

Пути прогнозирования изменения качества подземных вод месторождений речных долин и артезианских бассейнов под влиянием природно-техногенных факторов

Источник: <http://www.hydrogeoecology.ru/index.php/biblioteka-gidek/zhurnaly/ron-2003-10/89-puti-prognozirovaniya-izmeneniya-kachestva-podzemnykh-vod-mestorozhdenij-rechnykh-dolin-i-artezianskikh>

Проблемы прогнозирования изменения химического состава подземных вод в процессе эксплуатации приобретают в последнее время все большее значение в связи с увеличением техногенной нагрузки на окружающую среду. Особый интерес в этом плане представляют месторождения пресных подземных вод в речных долинах в связи с прогрессирующим загрязнением поверхностных вод и артезианских бассейнов из-за существования региональных гидрогеохимических провинций с повышенными фоновыми концентрациями нормируемых элементов и соединений. Кроме того месторождения речных долин и артезианских бассейнов охватывают большую долю от всех разведанных запасов подземных вод, предназначенных для хозяйственно-питьевого водоснабжения.

В геохимическом отношении месторождение подземных питьевых вод представляет собой участок водоносных горизонтов, граничные геолого-гидрогеологические условия которого определяют основные процессы формирования химического состава вод под влиянием природно-техногенных факторов.

Детальное изучение месторождений подземных питьевых вод речных долин и артезианских бассейнов различных регионов России, выполненное за последние годы, показало, что многообразные гидрогеохимические процессы, протекающие в системе «вода - порода» и определяющие геохимический облик подземных вод, являются вероятностно-детерминированными. Ранее такой вывод был получен при изучении геохимических и экологических последствий изменений химического состава подземных вод под влиянием загрязняющих веществ [4]. Более того, наблюдаемые в водоносных горизонтах закономерности распространения различных химических типов подземных вод есть результат процессов в системе «вода-порода», которые детерминировано определяются законами физической химии при граничных условиях, вероятностно складывающихся для каждой точки пространства и времени [6].

Вероятностно-детерминированный характер гидрогеохимических процессов обуславливает формирование ограниченного и строго определенного набора ситуаций, каждая из которых может быть количественно отображена интегральными геохимическими показателями – величинами водородного показателя и окислительно-восстановительного потенциала, минерализации вод, концентраций и соотношений основных макроанионов и макрокатионов, суммарным содержанием органических веществ.

Основные факторы, определяющие формирование химического состава подземных вод месторождений речных долин и артезианских бассейнов, изменение которых приводит к соответствующему изменению качества вод при эксплуатации водозаборов зависят от:

- региональных особенностей расположения месторождения в общей схеме ландшафтно-климатической и гидрогеохимической зональности гидрогеологической структуры;
- металлогенической специфики водовмещающих пород, формирующей регионально выраженные гидрогеохимические провинции с повышенными содержаниями нормируемых элементов;
- геолого-гидрогеологических условий месторождения, обуславливающих строение всего разреза водоносных горизонтов, их залегание, литологический состав водовмещающих и

слабопроницаемых отложений, условия питания продуктивных горизонтов, скорость движения подземных вод в водоносных коллекторах с взаимодействием твердой и жидкой фаз;

- гидрогеохимических особенностей основных источников эксплуатационных запасов подземных вод;
- отличительных свойств техногенных источников загрязнений подземных вод.

Вследствие этого прогноз качества подземных вод базируется на анализе вышеперечисленных геолого-гидрогеологических и гидрогеохимических природно-техногенных условий исследуемого месторождения.

Оценка таких условий должна сопровождаться получением количественных характеристик химического состава подземных вод продуктивного водоносного горизонта и гидравлически связанных с ним поверхностных вод и подземных вод смежных водоносных горизонтов. На базе этих характеристик должны быть выделены основные геохимические типы подземных вод, развитых в пределах месторождения, установлены приоритетные нормируемые компоненты, изучены гидрогеохимические поля этих компонентов с анализом причинной обусловленности пространственно-временной их изменчивости.

