Моделирание на замърсяването на водоносния пласт в резултат на различната минерализация на замърсените и пресните подземни води (на примера на долината на Вълче дере, след хвостохранилище „Елешница“)

Цветан Коцев¹, Сава Колев², Владимир Христов²

¹Sofia University “St. Kliment Ohridski”. Faculty of Mathematics and Informatics;
e-mail: tkotsev@fmi.uni-sofia.bg

²Geological Institute, Bulgarian Academy of Sciences, 1113 Sofia, Bulgaria;
e-mail: sava.koleff@abv.bg; vhh@geology.bas.bg

Kotsev, T., S. Kolev, V. Hristov. 2018. Modeling of groundwater flow and transport of pollutants caused by a difference in groundwater densities (on the example of the valley of Vulche dere creek, downstream of Eleshnitsa tailings pond). *Engineering Geology and Hydrogeology*, 32, 3-12.

Резюме. Направен е опит за числено моделиране на транспорта на разтворени вещества, причинен от разликата в плътностите на подземните води. Предполага се, че първоначално на повърхността на водоносния хоризонт съществува сектор с висока концентрация на замърсител (сулфати), докато навсякъде другаде в него тя е нулева. В резултат на това водата в близост до повърхността има по-висока плътност. Благодарение на тази разлика възниква поток, породен от разликата в плътностите, и започва бавно възходящо и низходящо движение на водата. Замърсяването, локализирано първоначално на повърхността, се придвижва надолу и след определен период от време достига до долнището на водоносния хоризонт. Уравнението на Дарси за нестабилизирана филтрация и уравнението на масопреноса в пореста среда са решени едновременно в 2D пространството чрез метода на крайните елементи. Геометрията на използваната при изчисленията площ следва приблизително реалния контур на водоносния хоризонт. Целта на изследването е да се прогнозира необходимото време за дадено количество замърсител, постъпващ от повърхностните води в кватернерния водоносен хоризонт, да достигане до долния неогенски водоносен хоризонт. Показани са графики, представящи изолиниите на потока и разпространението на концентрациите за различни времеви периоди.

Ключови думи: числено моделиране, замърсяване на подземни води, хвостохранилище, Елешница.

Abstract. An attempt is made to model numerically the transport of dissolved substances caused by a difference in groundwater densities. It is supposed that initially at the surface of the aquifer a sector exists with high concentration of a pollutant (sulphates) while it is zero elsewhere in it. As a result, there is a higher water density near the surface. Due to this difference, a density driven flow arises and starts slow upwelling and downwelling movement of the water. The pollution located initially at the surface moves down and after a period of time reaches the bottom of the aquifer. Unsteady Darcy equation for creeping subsurface flow and mass transfer equation in a porous media were solved simultaneously in 2D area by the finite element method. The geometry of the area used in the

calculations follows approximately the real contour of the aquifer. The aim of this study is to predict time needed for given amount of pollution coming from surface water into Quaternary aquifer to reach the lower Neogene aquifer. Plots representing the streamlines of the flow and concentration spreading for different times are shown.

Keywords: numerical modeling, groundwater pollution, tailings pond, Eleshnitsa.

Въведение

Във водоносните хоризонти промяна в плътността на флуида може да доведе до неговото движение, дори той да е бил първоначално в неподвижно състояние. Плътността на подземните води би могла да се промени поради появата на натурални соли, промяна в температурата или мигриращи замърсители. За целите на настоящото изследване е избран районът на хвостохранилище „Елешница“, разположено в долината на Вълче дере, ляв приток на р. Места. Дренажните води от хвостохранилището се третират в пречиствателна станция, разположена в подножието на стената, и в последствие се заустват в повърхностните води на дерето. Изследванията, проведени през 2012 г. (Kolev et al., 2014), показват отчетливото влияние на водите от хвостохранилището върху подземните води на кватернерния водоносен хоризонт в долината на Вълче дере, където са регистрирани повишени концентрации на нитрати и сулфати. В отдолулежащия неогенски водоносен хоризонт не са отчетени повишения в концентрациите на посочените химични компоненти. Последвалите изследвания доказаха наличието на ясно изразена хидравлична връзка както между повърхностните и подземните води, така и между двата водоносни хоризонта (Kolev, 2016). С цел да бъде изяснена дебелината на двата водоносни хоризонта, през м. април 2017 г. са проведени геофизични проучвания (фиг. 1 и фиг. 2).

