

## 2. ПРОБЛЕМЫ ДОБЫЧИ, ПЕРЕРАБОТКИ ПРИРОДНЫХ РЕСУРСОВ И ЗАЩИТЫ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

УДК 519.6:544

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ МИГРАЦИИ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ В ПОДЗЕМНЫХ ВОДАХ

У.Д. Мишина, Е.В. Борисова

© Мишина У.Д., Борисова Е.В., 2024

*Аннотация.* На основании анализа информационных источников выбрана модель процессов миграции веществ (система дифференциальных уравнений). Для получения численного решения построена явная разностная схема. Проведены сравнительные расчеты проникновения глубины загрязняющих веществ в дисперсные системы. Представлены результаты исследования миграции загрязняющих веществ в подземных водах. Подчеркнуто, что приведенные результаты показали актуальность использования имитационной методики построения инструментов при контроле состояния экологически уязвимых объектов.

*Ключевые слова:* моделирование, сорбционные процессы, вычислительный эксперимент, экологическое состояние.

Загрязнение подземных вод химическими веществами и продуктами деградации является одной из важных экологических проблем. Приведем информацию из государственного доклада о состоянии и об охране окружающей среды в Тверской области [1]. В 2022 году было исследовано 2 549 проб почвы, из них 1 907 – в селитебных зонах (т. е. земельные участки в городах и сельских поселениях, предназначенные для размещения жилого фонда, общественных зданий и сооружений), в том числе 851 проба – с территорий детских образовательных учреждений. Согласно полученным данным, доля проб, чьи значения отличались от нормативных, увеличилась до 4,6 % (в 2021 году составляла 1,4 %, в 2020 году – 2,0 %). В селитебной зоне удельный вес проб почвы, не соответствующих гигиеническим нормативам, был равен 1,5 % (в 2021 году – 1,1 %, в 2020 году – 0,4 %). В таблице, на основании данных доклада [1], приведены доли проб почв по Тверскому региону, которые свидетельствуют о значительном загрязнении.

Показатели загрязнения почвы в селитебной зоне Тверской области, %

Показатели	Год		
	2020	2021	2022
Санитарно-химические	0,4	1,1	<b>1,5</b>
Количество тяжелых металлов	0,25	3,4	1,4
Содержание свинца	0,25	2,2	0,6
Микробиологические	7,4	5,5	<b>18,9</b>
Паразитологические	0,6	0,6	0,5

Можно сделать вывод, что наблюдается снижение содержания в почвах свинца и тяжелых металлов. Возможно, это связано с резким сокращением применения минеральных, известковых удобрений. Антропогенное влияние на поступление тяжелых металлов в почву также снизилось в связи с уменьшением количества предприятий, выбрасывающих в атмосферу загрязняющие вещества. Одновременно возросли санитарно-химические и микробиологические показатели из-за протекания разнообразных антропогенных и техногенных процессов. Все вместе существенно влияет на почвенные слои городских агломераций, где происходит аккумуляция различных органических и неорганических веществ, биологически активных компонентов.

Примером может служить Тверецкий водозабор как источник водоснабжения (расположен на северной окраине г. Твери и вдоль правого берега р. Тверцы, в районе ТЭЦ-3). На его территории выявлены десять локальных участков с повышенным радиационным фоном, который появился вследствие экологически несбалансированной производственной эксплуатации водозабора муниципальным унитарным предприятием «Тверь Водоканал» [2].

Описанный пример подтверждает актуальность исследований, посвященных оценке негативного влияния деятельности промышленных и сельскохозяйственных объектов на компоненты окружающей среды. Особенно важным является изучение миграции загрязняющих веществ в водоносном слое и факторов, способствующих вторичному загрязнению природной среды. Для оценки текущего состояния и прогноза возможного загрязнения подземных вод широко используются методы математического и имитационного моделирования.