Наряду с этим должны быть количественно оценены фильтрационные свойства водовмещающих пород, скорость движения подземных вод в водоносных коллекторах. Специального изучения требует минералогический состав водоносных отложений для установления в них минералов, содержащих нормируемые элементы, а также экспериментальная оценка сорбционной и обменной емкости пород.

Таким образом, анализ гидрогеологических и гидрогеохимических условий месторождения подземных вод должен быть направлен на получение информации, необходимой для надежного прогнозирования возможных изменений качества подземных вод в процессе их эксплуатации. Этот анализ в первую очередь предназначен для решения следующих задач:

- определение типа месторождения;
- выделение всех возможных источников изменения качества подземных вод;
- определения характера источников загрязнения;
- построение гидрогеохимической модели месторождения в естественных условиях;
- оценка гидрохимических и геохимических процессов, которые могут привести к недопустимому изменению качества отбираемых водозабором подземных вод;
- выбор расчетных миграционных, кинетических, термодинамических и других параметров, необходимых для проведения прогнозных оценок;
- выбор методики прогноза;
- обоснование гидрогеохимической аналогии (в случае необходимости).

Комплексный подход к решению задачи прогнозирования изменения качества подземных вод в процессе эксплуатации их месторождений должен проводиться с самого начала геологоразведочного процесса, начиная со стадии проектирования работ.

Методы гидрогеохимических прогнозов включают методы, основанные на эмпирических обобщениях и анализе гидрогеохимических явлений в их пространственно-временной последовательности, и методы, использующие принципы физико-химической гидродинамики, термодинамики и кинетики.

Методы прогнозирования распределений нормируемых компонентов состава подземных вод, базирующиеся на эмпирических данных, основаны на материалах, характеризующих гидрогеохимическое состояние водоносной системы.

Прогноз распределений переменновалентных нормируемых элементов (Fe, Mn, As, Mo, Se, Cr, Hg, Te, NO₃, NO₂, NH₄, H₂S, HS) осуществляют с использованием данных о сопряженных величинах водородного показателя и окислительно-восстановительного потенциала.

Для этих компонентов существуют Eh-pH диаграммы полей устойчивости миграционных форм и основных твердофазных соединений [7]. Таким образом инструментально определяя значения pH и Eh при проведении полевых гидрогеохимических исследований, мы получаем возможность оценки миграционной способности того или иного элемента, выделяя участки водоносных горизонтов с благоприятными (или неблагоприятными) условиями для его миграции в повышенных концентрациях.

Закономерная смена окислительно-восстановительных состояний подземных вод по направлению их потока в водоносных коллекторах приводит к формированию окислительно-восстановительной зональности. Например, для месторождений речных долин с двухслойным строением разреза в естественных условиях по направлению от водораздела к пойменной части происходит смена кислородных вод бескислородными. В процессе эксплуатации окислительно-восстановительная зональность подземных вод имеет противоположный вид со сменой кислородных вод бескислородными в направлении от реки к линии водозаборных скважин.

Для месторождений артезианских бассейнов окислительно-восстановительная зональность проявляется при смене кислородных вод бескислородными в направлении от области питания водоносных горизонтов к области транзита при погружении водовмещающих коллекторов.

Поскольку для каждого гидрогеохимического поля с различным окислительно-восстановительным состоянием подземных вод характерен свой набор нормируемых химических элементов и соединений, существует принципиальная возможность прогнозирования их пространственных распределений в водоносных горизонтах.

Миграционные свойства микроэлементов с постоянной валентностью зависят от различных гидрогеохимических факторов и, в частности, от особенностей макрокомпонентного состава. Поэтому прогноз распределений нормируемых элементов возможен с использованием эмпирических геохимических характеристик, определяющих распределения микроэлементов в подземных водах, и зависимостей концентраций макрокомпонентов от содержаний макроанионов или макрокатионов или от соотношения макрокомпонентов.

