ISSN 1561-9087 Прикладна гідромеханіка. 2001. Том 3 (75), N 1. С. 52 – 59

УДК 581.1:631.4

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЗАГРЯЗНЕНИЙ В ДОННЫХ ОТЛОЖЕНИЯХ. 1. ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ

В. Л. ПОЛЯКОВ

Институт гидромеханики НАН Украины, Киев

Получено 15.06.99

Сформулирована математическая задача диффузионно-конвективного переноса загрязняющих веществ в однородном слое донных отложений с учетом его очищения в результате трансформации и выноса загрязнителя в нижележащий грунт, а также обменных процессов. Методом интегральных преобразований получено строгое аналитическое решение. Рассмотрены две характерные стадии распространения загрязняющих веществ. На первой высокая загрязненность водоисточника способствует интенсивному насыщению донных отложений загрязнителем, на второй, вследствие резкого снижения уровня загрязненности воды, отложения постепенно очищаются.

Сформульована математична задача дифузійно-конвективного переносу забруднюючих речовин в однорідному шарі донних відкладень з врахуванням його очищення внаслідок трансформації та виносу забруднення, а також обмінних процесів. З використанням методу інтегральних перетворень отриманий точний аналітичний розв'язок. Розглянуті дві характерні стадії розповсюдження забруднюючих речовин. На першій значне забруднення поверхневого джерела води сприяє інтенсивному насиченню донних відкладень забруднювача, на другій, внаслідок різкого зниження рівня забрудненності води, вікладення поступово очищаються.

The mathematical problem was stated for advection-diffusion transport of contaminant in a uniform sediment layer taking into account its purification due to contaminant transformation, discharge and exchange processes. An exact analytical solution to this problem was obtained by the integral transform method. Two characteristic stages were considered of contaminant transport and distribution within the sediment layer. At the first stage considerable contamination of a surface water source causes saturation of the sediment layer with contaminant, at the second stage this layer is gradually purified owing to essential decrease in contamination level.

Слой донных отложений (СДО) из-за своих специфических свойств играет неоднозначную роль в распостранении в природе загрязняющих веществ (ЗВ). С одной стороны и в первую очередь, СДО аккумулирует и закрепляет физическим или химическим путем ЗВ в своей твердой фазе, тем самым в значительной мере ограничивая их подвижность. С другой стороны, СДО, как правило, граничит с хорошопроводящими средами и с течением времени по мере очищения последних может становиться источником вторичного загрязнения окружающей природной среды. Поэтому большую ценность для выполнения экологических оценок в районах функционирования водохозяйственных объектов представляют прогнозы накопления ЗВ в СДО и их выноса за пределы СДО. В частности, краткосрочный прогноз позволяет оценивать значение СДО как важнейшего фактора очищения прежде всего активных в биологическом отношении элементов естественной среды непосредственно после возникновения аварийной ситуации. Долгосрочный прогноз дает возможность предсказать уже некоторые дальние последствия аварий или длительного применения несовершенных технологий на АЭС и других экологически опасных промышленных объектах. Выполнение прогнозов с высоким уровнем достоверности для включающих донные отложения водных экосистем возможно только на базе математических моделей массопереноса в специфических условиях, характерных именно для СДО, с детальным учетом особенностей обмена ЗВ с сопредельными природными компонентами водных экосистем (поверхностные и подземные водоисточники, водоприемники, подстилающий хорошопроницаемый грунт, прилегающие территории). Существенные различия между переносом ЗВ в СДО и граничащими с ним компонентами часто дают основание использовать упрощенные подходы. При этом СДО рассматривается в качестве основного объекта при изучении динамики загрязнений, которая описывается выражающими законы сохранения дифференциальными уравнениями. В то же время особенности массообмена в экосистеме "водоисточник-СДО-подстилающий грунт" характеризуются совокупностью специальнвх модельных параметров, которые отражают физику этого явления около границ СДО и содержатся в краевых условиях математических задач.

