрочных прогнозов. Однако на практике весьма часто встречаются и случаи, когда кинетика обменных процессов играет важную роль в транспорте ЗВ в СДО. Вообще формальное введение на первой стадии конечной скорости фиксации ЗВ ведет к увеличению концентрации растворенных ЗВ (по сравнению с детально рассмотренным случаем мгновенного обмена, $\alpha \rightarrow \infty$), что обуславливает более ранний и интенсивный вынос ЗВ в подстилающий грунт. Тем самым обменный процесс здесь в целом повышает мобильность ЗВ, что в конечном итоге отрицательно сказывается на экологической ситуации в системе "водоисточник – СДО – подстилающий грунт", а со временем может иметь и далекоидущие последствия. Для количественной оценки значимости кинетического фактора рассчитан ряд примеров при дискретно меняющемся коэффициенте α в пределах от 1 до

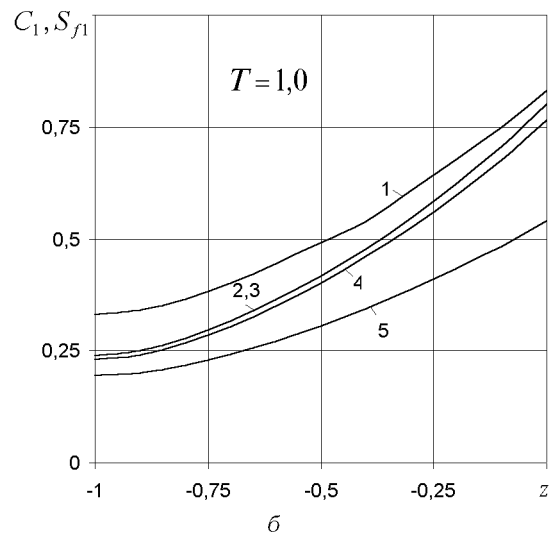
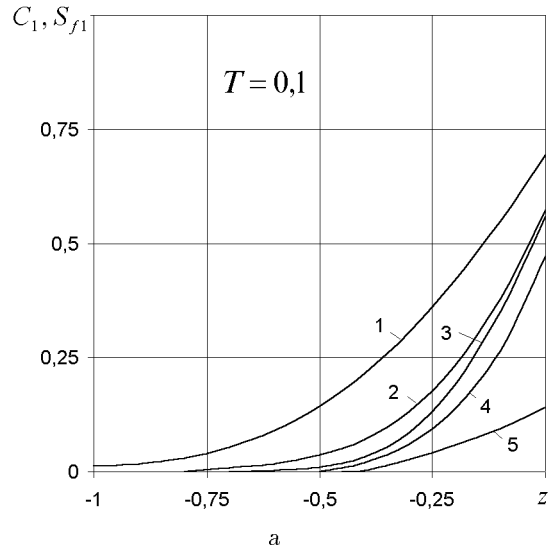


Рис. 7. Профили концентрации ЗВ в растворенной C_1 и необменной S_{f1} формах:
 1 – C_1 , $\alpha = 1$; 2 – C_1 , $\alpha = 10$; 3 – C_1 , S_{f1} , $\alpha = 1000$;
 4 – S_{f1} , $\alpha = 10$; 5 – S_{f1} , $\alpha = 1$

100 по формулам (19). Характерные профили концентраций C_1 , S_{f1} для $R_f = 2$, $D_e = 0.2$ и $\lambda = 0.5$, а также значений α , равных 1 и 10, параметра T , равного 0,1 и 1 представлены на рис. 7, а, б. Здесь же для сравнения показаны профили $C_1(z)$ для $\alpha = 1000$, практически совпавшие с профилями $S_{f1}(z)$. Форма таких профилей сохраняется при любых α из расчетного диапазона, однако различия между C_1 и S_{f1} быстро нарастают при малых T и α ($\alpha \leq 1$) и уже при $\alpha = 1$ C_1 может превосходить S_{f1} в несколько раз. По мере увеличения T упомянутые различия нивелируются и при $\alpha = 10$ кривая $C_1(z)$ практически не отличается от аналогичной кривой, вычисленной при $\alpha = 1000$ (на