Например, для подземных вод месторождений Московского артезианского бассейна, сложенных каменноугольными отложениями, известна устойчивая корреляционная связь концентраций Sr и содержаний SO_4^{2-} - иона. При содержаниях сульфатов в подземных водах свыше 100 мг/л существует высокая вероятность обнаружения повышенных (>7 мг/л) концентраций стронция.

Другим прогнозным геохимическим параметром может служить, в частности, эквивалентное отношение Na/Ca. Известно, что натриевые соединения многих нормируемых неорганических элементов (F^- , BO_3^{3-} , AsO_4^{3-} и др.) обладают большей растворимостью по сравнению с кальциевыми. Это их геохимическое свойство позволило выделить гидрогеохимические провинции фтороносных ($\text{F} > 1.5$ мг/л), борсодержащих (> 0.5 мг/л), мышьяксодержащих (> 0.05 мг/л) подземных вод [2]. Для подземных вод Тавдинского водоносного комплекса Западно-Сибирского артезианского бассейна повышенная вероятность обнаружения повышенных концентраций бора существует при соотношении rNa/rCa более 5.

Следующий пример возможности прогнозирования распространения нормируемых макрокомпонентов в подземных водах по их макрокомпонентному составу основан на закономерностях миграции с учетом сорбционных и ионно-обменных процессов.

Известно, что щелочные элементы по сорбционной способности образуют ряд $\text{K}^+ > \text{Na}^+ > \text{Li}^+$. Это означает, что калий активнее сорбируется породами, чем натрий и еще более активно, чем литий. При этом на контакте водовмещающих пород и подземных вод происходит ионный обмен и калий переходит в твердую фазу, в первую очередь вытесняя в жидкую – литий.

В результате, например, в подземных водах мячковско-подольского водоносного горизонта Московского артезианского бассейна увеличивается вероятность обнаружения повышенных концентраций Li (>0.03 мг/л) при отношении Na/K менее 10.

Важно подчеркнуть, что изменчивость химического состава подземных вод в гидрогеологических структурах – итоговый результат формирования гидрогеохимической зональности водоносных систем. В свою очередь формирование такой зональности приводит к детерминированному распределению нормируемых микроэлементов, которое возможно прогнозировать по общему химическому составу вод, соотношению определенных макрокомпонентов.

Выше были рассмотрены примеры решения задач прогноза распределений микроэлементов в подземных водах, основанные на изменении их миграционных свойств в зависимости от значений pH и Eh, макрокомпонентного состава.

Но эмпирические геохимические характеристики подземных вод в совокупности позволяют прогнозировать последствия и более сложных гидрогеохимических процессов. В частности, примером возможностей такого прогноза могут служить результаты изучения гетерогенного процесса формирования высокоцветных (до 1000 – 1500 градусов) подземных вод Мегионского месторождения (Западная Сибирь).

Основными показателями, указывающими на существование предпосылок образования высокоцветных подземных вод на этом месторождении являются:

1. Гидрокарбонатный, хлоридно-гидрокарбонатный или гидрокарбонатно-хлоридный состав подземных вод с минерализацией более 0,5 г/л при концентрациях $\text{Na} > 120$ мг/л и $\text{HCO}_3 > 350$ мг/л.
2. Эквивалентное содержание Cl-иона не более 60-65%.
3. Высокие значения эквивалентного соотношения $r\text{Na}/r\text{Ca} > 5$.
4. Континентальный генезис водовмещающих пород и заключенного в них органического вещества.
5. Наличие в подземных водах растворенного углекислого газа в количестве не менее 20 мг/л (10 мл/л).

Прямыми признаками формирования повышенной цветности подземных вод при существовании всей совокупности вышеперечисленных показателей являются:

- Увеличение перманганатной и бихроматной окисляемости вод (соответственно >7 и > 20 мгО/л);
- Обнаружение в составе вод гуминовых кислот в количестве >1 мг/л.