Фиг. 1. Обзорна карта с геофизични профили
Fig. 1. Overview map with geophysical profiles

Фиг. 2. Геофизичен профил 3: А) Чакъли и пясъци – алувиални отложения на Вълче дере, В) Глини с отделни чакъли – алувиални отложения на р. Места, С) Пясъчници – неогенски седименти
 Fig. 2. Geophysical profile 3: A) Gravels and sands – alluvial deposits of Vulche dere creek, B) Clays with individual gravels – alluvial deposits of Mesta River, C) Sandstones – Neogene sediments

Целта на настоящото изследване е да се пресметне приблизително времето, за което замърсяването, постъпващо от Вълче дере, ще достигне долнището на кватернерния водоносен хоризонт и ще проникне в отдолулежащия неогенски водоносен хоризонт и каква ще е концентрацията му там.

Постановка на задачата

Разгледано е разпространението на сулфатите, пренасяни посредством движението на подземните води, в разрез Профил 3, и по-конкретно в област А (фиг. 2). Дебитът на изпусканияте от хвостохранилището замърсени със сулфати води е променлив във времето, но средногодишно е около 5-6 l/s, със средна концентрация 613,4 mg/l, като с течение на времето този пренос на замърсител повишава плътността на подземните води близо до повърхността.

Разликата в концентрацията на замърсителя, постъпил от повърхностните води в горнището и долнището на кватернерния водоносен хоризонт и промяната в плътността на водата, поражда движение на флуида в субвертикална посока. Водите, близки до повърхността, имащи по-висока концентрация на замърсител, се движат надолу, а другите, от долнището на кватернерния водоносен хоризонт, се издигат нагоре в субвертикална посока. Това е т.нар. ефект на Елдер (Elder, 1967), наблюдаван лабораторно за движение, породено от разлика в температурите на разглеждания флуид и който по-късно е обобщен и за движение, дължащо се на различна концентрация на дадено вещество в него (Voss, Souza, 1987; Holzbecher, 1998). Движението на подземните води е бавно, под действието на гравитацията и замърсителят се пренася предимно по пътя на адвекцията и молекулярната дифузия. Разглеждаме случая, когато в даден начален момент на повърхността на изучаваната област има силно завишена концентрация на замърсител, а тази на долнището на водоносния хоризонт се приема за нулева. Предполага се още, че средата е хомогенна и изотропна с порестост ϵ и че първоначално водата се намира в неподвижно състояние, но когато концентрацията на повърхността се увеличи значително, възниква гореописаното движение.

Математичен модел и метод на решение

През последните 40-50 години моделиране на филтрационното поле и преноса на вещества се извършва с различни софтуерни продукти (Modflow, MT3D-MS, FEFLOW, HYDRUS и т.н.) и е предмет на редица публикации в България (Antonov, 2017; Antonov et al., 2012; Benderev et al., 2017; Galabov, Penchev, 1986; Galabov, Stoyanov, 2001; Gerginov, 2018; Gerginov et al., 2017; Stoyanov, 2003, 2012 и др.). Разглежда се двумерната криволинейна област, показана на фиг. 3.

Фиг. 3. Геометрия на разглежданата област с гранични и начални условия. Повишена концентрация на сулфати има само в ограничен участък на горната граница на областта

Fig. 3. Geometry of the studied area with boundary and initial conditions. An increased sulphate concentration exists only in a limited region at the upper limit of the area

Ширината на кватернерния водоносен хоризонт в разглеждания профил е 240 m, а най-голямата дълбочина е 19 m.