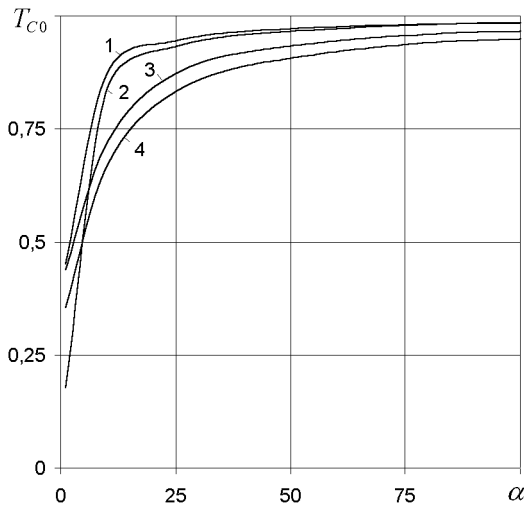


Рис. 8. Графики зависимостей $T(\alpha)$:
 1 - $R_f = 10, D_e = 0.05$; 2 - $R_f = 10, D_e = 0.2$;
 3 - $R_f = 2, D_e = 0.05$; 4 - $R_f = 2, D_e = 0.2$

рис. 7, б они изображены одной кривой 2, 3). Дополнительный анализ показал, что условия массообмена при $z = 0$ отражаются на наполненности концентрационных профилей, но слабо влияют на скорость распространения зоны повышенного загрязнения.

Диапазон значений α , в пределах которого кинетический фактор следует учитывать, устанавливался на основе расчетов времени T_{C0} при различных α , а также D_e, R_f для $\lambda = 0.1$. Полученные таким образом зависимости $\bar{T}_{C0}(\alpha)$ приведены на рис. 8. Здесь $\bar{T}_{C0} = T_{C0}/T_{C0}^*, T_{C0}^*$ - время достижения передним краем языка загрязнения нижней границы СДО при $\alpha \rightarrow \infty$. Во всех рассмотренных примерах игнорирование обмена между фиксированными и растворенными ЗВ приводило к значительным погрешностям в расчетах T_{C0} при малых α , но уже при $\alpha > 50$ ошибка не превышала 10 %.

ВТОРАЯ СТАДИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЗВ В СДО

Изменение уровня загрязненности во внешней по отношению к экосистеме "водоисточник - СДО - подстилающий грунт" среде прежде всего ведет к сопоставимому по количественным показателям изменению загрязненности более мобильной компоненты системы - водоисточника. На практике экологическая обстановка в окружающей среде может меняться или резко, или плавно, но характерное время переходных процессов при этом существенно больше или меньше прогнозно-

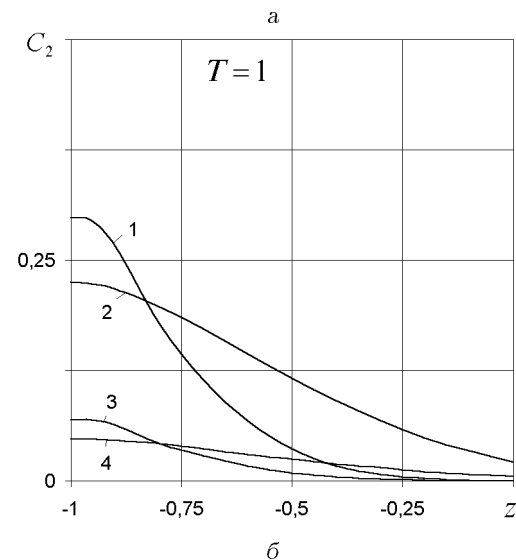
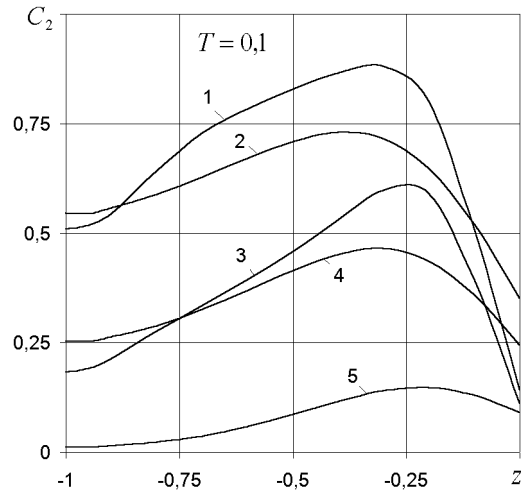


Рис. 9. Профили концентрации растворенных ЗВ (вторая стадия):