Сложность рассмотренных процессов и отсутствие их кинетических характеристик не позволяют в настоящее время делать количественные прогнозы изменения цветности подземных вод в процессе эксплуатации и заставляют нас ограничиться лишь качественными оценками. Важно, однако, то обстоятельство, что при отсутствии вышеперечисленных условий можно утверждать, что формирование высокоцветных вод практически не может происходить. Вместо с этим прогноз формирования высокоцветных вод обязан сопровождаться исследованиями:

- общего химического состава подземных вод;
- перманганатной окисляемости;
- растворенной углекислоты;
- генезиса и состава органического вещества;
- состава поглощающего комплекса;
- содержаний в подземных водах гуминовых кислот.

Применительно к задачам прогноза качества подземных вод важно четкое выделение уровня схематизации природно-техногенных условий месторождения, который необходим и достаточен для решения поставленных задач. При этом от того, насколько гидрогеохимическая модель адекватна реальной ситуации, напрямую зависит надежность прогнозных решений. Необоснованное упрощение гидрогеохимических условий может привести к серьезным ошибкам в прогнозах из-за недоучета тех или иных процессов.

Однако излишнее усложнение модели может привести к тем же результатам из-за невозможности правильного учета всех взаимодействий, отсутствия необходимых кинетических параметров среды и ограниченных возможностей математического аппарата.

Выделяется семь уровней схематизации природных условий при обосновании моделей прогноза качества подземных вод. Первые четыре уровня необходимы для формирования расчетной гидродинамической модели [1]. Они включают:

- 1) Рабочую гипотезу или эвристическую разведочную модель;
- 2) Природную пространственно-временную модель условий формирования эксплуатационных запасов подземных вод;
- 3) Геофильтрационную модель месторождения;
- 4) Расчетную гидродинамическую модель.

Поскольку для прогнозов качества подземных вод существенна информация о направлении, скорости движения и балансе формирования запасов подземных вод, перечисленные этапы схематизации обязательно предшествуют построению моделей прогнозов их качества. После этого могут быть созданы:

- 5) Геомиграционная модель месторождения, включающая обоснование гидрогеохимических полей, полей миграционных параметров и выделение наиболее значимых факторов переноса, рассеяния и преобразования химических веществ;
- 6) Консервативная расчетная модель, в рамках которой считается, что растворенное вещество ведет себя консервативно, а изменение концентраций обуславливается только процессами конвекции, диффузии, макро- и микродисперсии;
- 7) Активную физико-химическую расчетную геомиграционную и геохимическую (термодинамическую) модель месторождения, учитывающую фазовые и внутрифазовые взаимодействия вещества.

Основным миграционным параметром, необходимым для характеристики наиболее существенной – конвективной – части переноса вещества в условиях месторождений является параметр активной пористости (трещиноватости) пород. Однако, в силу того, что определяющую роль в формировании поля скоростей движения воды играют гидродинамические факторы – неоднородность и анизотропность фильтрационных свойств пород – для построения геомиграционных моделей необходимо рассмотрение фильтрационных свойств пород в области предполагаемой миграции вещества. В связи с этим часто возникает необходимость проведения специальных видов работ для характеристики фильтрационной неоднородности водоносных горизонтов и гидродинамической взаимосвязи их с выше- и нижележащими пластами. К ним относятся термометрические, водно-гелиевые, изотопные исследования, гидрогеохимические исследования поровых растворов в слабопроницаемых пластах, а также опытно-миграционные работы, направленные на исследования профильной неоднородности поля скоростей, плановой и профильной анизотропии пород.