Дисперсными в рамках геологии подземных вод называют системы, состоящие из малых частиц, распределенных в жидкой, твердой или газообразной среде. Процесс передвижения загрязняющих веществ в водных дисперсных системах определяется движением влаги в поровом пространстве, гидродинамической дисперсией, молекулярной диффузией, процессами сорбции, химическими и биохимическими реакциями, превращениями по последовательным и параллельным реакциям, температурными градиентами и др. Влияние каждого из перечисленных

явлений на распространение вредных веществ зависит от конкретных географических условий протекания процесса, природы ингредиента и диапазона изменения его концентрации в пласте, свойств почв. В математических моделях, как правило, изучение процессов переноса ингредиентов в почве ограничивается учетом основных факторов, к которым относятся конвективный перенос, диффузия и сорбционные процессы.

Перенос сорбирующих компонентов водорастворимых веществ в гомогенной грунтовой водонасыщенной толще описывается дифференциальными уравнениями, выражающими материальный баланс рассматриваемого вещества в части указанной толщи с учетом сорбционного процесса [3]:

$$n_a \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v(t) \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial N}{\partial t};$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \beta \left( C - \frac{NK}{N_{\text{пр}} - N} \right),$$

где  $n_a$  – активная пористость грунта;  $C(x, t)$  – концентрация ингредиента в поровом растворе в момент времени  $t$  в сечении  $x$ , г/м<sup>3</sup>;  $D = D_0 + \lambda(v)$  – коэффициент фильтрационной диффузии, м<sup>2</sup>/сутки ( $D_0$  – коэффициент молекулярной диффузии, м<sup>2</sup>/сутки;  $\lambda$  – коэффициент дисперсии, м;  $v$  – скорость фильтрации, м/сутки);  $N$  – концентрация ингредиента, сорбированного единицей объема грунта, г/м<sup>3</sup>;  $\beta$  – коэффициент скорости сорбционного обмена, 1/сутки;  $t$  – время, суток;  $K$  – константа половинного значения, мг/дм<sup>3</sup>;  $N_{\text{пр}}$  – предельная величина сорбции грунтом загрязняющего вещества, мг/дм<sup>3</sup>.

Поровым раствором называют подземные воды, находящиеся в порах почв и донных осадков.

Решение дифференциальных уравнений будем находить методом конечных разностей [4]. Используя явную разностную схему, конечно-разностный аналог уравнений математической модели запишем в виде

$$n_a \frac{C_i^{k+1} - C_i^k}{\Delta t} = D \frac{C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k}{\Delta x^2} - V \frac{C_{i+1}^k - C_{i-1}^k}{2\Delta x} - \beta \left( C_i^k - \frac{N_i^k K}{N_{\text{пр}} - N_i^k} \right);$$

$$\frac{N_i^{k+1} - N_i^k}{\Delta t} = \beta \left( C_i^k - \frac{N_i^k K}{N_{\text{пр}} - N_i^k} \right),$$

где  $C_i^{k+1}$  – концентрация ингредиента в рассматриваемом узле сетки при увеличении времени на один шаг  $\Delta t$ ;  $C_i^k$  – концентрация ингредиента в данный момент времени в рассматриваемом узле разностной сетки по глубине;  $\Delta t$  – шаг разностной сетки по времени, определяемый исходя из условий устойчивости явной разностной схемы;  $C_{i+1}^k$  – концентрация ингредиента в данный момент времени в последующем узле сетки по глубине;  $C_{i-1}^k$  – концентрация ингредиента в данный момент времени в

предыдущем узле разностной сетки по глубине;  $N_i^k$  – концентрация ингредиента, сорбированного единицей объема грунта в данный момент времени в рассматриваемом узле разностной сетки по глубине;  $N_i^{k+1}$  – концентрация ингредиента, сорбированного единицей объема грунта в рассматриваемом узле сетки при увеличении времени на один шаг  $\Delta t$ .