- 1 - $R_f = 2, D_e = 0.05, \lambda = 0.1$; 2 - $R_f = 2, D_e = 0.2, \lambda = 0.1$; 3 - $R_f = 2, D_e = 0.05, \lambda = 0.5$;
 4 - $R_f = 2, D_e = 0.2, \lambda = 0.5$;
 5 - $R_f = 10, D_e = 0.2, \lambda = 0.5$

го времени (кратко- и долгосрочные прогнозы) для СДО. Это дает основание использовать и на второй стадии в качестве базовой модель (1) - (8), но при скорректированном значении C_0 (возможно и γ) в граничном условии на верхней границе СДО. Новая константа C_* выбирается таким образом, чтобы отразить существенные изменения содержания ЗВ в водоисточнике. Если в момент окончания первой стадии t_* (ему соответствует значение T_*) C_* окажется меньше $C_1(-1, t_*)$, а именно такой случай будет детально рассмотрен, то запасы ЗВ в СДО сразу или через некоторый промежуток времени начнут сбавляться за счет

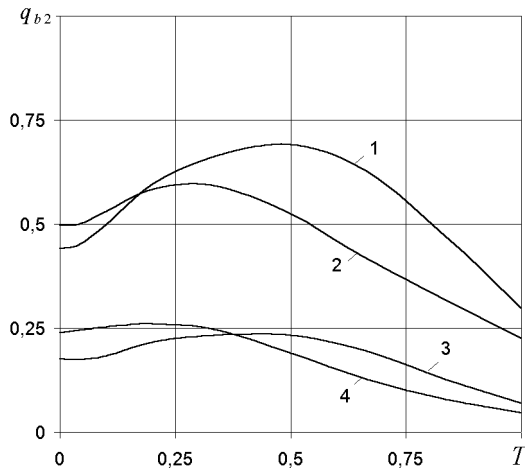
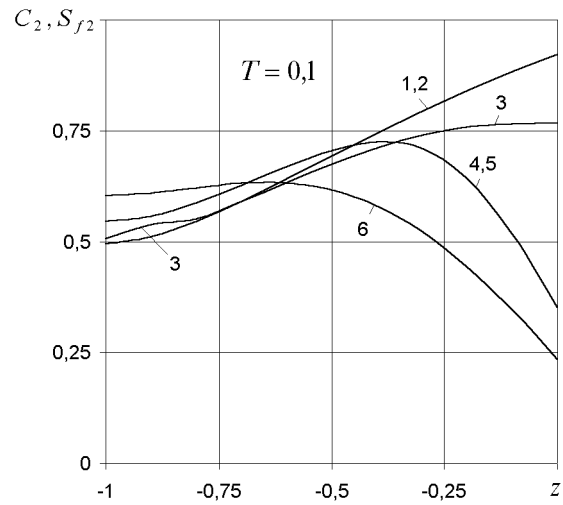


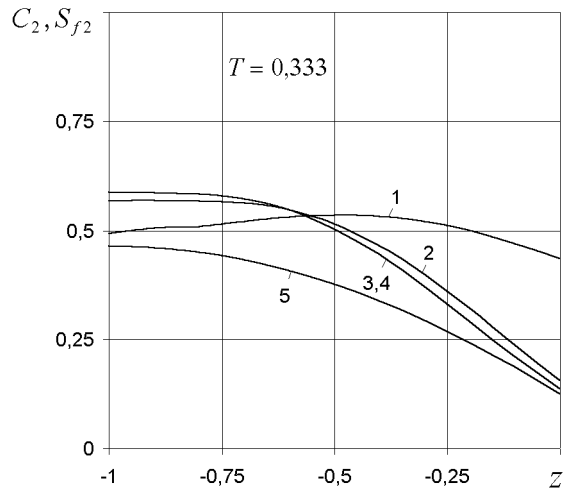
Рис. 10. Расход ЗВ на нижней границе СДО:
 1 - $D_e = 0.05, \lambda = 0.1$; 2 - $D_e = 0.2, \lambda = 0.1$;
 3 - $D_e = 0.2, \lambda = 0.5$; 4 - $D_e = 0.05, \lambda = 0.5$

превышения их выноса над поступлением. Таким образом, СДО становится источником вторичного загрязнения. Особенности поведения ЗВ в СДО на второй стадии устанавливались путем расчета ряда характерных примеров для наиболее благоприятного в экологическом отношении случая чистой воды в водоисточнике ($C_* = 0$). Для определенности принималось, что изменение условий притока ЗВ в СДО происходит в момент времени, характеризуемый значением $T = 1$. К этому моменту в твердой и жидкой фазах СДО аккумулируется значительное количество ЗВ, которое может представлять серьезную опасность для окружающей среды.