Заметим, что уже на этапе геофильтрационной схематизации и построения гидродинамической модели месторождения необходим учет особенностей формирования качества подземных вод, например, таких, как направление и величина вертикального водообмена между водоносными горизонтами, выделение областей с существенно замедленной или увеличенной скоростью миграции подземных вод, наличие в плане и разрезе пластов, где могут происходить те или иные физико-химические взаимодействия воды с породами. Это означает, что гидрогеохимическая информация должна анализироваться и учитываться уже на этапе геофильтрационной схематизации, а геолого-разведочные работы должны быть нацелены на обеспечение процесса моделирования. Добавим к этому, что учет результатов гидрогеохимических исследований, включая изотопные и водно-гелиевые опробования, ОМР может существенно увеличить обоснованность и достоверность гидродинамических моделей и в тех случаях, когда специальный прогноз качества подземных вод не требуется.

После того, как по результатам анализа полученных данных геологоразведочных работ проанализированы и выделены основные факторы, определяющие возможные изменения качества подземных вод, и сформулирована общая геомиграционная модель месторождения, включающая схематизацию гидрогеохимических полей, полей миграционных параметров и граничных условий, необходимо перейти к расчетной схематизации этой модели.

Расчетная геомиграционная гидрогеохимическая модель может быть реализована в виде:

- аналитической модели;
- численной геомиграционной модели;
- комбинации нескольких аналитических моделей, последовательно отражающих различные процессы, а также разнообразные сочетания численных и аналитических моделей, отражающих процессы изменения качества подземных вод как в одной и той же области миграции, так и в разных областях природной модели (например – в зоне аэрации и водоносном пласте).

В условиях речных долин могут существовать четыре основных вида источников изменения качества подземных вод по местоположению:

- сама река в случаях загрязнения поверхностных вод;
- преимущественно техногенные источники загрязнения на поверхности земли, а также природные источники вод иного геохимического облика, расположенные
- в нижезалегающих водоносных горизонтах (в разрезе) или
- непосредственно в водоносном горизонте на отдалении от водозабора (в плане).

Во всех случаях обоснование расчетной модели, как правило, целесообразно начинать с аналитических транспортных оценок времени переноса (подтягивания) вод иного качества к водозаборным скважинам. Для потенциальных источников загрязнения, расположенных на поверхности земли и в приподошвенной части мощных водоносных горизонтов, такие оценки выполняются на основе профильной схемы с учетом профильной анизотропии пород. При наличии мощной зоны аэрации оценка времени массопереноса по ней выполняется отдельно, с учетом особенностей влагопереноса в ненасыщенной среде. Если конфигурация гидродинамических граничных условий месторождения и гидродинамическая сетка движения подземных вод является достаточно сложной и не позволяет применить напрямую аналитические расчетные схемы, оценки времени переноса производятся на основании данных гидродинамической (численной или аналитической) модели по лентам тока для поршневой схемы массо-переноса.

Результаты предварительных транспортных оценок являются основанием для выделения тех источников загрязнения подземных вод, которые необходимо учитывать при дальнейшем усложнении миграционной модели. Те источники, перенос вещества от которых не достигает водозаборных сооружений за время их эксплуатации, исключаются из дальнейшего рассмотрения.

Следующим необходимым этапом в обосновании прогнозных геомиграционных моделей является балансовая оценка поступления некондиционных вод в общий баланс водоотбора в прогнозных условиях. Балансовые оценки производятся либо по известным аналитическим гидродинамическим зависимостям [5], либо (что в настоящее время является довольно частым случаем) по данным численного гидродинамического моделирования. По результатам данной оценки рассчитываются критические концентрации загрязняющих веществ, которые могут привести к некондиционному ухудшению качества хозяйственно-питьевых вод. В зависимости от процентного содержания загрязненных вод в балансе водоотбора и установленных СанПиН 2.1.4.1074-01 ПДК для питьевых вод критические концентрации рассчитываются отдельно по каждому компоненту-загрязнителю.

При этом, как показывает практика работ на месторождениях подземных вод речных долин, основными показателями, отрицательно влияющими на качество подземных вод,

являются микробиологические и вирусологические показатели, как правило содержащиеся в речных водах в ураганных количествах.