Разпространението на разтвореното вещество се моделира чрез съвместното изучаване на два физически процеса – бавното течение на флуида (в случая вода) и преноса на разтворено вещество посредством адвекция и молекулярна дифузия. Движението на подземните води под действието на хидростатичния напор се описва от нестационарното уравнение на движение, базирано на закона на Дарси (Andrizhievskiy, 2014):

$$(1) \quad \frac{\partial \varepsilon \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = 0, \quad \text{където}$$

$$\mathbf{v} = \frac{k}{\mu} (\nabla p + \rho g \nabla H)$$

е векторът на скоростта на Дарси (скорост на просмукване), зависеща от коефициента на пропускливост (коефициент на проникваемост) на слоя k [m^2] или [mD], порестостта ε , динамичния вискозитет на водата μ [$\text{Pa}\cdot\text{s}$], плътността на водата ρ [kg/m^3], земното ускорение g [m/s^2] и градиента на напора ∇H .

Граничните условия за уравнението на движение са:

- няма протичане през границите на областта.

$$(2) \quad n \cdot \rho \mathbf{v} = 0, \quad \text{където } n \text{ е нормалата към границата}$$

- на повърхността налягането е равно на атмосферното

$$(3) \quad p = p_0.$$

Начално условие:

$$(4) \quad p(x, y, 0) = \rho_0 g H, \quad t = 0.$$

Уравнението за масопренос на разтворената субстанция се описва с уравнението (5):

$$(5) \quad \frac{\partial c \theta_s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c - \nabla \cdot \theta_s \tau D_L \nabla c = 0,$$

където c е концентрацията на сулфатите [mol/m^3], τD_L – скоростта на молекулярна дифузия [m^2/s], θ_s – обемната фракция на флуида (безразмерна стойност).

Граничните условия са:

- липса на масопренос през границите на областта

$$(6) \quad n \cdot [c \mathbf{v} - \theta_s \tau D_L \nabla c] = 0$$

- концентрацията на замърсителя на част от повърхността е фиксирана

$$(7) \quad c = c_s$$

Начално условие: концентрацията на замърсителя е нула навсякъде с изключение на ограничена част от повърхността.

$$(8) \quad c(x, y, 0) = 0, \quad t = 0.$$

Според (4) плътността на водата зависи линейно от концентрацията на замърсителя c (mol/m^3) и се изразява с формулата:

$$(9) \quad \rho = \rho_0 + \beta c = \rho_0 + c(\rho_s - \rho_0)/(c_s - c_0),$$

където c_0 и c_s са нормираните концентрации на сулфатите в чистата и солената вода, а ρ_0 и ρ_s - съответните плътности в чистата и солената вода.

Уравненията на движение на подземните води (1) и уравнението за пренос на разтворена субстанция (5) със съответните гранични и начални условия са решени числено с пакета COMSOL (<http://www.comsol.com>) по метода на крайните елементи. За целта разглежданата двумерна област се дискретизира чрез мрежа от крайни елементи – в случая са използвани триъгълни такива, които най-добре покриват разглежданата област и криволинейните граници (фиг. 4). Мрежата от крайни елементи може да се зададе да бъде по-гъста, там, където градиентите на течението са по-големи и обратно – там, където движението е слабо, мрежата да е по-рядка. Софтуерът генерира система от уравнения, която трябва да бъде решена, за да се достигне до решение на задачата. Размерът на матрицата на тази система уравнения дава т.нар. degrees of freedom (DOF) или степени на свобода. Броят на степените на свобода е функция на броя на елементите, начина на дискретизация и броя на променливите, относно които решаваме задачата. В разглеждания случай DOF е от порядъка на 76150. За численото решаване на системата уравнения се използват директни и итеративни

Фиг. 4. Апроксимация на областта с триъгълни крайни елементи

Fig. 4. Approximation of the area with triangular finite elements

начини, като в случая е възприет итеративният начин, даващ добра сходимост и кратко време за пресмятане. Итерационният процес в двумерния случай е бързо сходящ с грешка от порядъка на 10^{-6} .