При определении концентрации ингредиента в поровом растворе и поглощающем комплексе грунта при изменении времени на величину  $\Delta t$  во всех узлах разностной сетки по глубине (за исключением  $C_i^{k+1}$  в граничных узлах) соответствующие расчетные формулы приобретают вид:

$$C_i^k + \frac{\Delta t}{n_a} \left\{ D \frac{C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k}{\Delta x^2} - V \frac{C_{i+1}^k - C_{i-1}^k}{2\Delta x} - \beta \left( C_i^k - \frac{N_i^k K}{N_{np} - N_i^k} \right) \right\} \overline{(i = 1, N - 1)};$$

$$N_i^{k+1} = N_i^k + \beta \Delta t \left( C_i^k - \frac{N_i^k K}{N_{np} - N_i^k} \right) \overline{(i = 0, N)}.$$

Граничные значения вычисляются из разностных граничных условий. Начальное условие (т. е. присутствующее в первый период времени) запишем в виде  $t = 0: C(x, 0) = C_0(x)$ .

На верхней границе граничные условия выглядят следующим образом:  $t > 0; x = 0: [C(0, t) - C_{п}]V(t) = D[\partial C(0, t)/\partial x]$ , где  $C_{п}$  – концентрация ингредиента в промывном растворе, г/м<sup>3</sup>;  $C_0$  – концентрация ингредиента в поровом растворе, г/м<sup>3</sup>, т. е. как условие третьего рода – уравнение баланса вещества на поверхности почвы, на нижней границе – в виде

$$t > 0; x = L: \frac{\partial C(L, t)}{\partial x} = 0$$

(условие второго рода – отсутствие возврата загрязняющего вещества).

За нижнюю границу  $x = L$  может быть принята кровля дренирующего горизонта, подстилающего покровный пласт, или свободная поверхность горизонтального подземного потока. На рис. 1 представлена схема миграции загрязняющих веществ [3].

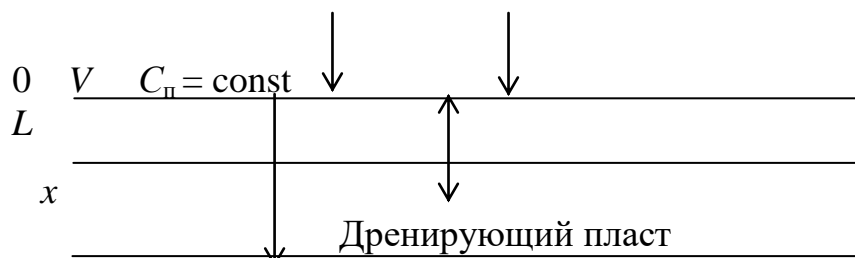


Рис. 1. Расчетная схема миграции загрязняющих веществ (цифра 0 обозначает начало отсчета, т. е. место постоянного источника загрязнения, расположенного на поверхности земли)