Среди этих показателей выделяются: общее микробное число, общие и термотолерантные колиформные бактерии, колифаги, споры сульфитредуцирующих клостридий, цисты лямблий, количество которых в водах регламентирует СанПиН 2.1.4.1074-01, а также бактерии группы кишечных палочек, возбудители кишечных инфекций – сальмонеллы, шигеллы, энтеровирусы, *E. Coli*, энтерококки, анализ которых предусматривает ГОСТ 2761-84. Кроме микробиологических и вирусологических показателей наиболее часто встречаются в речных водах повышенные концентрации нефтепродуктов, фенолов, поверхностно-активных веществ.

До сих пор речь шла только о прогнозных транспортных геомиграционных моделях в их простейшем виде. В тех случаях, когда гидрогеохимическая обстановка на месторождении изучена в достаточной мере, а транспортные и балансовые оценки не позволяют исключить выявленные источники загрязнения из рассмотрения, необходим переход к построению более сложных расчетных геомиграционных моделей.

Их последующее построение также осуществляется поэтапно: первоначально производится построение миграционных моделей, учитывающих процессы рассеяния вещества на основе консервативных схем, затем учет тех процессов сорбции, которые могут быть учтены путем приведения к транспортным схемам (заменой расчетного значения параметра пористости), затем процессов деструкции тех компонентов, для которых известны характеристики времени полураспада в изучаемых условиях.

Более сложные прогнозные задачи для системы «вода-порода», учитывающие процессы растворения – осаждения твердого вещества в водном растворе, электролитической диссоциации – ассоциации растворенных в водной фазе частиц, окисление – восстановление компонентов переменной валентности водного раствора, сорбцию-десорбцию (ионный обмен) компонентов между твердой и водной фазами, решают путем физико-химического моделирования [3, 6 и др.]. Обзор типовых методов физико-химического моделирования показал, что главным препятствием для проведения прогнозных расчетов является отсутствие методик определения ряда параметров, необходимых для построения моделей, адекватных реальной природной обстановке. В первую очередь это относится к определению «*in situ*» кинетических параметров физико-химических реакций, протекающих при взаимодействии подземных вод с водовмещающими отложениями, и связано с невозможностью количественной оценки отношений реагирующих масс порода/вода. В результате неправильного учета этих параметров могут быть получены результаты модельных расчетов, прямо противоречащие данным о химическом составе подземных вод, распространенных в водоносных системах зоны гипергенеза.

В заключение подчеркнем, что прогнозирование качества подземных вод в процессе эксплуатации их месторождений должно осуществляться с учетом комплексного подхода к решению прогнозных задач с рассмотрением факторов и процессов, определяющих химический состав подземных вод и возможность их изменений во времени и пространстве, с последовательным использованием гидродинамических, физико-химических моделей разного уровня.

Литература

1. Боровский Б.В. *Формирование эксплуатационных запасов и разведка месторождений пресных подземных вод. Доклад диссертации на соискание ученой степени д.г.-м.н. М., 1986.*
2. 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.*

3. Крайнов С.Р., Рыженко Б.Н. Анализ разрешающих возможностей прогнозных моделей техногенных изменений химического состава подземных вод, их оптимальное геохимическое содержание. *Геохимия*, 2000, №7, с. 691-703.
4. Крайнов С.Р., Фойгт Г.Ю., Закутин В.П. Геохимические и экологические последствия изменений химического состава подземных вод под влиянием загрязняющих веществ. *Геохимия*, 1991, №2, с. 169-182.
5. Мироненко В.А., Румынин В.Г. Проблемы гидрогеологии. Т1. Теоретическое изучение и моделирование геомиграционных процессов. М., МГГА, 1998, 611 с.
6. Рыженко Б.Н., Крайнов С.Р., Шваров Ю.В. Физико-химические факторы формирования состава природных вод (верификация модели «порода-вода»). *Геохимия*, 2003, №6, с. 630-640.
7. Brookins D.G. *Eh-pH diagrams for geochemistry*. Berlin, Springer-Verlag, 1988, 176 p.