Особая важность проблемы распостранения загрязнений в водных экосистемах и оценки последствий техногенных воздействий на них стимулировала проведение многочисленных теоретических и экспериментальных исследований в этом направлении. Динамика ЗВ в отложениях в большей части изучалась численными методами, что позволило использовать более содержательные математические модели и тем самым существенно приблизиться к адекватному описанию природной обстановки и техногенных условий [1–4]. Тем не менее значительные сложности в экспериментальном определении исходных параметров, которое может быть даже сопряжено с опасностью для здоровья людей, а также существенные различия в значимости природных факторов предопределили достаточно широкое применение аналитических методов [5–8]. Особое внимание уделялось изучению закономерностей первичного накопления ЗВ в верхней части СДО, что позволило формально принимать схему полуограниченного по глубине слоя [9–12].

В отличие от упомянутых разработок основной целью данной работы является теоретический анализ эволюции экологической обстановки в СДО в чрезвычайной ситуации, а также влияния такой эволюции на нижележащий грунт при неблагоприятных гидрогеологических условиях. В таком случае СДО фактически становится главным источником ЗВ и представляет наибольшую угрозу для окружающей среды. Для надежной оценки длительного поступления ЗВ с фильтрационным потоком в подстилающие хорошопроницаемые грунты учитывается реальная мощность СДО и отслеживается расход ЗВ на нижней границе СДО, что в конечном итоге приводит к получению точных решений в виде сходящихся рядов. Вместе с тем предлагаемая ниже расчетная методика позволяет прогнозировать физико-химическое состояние СДО в любой момент времени, в том числе и в начальный период распространения загрязнения, благодаря учету кинетики обмена ЗВ между жидкой и твердой фазами СДО. Существенные изменения уровня загрязненности поверхностного водоисточника, обычно происходящие со временем в силу разных причин, потребовали выделения специальной стадии в загрязнении СДО. Результаты обстоятельного анализа особенностей переноса ЗВ в СДО, а также влияния модельных параметров прежде всего на вынос за пределы СДО изложены во второй части.

1. ПОСТАНОВКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ

Приводится математическая формулировка задачи распространения ЗВ в однородном СДО конечной мощности m_0 за счет механизмов эффективной диффузии (молекулярная диффузия + гидродинамическая дисперсия) и конвекции, обусловленной нисходящим фильтрационным потоком с постоянной скоростью фильтрации V. Прочное (в фиксированной форме) и непрочное (в обменной форме) закрепление ЗВ в различных фракциях твердой фазы СДО в количественном отношении характеризуется параметрами их распределения (в равновесных условиях), а именно, между необменной и обменной формами – K_f, между обменной и растворенной формами – K_e. Постепенное снижение уровня загрязненности обеих фаз СДО вследствие деградации ЗВ (например, радиоактивный распад в случае загрязнения радионуклидами) учитывается с помощью единого коэффициента скорости λ. Исходная математическая модель отражает кинетику обмена между фиксированной (в глинистой фракции донных отложений) и обменной формами ЗВ с коэффициентом скорости обмена α. Процесс закрепления ЗВ в фиксированной форме может трактоваться и как диффузионный процесс внутри агрегированных частиц, содержащих практически неподвижную воду [13, 14]. Такие частицы чаще всего образуются в результате жизнедеятельности и отмирания гидробионтов. Также, имея в виду поставленные цели исследований, полагается, что равновесие между обменной и растворенной формами ЗВ устанавливается мгновенно. Тогда система уравнений, описывающая динамику ЗВ в СДО в рамках оговоренных допущений, принимает вид

$$\begin{gathered}
\rho_s \frac{\partial S_f}{\partial t} + \rho_s \frac{\partial S_e}{\partial t} + \theta_s \frac{\partial C}{\partial t} = \\
= D_e \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + V \frac{\partial C}{\partial z} - \lambda \theta_s C - \lambda \rho_s S_e - \lambda \rho_s S_f, \\
S_e = K_e C, \\
\frac{\partial S_f}{\partial t} = \alpha (K_f S_e - S_f) - \lambda S_f .
\end{gathered} \qquad (1)$$