Прежде всего анализировалась динамика ЗВ в СДО при условии мгновенного обмена между растворенными и фиксированными ЗВ (кинетический коэффициент обмена полагался равным 1000) и были получены профили концентрации растворенных ЗВ $C_2(z)$ (фактически и $S_{f2}(z)$) для моментов $T = 0.1$ и 1.0 (отсчет времени ведется с момента начала второй стадии), которые показаны на рис. 9. В начальный период второй стадии около входного сечения образуется участок с низким содержанием ЗВ, протяженность которого со временем растет. Промывание СДО сопровождается сложным перераспределением ЗВ в его пределах. Количественная оценка влияния скорости деградации ЗВ на их поведение следует из сопоставления кривых 1 и 3. Увеличение λ в 5 раз здесь приводит в среднем к уменьшению C_2 вдвое. Аналогичным образом влияет и рост соотношения между фиксированными и растворенными (обменными) ЗВ, который учитывается с помощью соответствующего значения R_f (кривые 1 и 5). При длительном промывании СДО в целом уровень загрязненности существенно снижается, а относительно высокое содержание ЗВ отмечается только в нижней части СДО при $R_f = 2$ (рис. 9 б), причем концентрация $C_2(z)$ монотонно увеличивается вниз по потоку и достигает максимума в выходном сечении. При $R_f = 10$ вследствие одновременных деградации и выноса ЗВ их концентрация к моменту $T = 1$ во всем СДО не превышает 10 - 15 % от исходного



а



б

Рис. 11. Профили концентрации ЗВ:
 а - 1, 2 - C_2, S_{f2} при $T = 0$; 3 - S_{f2} при $\alpha_* = 1$; 4, 5 - C_2, S_{f2} при $\alpha_* = 100$; 6 - C_2 при $\alpha_* = 1$
 б - 1 - S_{f2} при $\alpha_* = 1$; 2 - S_{f2} при $\alpha_* = 10$; 3 - C_2 при $\alpha_* = 100$; 4 - S_{f2} при $\alpha_* = 100$; 5 - C_2 при $\alpha_* = 1$

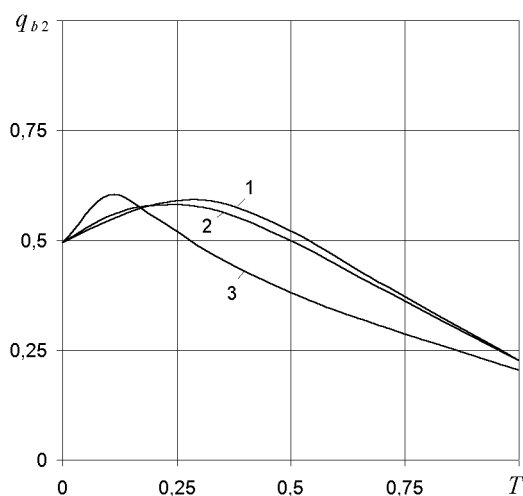


Рис. 12. Расход ЗВ на нижней границе СДО:
 1 - $\alpha_* = 100$; 2 - $\alpha_* = 10$; 3 - $\alpha_* = 1$

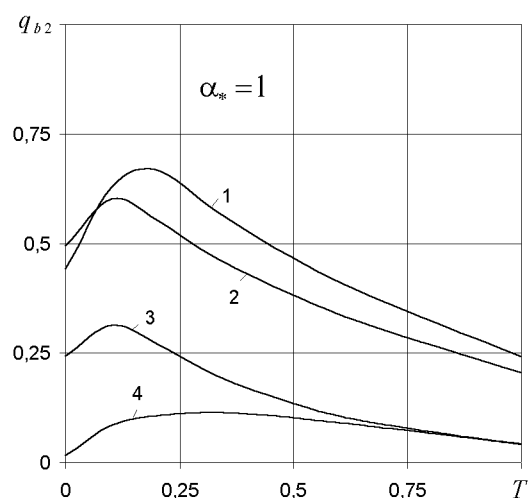


Рис. 13. Расход ЗВ на нижней границе СДО:
 1 - $R_f = 2, D_e = 0.05, \lambda = 0.1$; 2 - $R_f = 2, D_e = 0.2, \lambda = 0.1$;
 3 - $R_f = 2, D_e = 0.2, \lambda = 0.5$;
 4 - $R_f = 10, D_e = 0.2, \lambda = 0.1$