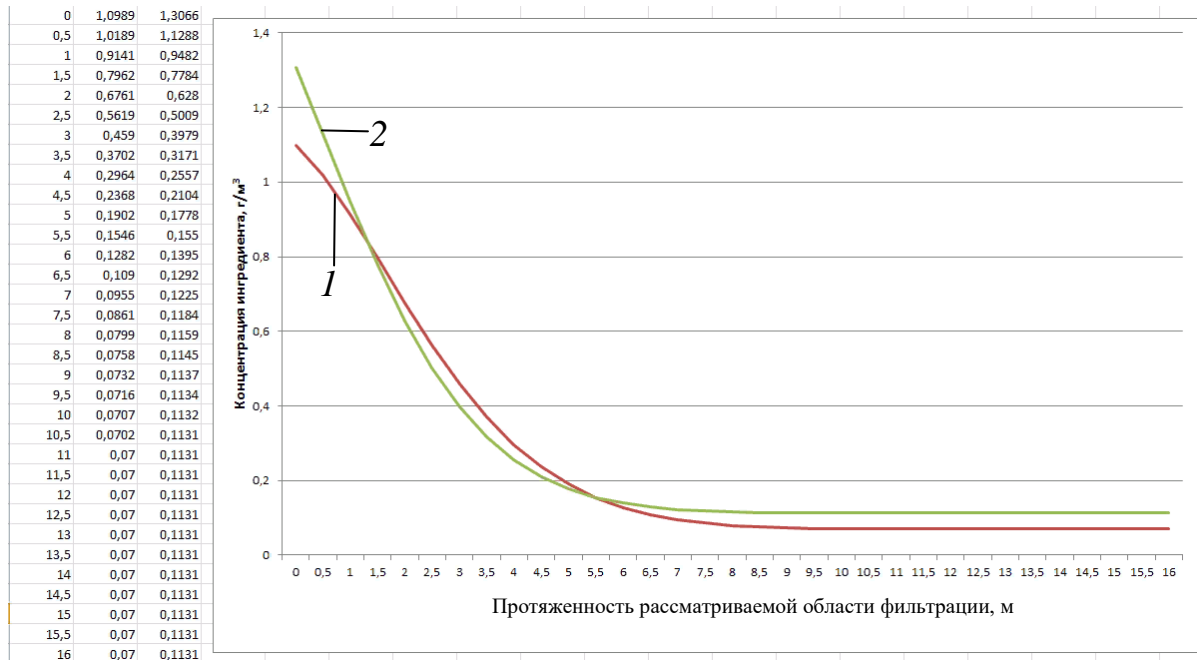
Численный эксперимент (имитационное моделирование) проведен по построенным разностным схемам с использованием пакета прикладных программ.

Первым этапом имитационного моделирования является подготовка исходных данных. К таким данным относятся путь фильтрации (протяженность рассматриваемой области фильтрации); коэффициент молекулярной диффузии; параметр гидродисперсии; скорость фильтрации; коэффициент пропорциональности; активная пористость; коэффициент изотермы Ленгмюра; концентрация ингредиента в поровом растворе; максимальная емкость поглощения ингредиента; концентрация ингредиента в сточной воде; длительность фильтрации; число слоев, кратное пути фильтрации; шаг сетки по времени. Коэффициент молекулярной диффузии обуславливается температурой, влажностью и реакцией среды (рН). Скорость фильтрации изменяется в зависимости от механических свойств грунта (например, у песка она будет больше, чем у глины). Постоянной величиной является коэффициент изотермы Ленгмюра.

В качестве модельного объекта исследования выбрана городская территория, прилегающая к аэродрому Калининского района Тверской области. В окрестностях объекта произведен отбор проб грунта. Основные загрязняющие вещества на этой территории – нефтепродукты, которые периодически изливаются в почвы. Главным источником загрязнения выступают склады горюче-смазочных материалов. В ряде скважин обнаружен керосин в чистом виде. Для проведения вычислительного эксперимента, посвященного определению глубины миграции загрязняющих веществ, найдем значения основных параметров. Результаты этого эксперимента (с шагом  $h = 0,5$  м), в ходе которого изучалась миграция сорбируемых ингредиентов в подземных водах выбранного объекта, и их графическое изображение представлены на рис. 2.

Все значения приняты как средние, подходящие к данной природной зоне, в соответствии с геологическими признаками. Протяженность рассматриваемой области фильтрации равна 16 м; коэффициент молекулярной диффузии составляет 0,000 07; параметр гидродисперсии – 0,026; активная пористость – 0,33; коэффициент изотермы Ленгмюра – 5,5; максимальная емкость поглощения – 9,0; концентрация ингредиента в поровом растворе и сточной воде равна 0,07 и 1,1 соответственно; длительность фильтрации с данной концентрацией ингредиента – 6,5 суток. Анализ полученных результатов и кривых, представленных на рис. 2а, позволил сделать вывод, что при длительности фильтрации 6,5 суток передний фронт загрязнений вод проник на глубину более 11,0 м в поровом растворе и на 10,5 м в грунте. Концентрация ингредиента в поровом растворе  $c = 0,07$  г/м<sup>3</sup>, что соответствует контрольному значению,  $c = 0,113$  г/м<sup>3</sup> – концентрация в поглощающем комплексе грунта при времени  $t = 0$  суток.