Резултати

Числените симулации са направени за следните характеристики на разглежданата област:

- порестост на слоя $\varepsilon = 0,384$. Това е безразмерен коефициент, приемащ стойности между 0 и 1. Разглежданата тук област има сравнително добра порестост, която улеснява движението на подземните води вследствие промяната в плътността им.
- дебит на постъпващите от хвостохранилището води – $5,50 \text{ l/s}$ с концентрацията на сулфати (SO_4) – $613,4 \text{ mg/l}$.
- коефициент на пропускливост на пласта $\kappa = 500 \text{ mD}$ (мили дарси)
- нулева начална концентрация на замърсителя в областта $c_0 = 0$
- плътност на водата непосредствено под повърхността на замърсения участък от границата $\rho_s = 1200 \text{ kg/m}^3$ и плътност на чистата вода $\rho_0 = 1000 \text{ kg/m}^3$
- ширина на профила, измерен по повърхността на областта $L = 240 \text{ m}$, максимална дълбочина – $H_{\max} = 19 \text{ m}$.
- скорост на молекулярна дифузия $\tau D_L = 3,56 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$.

В началния момент водата е без наличие на замърсители, в случая сулфати. Постепенно концентрацията около замърсената повърхност се променя главно по пътя на дифузията, като същевременно се създава градиент на плътността на водата. Движението на водата започва на границата на зоните с повишена концентрация, където и градиентите са най-големи. Картината за различни периоди от време за участък на замърсяване с обща ширина 15 m от двете страни на реката, минаваща през този профил, е дадена на фиг. 5. Концентрацията на сулфатите се разпространява почти равномерно и симетрично относно средата на участъка от повърхността с повишена концентрация. Поради малката дълбочина на областта замърсяването сравнително бързо достига до долнището на басейна. От числените експерименти се установи, че времето за това е около година и половина.

Изолините на скоростта и фронтът на разпространение на концентрацията на замърсителя след 1 месец, 6 и 12 месеца, както и стационарното състояние, са показани на фиг. 6.

Механизмът на разпространение на замърсителя е по-различен, когато дълбочината на басейна е голяма, например около 100 m и повече. За целите на моделирането се приема, че областта има трапецовидна форма, като широчината по повърхността е 200 m , а дълбочината – 100 m . Тогава промяната в концентрацията на границата чиста вода и наситена със соли вода води до образуване първоначално на т. нар. „пръсти“, които се спускат към дъното и постепенно обхващат цялата област (фиг. 7).

В началните етапи от развитието на течението между т. нар. „пръсти“ възникват малки клетки на конвекция, които с времето се разрастват и обединяват. С намаляване на ширината на замърсената повърхност се променя и начинът на разпространение на разтвореното вещество. От направените числени експерименти при тази дълбочина на областта се вижда, че при широчина на замърсената повърхност по-малка от една четвърт от широчината на целия басейн и порестост $0,1$ „пръсти“ на концентрацията не се образуват.

Възникването на тези „пръсти“ зависи и от порестостта на слоя. Колкото тя е по-малка, толкова по-рано възникват те (фиг. 8).

Фиг. 5. Разпространение на концентрацията за различни периоди от време
Fig. 5. Concentrations distribution for different periods of time

Фиг. 6. Изолинии на скоростта и фронтът на концентрацията на замърсителя за време: а) 1 месец, б) 6 месеца, в) 12 месеца, г) стационарно състояние
Fig. 6. Isolines of pollutant velocity and concentration front over time: a) 1 month, b) 6 months, c) 12 months, d) steady state

Фиг. 7. Изолинии на скоростта и концентрацията при дълбочина на басейна 100 m, $\varepsilon = 0,1$ и широчина на замърсения участък 130 m за периоди от 1, 3, 5, 10 и 20 г.

Fig. 7. Isolines of velocity and concentration at depth of the basin 100 m, $\varepsilon = 0,1$ and width of the contaminated area 130 m for periods of 1, 3, 5, 10 and 20 years

Фиг. 8. Изолинии на скоростта и концентрацията след 1 год. при дълбочина на басейна 100 m: а) $\varepsilon = 0,1$, б) $\varepsilon = 0,384$

Fig. 8. Isolines of velocity and concentration after 1 year at a basin depth of 100 m:

а) $\varepsilon = 0,1$, б) $\varepsilon = 0,384$

При малка дълбочина на басейна от порядъка на 20 m, какъвто е случаят с профила под хвостохранилището, дори замърсената повърхност да заема цялата ширина, изолиниите на концентрацията се придвижват към дъното на областта почти равномерно и без образуване на издатини, както в случая по-горе.