уровня загрязненности. Изменение расхода ЗВ на нижней границе СДО происходит в соответствии с рис. 10. Наибольшее количество ЗВ на второй стадии выносятся при $D_e = 0.05$ и $\lambda = 0.1$, что объясняется меньшей скоростью их деградации и относительно малым их расходом на первой стадии. Вместе с тем, в начальный период второй стадии ($T < 0.17$) большой вынос ЗВ наблюдается при $D_e = 0.2$ вследствие более выраженной неравномерности их распределения и более низкой загрязненности СДО вблизи нижней границы при $D_e = 0.05$. Интенсивная деградация ЗВ ($\lambda = 0.5$) способствует снижению их выноса в 2 - 3 раза (кривые 3, 4).

Некоторым физическим свойствам донных отложений, как и большинству естественных пористых сред, свойственен гистерезис. Так, интенсивность обменных процессов в СДО, как правило, существенно зависит от их направленности. Установлено [10], что фиксация ЗВ протекает со значительно большей (на один и даже два порядка) скоростью, чем их освобождение из прочносвязанного состояния. На первой стадии при монотонном повышении содержания ЗВ во всех формах указанный эффект не проявляется. Однако на второй стадии гистерезис, особенно при обмене между фиксированными и обменными ЗВ, уже играет важную роль. Поэтому в модели необходимо использовать другое, существенно меньшее значение кинетического коэффициента, которое обозначается α_* ($\alpha \gg \alpha_*$). Наиболее сложная динамика наблюдается в начальный период второй стадии, когда одновременно на разных участках СДО име-

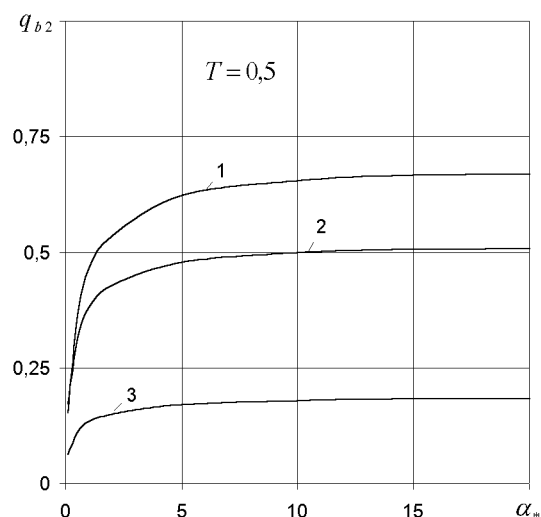


Рис. 14. Графики зависимостей $q_{b2}(\alpha_*)$:
 1 - $D_e = 0.05, \lambda = 0.1$; 2 - $D_e = 0.2, \lambda = 0.1$;
 3 - $D_e = 0.2, \lambda = 0.5$

ет место и понижение, и повышение концентраций ЗВ. При детальном учете обменной кинетики целесообразно выделять две фазы. Для первой фазы характерна различная направленность в изменении концентраций ЗВ со временем в верхней и нижней частях СДО. Как следствие этого, возникает необходимость использования коэффициентов α и α_* для верхнего и нижнего участков соответственно. Строго говоря, исходная модель нуждается в существенной коррекции. Здесь наря-

ду с применением заметно отличающихся по количественным показателям, хотя и однотипных кинетических уравнений, следует также вводить неизвестную движущуюся границу между упомянутыми участками. Однако получить точное аналитическое решение такой задачи очень сложно, если вообще возможно. Кроме того, часто достаточно оценить значимость кинетического фактора, что можно сделать путем расчета своего рода мажорант для C_2 , S_{f2} , то есть величин концентраций заведомо больших и меньших истинных величин. Очевидно, что верхняя предельная величина C_2 определяется при коэффициенте α , а нижняя – при α_* . Первая фаза заканчивается в момент достижения сечением с наибольшей концентрацией фиксированных ЗВ нижней границы СДО. Во второй фазе концентрации C_2 и S_{f2} имеют максимум при $z = -1$ и с течением времени они монотонно убывают в пределах всего СДО, что означает необходимость применения в расчетах для второй фазы только коэффициента α_* .