*a*



*б*

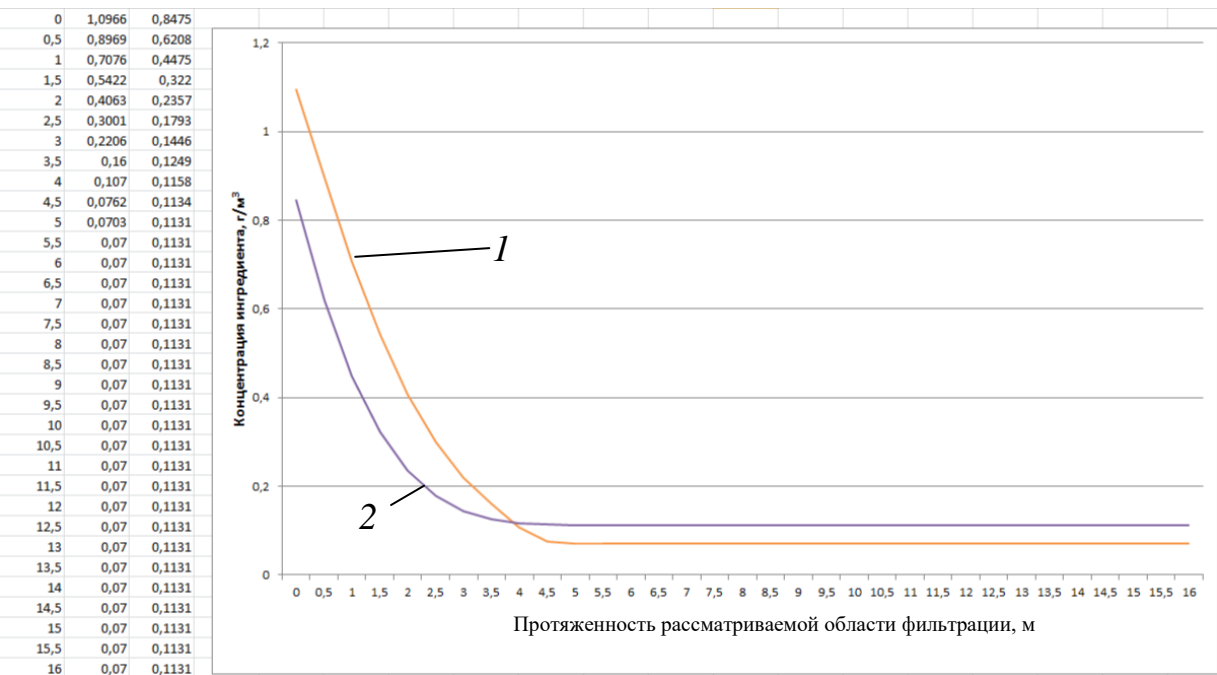


Рис. 2. Эпюры концентрации ингредиента при модельном времени:  
*a* – 6,5 суток; *б* – 3,25 суток; 1 – в поровом растворе;  
2 – в поглощающем комплексе грунта

Анализ значений и кривых с рис. 2б свидетельствует о том, что при длительности фильтрации 3,25 суток (в 2 раза меньше исходного) передний фронт загрязнений вод проник на глубину более 5,5 м в поровом растворе и на 5,0 м в грунте. Контрольные значения имели те же значения, что и в эксперименте при длительности фильтрации в 2 раза больше.

Таким образом, высока вероятность попадания загрязняющих веществ в подземные воды. Основным ориентиром является уровень грунтовых вод. Глубина залегания грунтовых вод на территории вблизи аэродрома равняется 10 м. Из этого следует, что передний фронт загрязнения достиг верхней границы подземных вод. Данный вывод относится и к поровому раствору, и к грунтам. Дальнейшее загрязнение подземных вод эксплуатируемого водоносного горизонта нефтепродуктами повлечет за собой серьезные последствия для водоснабжения расположенных рядом сельских поселений.