Здесь $D_e = D_0 \theta_s f_s + \chi V$ – коэффициент эффективной диффузии, характеризующий близкие по значимости механизмы переноса ЗВ в СДО за счет молекулярной диффузии и гидродинамической дисперсии [15–17]; D_0 – коэффициент молекулярной диффузии ЗВ в воде; f_s – фактор сопротивления, который согласно [18, 19] можно принимать равным θ_s^2; θ_s – пористость грунта в СДО; χ – коэффициент гидродинамической дисперсии; C – концентрация ЗВ в растворенной форме; ρ_s – плотность грунта; S_e, S_f – концентрация ЗВ в обменной и необменной формах; ось Oz направлена вверх. Так как температура T в пределах СДО вследствие его удаленности от дневной поверхности мало меняется, находясь в диапазоне 6 – 10^o C [20, 21], то и коэффициент D_0 оправдано в расчетах принимать постоянным, а его значение выбирать, исходя из средней в течение расчетного периода величины T_c (во многих случаях достаточно полагать $T_c = 8^oC$).

Для строгого учета особенностей массообмена ЗВ между СДО, вышерасположенным водоисточником и подстилающим грунтом необходимо задавать на нижней и верхней границах СДО условия сопряжения потоков ЗВ (четвертого рода). Однако такой подход требует детального изучения динамики ЗВ в сопредельных средах, их физико-химических свойств и сопряжен со значительными трудностями и в экспериментальных, и в теоретических исследованиях. Для практических целей часто можно принимать допущения, благодаря которым на границах СДО удается задавать существенно более простые краевые условия, но, конечно же, правильно отражающие характер массообмена на обеих границах.

Повышенной динамичностью отличаются физические процессы в граничащем с СДО водоисточнике даже при стоячей глубокой воде (непроточный водоем). В таком случае основным механизмом переноса ЗВ является молекулярная диффузия, которая обычно заметно превосходит эффективную диффузии в СДО. Следует отметить, что фактический диффузионный поток здесь может в несколько раз превышать поток, формирующийся за счет молекулярной диффузии, вследствие жизнедеятельности биоты и биоперемешивания [22, 23]. В подобной ситуации коэффициент диффузии ЗВ в водоисточнике D_w может заметно отличаться от D_0 и при обосновании D_w на основе известного значения D_0 необходимо вводить соответствующий поправочный коэффициент. Для водотоков с относительно быстрым течением (каналы, реки) решающую роль в переносе ЗВ к СДО уже играет турбулентное перемешивание воды. Коэффициент D_w в стоячей воде и при ламинарном течении не меняется по глубине потока. Однако его аналог в турбулентном потоке, образованном поступательным и волновым движением жидкости, имеет существенно большие значения, а вследствие сложной структуры потока зависит от z. В дальнейшем предполагается, что в водоисточнике на высоте $z = z_u$ над его дном существует слой воды с постоянным в течение расчетного периода уровнем загрязненности (концентрацией ЗВ) C_0. Тогда в общем случае переменного коэффициента $D_w = D_w(z)$ при наличии конвективного переноса ЗВ ко дну и несущественных переходных процессах на верхней границе СДО можно принимать следующее граничное условие:

$$z = 0, \quad D_e \frac{\partial C}{\partial z} + VC = \frac{V}{1-\gamma}(C_0 - \gamma C), \qquad (2)$$

где $\gamma = \exp(-V\eta_u)$, $\eta_u = \int_0^{z_u} \frac{dz}{D_w}$ – интегральный коэффициент обмена ЗВ между дном и слоем воды с постоянной загрязненностью.

При ламинарном течении D_w равняется уточненному с учетом влияния биоты значению D_0, и тогда $\gamma = \exp\left(-\frac{Vz_u}{D_0}\right)$. Из условия (2) вытекает ряд предельных случаев, а именно:
при $\eta_u \to 0$ ($D_0 \to \infty$ или $z_u = 0$) $\gamma = 1$ и тогда

$$z = 0, \qquad C = C_0, \qquad (3)$$

при $\eta_u \to \infty$ ($D_0 = 0$ или $z_u \to \infty$) $\gamma = 0$ и тогда

$$z = 0, \qquad D_e \frac{\partial C}{\partial z} + VC = VC_0, \qquad (4)$$

при $V = 0$ из (2) следует

$$z = 0, \qquad D_e \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{C_0 - C}{\eta_u}. \qquad (5)$$