Для иллюстрации выделенных выше положений рассчитан ряд примеров. На рис. 11, а изображены профили концентраций C_2 , S_{f0} для первой фазы ($T = 0.1$) при исходных данных $R_f = 2$, $D_e = 0.2$, $\lambda = 0.1$, $\alpha = 100$, а также $\alpha_* = 1$ и 100 . Отдельно показан для сравнения начальный для второй стадии профиль $C_2(z, 0)$ (кривая 1), который определялся как профиль $C_1(z, t_*)$ в конце первой стадии ($t_* = 3$ или $T_* = 1$). Значительные отличия в величинах C_2 и S_{f2} при $\alpha_* = 1$ и 100 отмечались только в верхней половине СДО, достигая для S_{f2} на верхней границе 100 %. Профили концентраций, полученные при $T = 0,333$ (рис. 11, б), отличаются большей сглаженностью и, кроме того, профили C_2 имеют уже форму, характерную для второй фазы (с максимумом на нижней границе). Здесь наибольшие отличия в C_2 имеют место в выходном сечении. Фактические величины $C_2(z)$, $S_{f2}(z)$ для первой фазы находятся между предельными кривыми 4 и 6, 3 и 5 (рис. 11, а), а также 3 и 5, 1 и 4 (рис. 11, б) соответственно, так что ошибки вследствие использования на обеих стадиях единого коэффициента ($\alpha = \alpha_*$) могут оцениваться как половина расстояния между указанными кривыми. Для C_2 в данных примерах погрешность при $\alpha_* = 1$ достигала 25 %, а для S_{f2} доходила до 75 %. Для оценки влияния α_* на вынос ЗВ рассчитывался расход на нижней границе СДО q_{b2} при $R_f = 2$, $D_e = 0.2$, $\lambda = 0.1$, $\alpha = 100$ для $\alpha_* = 1, 10$ и 100 (рис. 12). Заметное расхождение в значениях q_{b2} (до 30 %) отмечалось в диапазоне α_* от 1 до 10 в период $0.75 > T > 0.25$. При $\alpha_* > 10$ погрешность в расчетах q_{b2} не превышала 5 %. Ве-

личину q_{b2} для первой фазы также можно приближенно определять как средневзвешенную кривых $q_{b2}(T)$, соответствующих реальному α_* и $\alpha_* = \alpha$.

С целью более полной оценки влияния кинетического фактора был рассчитан расход $q_{b2}(T)$ для различных сочетаний значений $R_f = 2, 10$; $D_e = 0.05, 0.2$ и $\lambda = 0.1, 0.5$ при $\alpha_* = 1$ (рис. 13). Сопоставление рис. 10 и 13 указывает на заметные различия в поведении расчетных кривых – более ранний и выраженный максимум величины $q_{b2}(T)$ для $\alpha_* = 1$ и больший суммарный вынос ЗВ при $\alpha_* = 100$. Уже результаты расчетов, приведенные на рис. 12, позволяют говорить о существенной неравномерности изменения расхода q_{b2} в зависимости от α_* в диапазоне значений $[1, 100]$. Более обоснованно можно судить о характере зависимости $q_{b2}(\alpha_*)$, основываясь на специальных расчетах указанного расхода, проведенных для $T = 0.5$, $R_f = 2$ и значений $D_e = 0.05$ и 0.2 , $\lambda = 0.1$ и 0.5 . Полученные при этом данные приведены на рис. 14 и свидетельствуют о значительном влиянии α_* на интенсивность выноса ЗВ в диапазоне $\alpha_* [0,5]$. Пренебрежение обменной кинетикой в таком случае приводило к ошибкам не менее 10 %, но уже при $\alpha_* = 10$ ошибка уменьшалась до 5–6%. При дальнейшем увеличении α_* кривые $q_{b2}(T)$ становятся более пологими, а соответствующие ошибки незначительными.

ВЫВОДЫ

Анализ современного состояния вопросов загрязнения, в том числе радиационного, донных отложений водных экосистем свидетельствует о том, что отложения часто являются основной причиной вторичного загрязнения поверхностных и подземных вод. Исходя из результатов многочисленных расчетов на базе полученного строгого решения математической задачи распространения ЗВ в СДО установлено следующее.

1. Решающее влияние на перенос ЗВ в СДО и их вынос в подстилающий грунт оказывает способность твердой фазы отложений прочно связывать ЗВ. Поэтому, особое внимание следует уделять экспериментам, направленным на определение коэффициентов распределения между растворенной, обменной и необменной формами ЗВ.