Изучение объекта согласно построенной разностной модели дает возможность получить информацию о текущем экологическом состоянии территории. Результаты эксперимента подтвердили опасную миграцию загрязняющих веществ на территории аэродрома из почвы в подземные воды. Выполненное моделирование показало актуальность использования избранной методики для построения инструментов с целью контроля состояния экологически уязвимых объектов.

Можно рекомендовать следующие мероприятия, реализация которых поспособствует улучшению и сохранению устойчивого экологического состояния территорий, расположенных вблизи потенциально опасных объектов:

1. Усиление контроля над соблюдением нормативов качества выбрасываемых загрязняющих веществ в почву.

2. Корректная оценка геолого-морфологической устойчивости рельефа в проектах природообустройства (например, проведение предварительных исследований, посвященных определению сорбционных процессов в грунте, проверка деформационных свойств, выяснение пораженности территории экзогенными геологическими процессами).

3. Рекультивация почв и улучшение качества прилегающих водоносных горизонтов (например, устройство гидротехнических и восстановительных систем с последующей биологической очисткой почвы).

4. Работы по реабилитации установок и загрязненных территорий на объектах (таких как фильтры Тверецкого водозабора), в ходе функционирования которых происходит накопление природных радионуклидов.

5. Изучение возможных путей миграции отдельных опасных компонентов (оно позволит разработать оптимальные способы контроля и прогноза экологического состояния подземных вод).

### **Библиографический список**

1. Государственный доклад о состоянии и об охране окружающей среды в Тверской области в 2022 году [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://минприроды.тверскаяобласть.рф/deyatelnost-iogv/napravlen>

iya/okhrana-okruzhayushchey-sredy/Госдоклад%20за%202022\_год.pdf (дата обращения: 05.03.2024).

2. Цыганов А.А. Оценка состояния окружающей среды города Твери // Вестник ТвГУ. Серия «География и геоэкология». 2019. № 2 (26). С. 56–77. URL: <https://core.ac.uk/download/228161899.pdf> (дата обращения: 06.03.2024).

3. Математическое моделирование природных экосистем: учебное пособие / В.И. Косов, Д.Ф. Шульгин, В.Е. Клыков, В.Н. Иванов. Тверь: ТГТУ, 1998. 255 с.

4. Самарский А.А. Теория разностных схем: учебное пособие для вузов. М.: Наука, 1989. 614 с.

## MODELING PROCESSES OF MIGRATION OF POLLUTANTS IN GROUNDWATER

U.D. Mishina, E.V. Borisova

***Abstract.** Based on the analysis of information sources, a model of migration processes of substances (a system of differential equations) was selected. To obtain a numerical solution, an explicit difference scheme is constructed. Comparative calculations of the penetration of the depth of pollutants into dispersed systems have been carried out. The results of a study of the migration of pollutants in groundwater are presented. It is emphasized that the above results have shown the relevance of using the simulation methodology for constructing tools for monitoring the condition of environmentally vulnerable objects.*

***Keywords:** modeling, sorption processes, computational experiment, ecological state.*

Об авторах:

МИШИНА Ульяна Денисовна – студентка, ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет», Тверь. E-mail: um.500@mail.ru

БОРИСОВА Елена Владимировна – доктор педагогических наук, профессор кафедры высшей математики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет», Тверь. E-mail: elenborisov@mail.ru

About the authors:

MISHINA Ulyana Denisovna – Student, Tver State Technical University, Tver. E-mail: um.500@mail.ru

BORISOVA Elena Vladimirovna – Doctor of Pedagogical Sciences, Professor of the Department of Higher Mathematics, Tver State Technical University, Tver. E-mail: elenborisov@mail.ru