Заклучение

Възходящото и низходящо движение на подземни води, възникващо под действие на разликата в концентрацията, известно като ефект на Елдер, служи като еталон

за различни числени симулации на движение в пореста среда. Нелинейността на задачата и прекъснатите гранични условия са предизвикателство към точното моделиране на подобен род движения. Използваният в тази статия модел би могъл да се разшири и за тримерна област, възможност за което понастоящем дава наличието на значителен изчислителен ресурс, като и да се приложи и за неизотропна среда.

Литература

References

- Andrzhievskiy, A. 2014. *Mechanics of liquids and gases*. Vyishaya shkola, Minsk, 208 p. (in Belarusian).
- Antonov, D. 2017. Assessment of strontium transport in clay medium by using a reactive transport modelling approach - an HP1 case study model. *Geologica Balcanica*, 46(2), Sofia, 23-26.
- Antonov, D., D. Karastanev, D. Mallants. 2012. Determination of soil hydrological parameters of a multi-layered loess complex using HYDRUS-2D and field infiltration experiments. *Compte rendus de l'Academie bulgare des Sciences*, 65, 12, 1717-1724.
- Benderev, A., V. Spasov, N. Kostova, T. Kotsev, V. Nikolov, A. Mitev, V. Stoyanova, E. Damyanova, K. Kroumova, I. Pandurski, A. Toteva, M. Trayanova. 2017. Arsenic contamination of Kobilyak karst spring, NW Bulgaria – state and reasons. *National Conference with international participation "GEOSCIENCES 2017", Short Communications*, 133-134 (in Bulgarian with English abstract).
- Elder, J.W. 1967. Transient Convection in a Porous Medium. *J. Fluid Mech.*, 27, no.3, 609-623.
- Galabov, M., P. Penchev. 1986. Solution of applied hydrogeological problems by computers. Technika, Sofia, 374 p. (in Bulgarian).
- Galabov, M., N. Stoyanov. 2001. Mathematical model for prognostication of contamination of groundwater of new Sofia's landfill (near Dolni Bogrov). In: *Procs. of the International Scientific Session "Management of Natural and Technogenic Risks", Sofia, 4-8 June*, 165-171.
- Gerginov, P. 2018. *Hydrogeological conditions in the area of NPP "Kozloduy"*. PhD Thesis, Geological Institute, Bulgarian Academy of Sciences, 126 p. (in Bulgarian).
- Gerginov, P., A. Benderev, D. Antonov, T. Kotsev, V. Asenova. 2017. Groundwater dynamics and Arsenic migration in the saturated zone of Ogosta River terrace. *Engineering Geology and Hydrogeology*, 31, 53-64 (in Bulgarian with English abstract).
- Holzbecher E. O. 1998. *Modeling Density-Driven Flow in Porous Media*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 286 p.
- Kolev, S. 2016. Surface-groundwater interaction at the region of Vulche dere, downstream of "Eleshnitsa" tailing pond. *National Conference with international participation "GEOSCIENCES 2016", Short Communications*, 153-154 (in Bulgarian with English abstract).
- Kolev, S., N. Van Meir, Kr. Ivanova. 2014. Assessment of the current state of radionuclides and metals content in the surface and groundwater at the region of Eleshnitsa former uranium mine. *Radiation Protection Journal*, 2, 35-42.
- Stoyanov, N. 2003. *Estimation and prognostication of groundwater pollution caused by sanitary landfills*. PhD Thesis, Sofia, University of Mining and Geology, 215 p. (in Bulgarian).

- Stoyanov, N. 2012. Model studies estimating the risk of a possible pollution in the geological basis and groundwater caused by the designed national disposal facility for storage of radioactive waste in the area of NPS "Kozlodui". *Annual of the University of Mining and Geology "St. Ivan Rilski"*, Vol. 55, Part I, Geology and Geophysics, 140-145 (in Bulgarian with English abstract).
- Voss, C.I., W.R. Souza. 1987. Variable Density Flow and Solute Transport Simulation of Regional Aquifers Containing a narrow Freshwater-saltwater transition Zone. *Water Resources Research*, 23, no. 10, 1851-1866.

Постъпила: 12.02.2018

Приема: 17.08.2018

Received: 12 February 2018

Accepted: 17 August 2018