2. При высоком содержании ЗВ в твердой фазе и относительно высокой скорости их деградации возможно формирование экологически безопасных режимов в СДО, при которых практически все поступающие из водоема ЗВ остаются в отложениях вплоть до их деградации. Таким образом, при указанных режимах выносом ЗВ из СДО можно

принебрегать, а для их существования необходимо, чтобы модельные параметры удовлетворяли неравенству (2).

3. При выполнении долгосрочных прогнозов или в случае существенных изменений загрязненности водоисточника в течение расчетного периода целесообразно рассматривать распространение ЗВ в СДО как двухстадийный процесс. Кроме того, вследствие особенностей динамики ЗВ в начальные периоды стадий имеет смысл условно разделить каждую из них на две фазы. В первой фазе первой стадии внутри СДО формируется зона существенного загрязнения, а вынос ЗВ в подстилающий грунт практически отсутствует. Во второй фазе из СДО выносятся значительное количество ЗВ. В первой фазе второй стадии на разных участках СДО наблюдается одновременное повышение и снижение уровня загрязненности и вынос ЗВ в конце ее достигает максимума. Во второй фазе, начиная с верхней части, происходит окончательное очищение СДО.

4. Кинетика обмена между фиксированной и растворенной (обменной) формами ЗВ может иметь важное значение для формирования потока ЗВ в СДО на обеих стадиях. На первой стадии кинетический фактор имеет негативное значение, сдерживая прочное закрепление ЗВ в твердой фазе СДО и тем самым по существу повышая их мобильность. На второй стадии указанный фактор уже играет положительную роль, препятствуя быстрому освобождению ЗВ из фиксированного состояния. Пределы изменения безразмерного кинетического коэффициента α , в которых обменную кинетику следует учитывать, составляют: для первой фазы – $\alpha < 50$, для второй – $\alpha < 10$.

5. Проведенные расчеты для рассмотренных диапазонов исходных параметров позволяют сделать следующие оценки:

- первичное накопление ЗВ происходит в верхней части СДО при $T < 0.1 - 0.2$;

- интенсивное перераспределение ЗВ в СДО при выраженной неравномерности их распределения имеет место до $T = 0.5$;

- существенный вынос ЗВ в подстилающий грунт начинается при $T = 0.2 - 0.3$;

- значительное загрязнение (первая стадия) или очищение (вторая стадия) нижней части донных отложений наблюдается при $T > 0.5$.

1. Поляков В. Л. Распространение загрязнений в донных отложениях. 1. Теоретическое решение // Прикладна гідромеханіка.– 2001.– 3 (75), N 1.– С. 52–59.
2. Барбер С. А. Биологическая доступность питательных веществ в почве. Механистический подход.– М.: Агропромиздат, 1988.– 376 с.
3. Методы прогноза солевого режима грунтов и грунтовых вод / Под ред. Н. Н. Веригина.– М.: Колос, 1979.– 336 с.
4. Най П. Х. Движение растворов в системе почва-растение.– М.: Колос, 1980.– 368 с.
5. Доильниціна В. В., Дорожкін А. І., Олькова Г. М., Федорова А. Л. Анализ миграции остаточных загрязняющих веществ при подземном выщелачивании полезных ископаемых // Водн. ресурс.– 1994.– 21, N 1.– С. 25–35.
6. Иванов Ю. А., Кашпаров В. Л. Мобильность радионуклидов выброса ЧАЭС в почвах // Докл. АН Украины.– 1994.– N 1.– С. 105–109.
7. Казаков С. В., Марченко В. І., Сухоручкін А. К. ^{90}Sr в зоні відчуження і зоні безумовного відселення // Чернобильінтерінформ.– 1998.– N 12.– С. 36–41.
8. Kipp K. L., Stollenwerk K. G., Grove D. B. Groundwater transport of strontium 90 in a glacial outwash environment // Water Resour. Res.– 1986.– 22, N 4.– P. 519–530.
9. Modeling and study of the mechanisms of the transfer of radioactive material from terrestrial ecosystems to and in water bodies around Chernobyl / Experimental collaboration project N 3. Final report. U. Sansone, O. Voitsekhovitch.– Brussels: European commission, 1996.– 184 p.
10. Nitrogen in agricultural soils. Agronomy, V. 22 / F. J. Stevenson.– Madison (Wise): Amer. Soc. Agron., 1982.– 940 p.