Условия (3), (5) можно несколько уточнить при $D_w = D_0$, если условия задачи позволяют рассматривать Vz_u/D_0 в качестве малого параметра. В таком случае удается даже относительно просто учесть в граничном условии нестационарный характер вертикального потока ЗВ. Если обозначить $\frac{Vz_u}{D_0} = \varepsilon$ и $\left(D_e \frac{\partial C}{\partial z} + VC\right)|_{z=0} = I(t)$, то

$$z = 0, \qquad (6)$$

$$\left(1 + \frac{\varepsilon}{2}\right) I - \frac{\varepsilon}{3}\frac{dI}{dt} = D_w \frac{C_0(1+\varepsilon) - C}{z_u}.$$

Формулировка граничного условия при $z = 0$ может существенно осложниться в случае бурного потока и мелкодисперсных грунтов, образующих русло водотока. Тогда вследствие превышения напряжением трения на поверхности русла предельного градиента, при котором начинается размыв русла, твердые частицы под действием результирующей гидродинамической силы поднимаются со дна, формируя взвесенесущий поток. Концентрация твердой фазы потока обычно составляет проценты от его плотности. Однако вследствие высокой сорбционной способности взвешенных частиц их вклад в общую загрязненность потока может быть существенным, и поэтому высота z_u должна обосновываться с учетом двухфазности потока, сорбционных свойств взвешенных наносов, особенностей обмена ЗВ между жидкой и твердой фазами потока. Это можно сделать, используя экспериментальные данные или результаты математического моделирования на базе общей модели загрязненного взвесенесущего потока.

На нижней границе СДО $z=-z_0$ концентрация и расход ЗВ, строго говоря, зависят от физико-химических свойств нижележащего грунта. Однако для наиболее опасных в экологическом отношении природных условий, при которых имеет место беспрепятственный отвод ЗВ от границы с СДО, допустимо пренебрегать в подстилающем грунте диффузионной составляющей потока ЗВ, и тогда оправдано задавать условие

$$z=-z_0, \qquad \frac{\partial C}{\partial z}=0. \tag{7}$$

Начальные условия в общем случае имеют вид

$$t=0, \quad C=C^0(z), \quad S_f=S_f^0(z). \tag{8}$$

Для удобства анализа динамики загрязнений исходная модель (1), (2), (7), (8) представляется в безразмерном виде

$$R_f\frac{\partial \bar S_f}{\partial \bar t}+\frac{\partial \bar C}{\partial \bar t}=\bar D_e\frac{\partial^2 \bar C}{\partial \bar z^2}+\frac{\partial \bar C}{\partial \bar z}-\bar\lambda\bar C-\bar\lambda R_f\bar S_f,$$

$$\frac{\partial \bar S_f}{\partial \bar t}=\bar\alpha(\bar C-\bar S_f)-\bar\lambda\bar S_f, \tag{9}$$

$$\bar z=0, \quad \bar D_e\frac{\partial \bar C}{\partial \bar z}+\bar C=\frac{1}{1-\gamma}(1-\gamma\bar C);$$

$$\bar z=-1, \quad \tfrac{\partial \bar C}{\partial \bar z}=0; \tag{10}$$

$$\bar t=0, \qquad \bar C=\bar C^0(\bar z); \qquad \bar S_f=\bar S_f^0(\bar z). \tag{11}$$

Модель (9) – (11) включает следующие безразмерные параметры:

$$R_f=\frac{\rho_s K_f K_e}{\theta_s+\rho_s K_e}, \bar S_f=\frac{S_f}{K_f K_e C_0},$$

$$\bar t=\frac{Vt}{m_0(\theta_s+\rho_s K_e)}, \bar C=\frac{C}{C_0}, \bar D_e=\frac{D_e}{Vm_0},$$

$$\bar z=\frac{z}{m_0}, \bar\lambda=\frac{\lambda m_0}{V}(\theta_s+\rho_s K_e),$$

$$\bar\alpha=\frac{\alpha m_0}{V}(\theta_s+\rho_s K_e), \bar C^0=\frac{C^0}{C_0}, \bar S_f^0=\frac{S_f^0}{K_f K_e C_0}.$$

Также $\gamma=\exp(-Pe_w\bar\eta_u)$, где $Pe_w=Vz_u/D_*$ – число Пекле; D_* – характерное значение коэффициента диффузии в водоисточнике; $\bar\eta_u=D_*\eta_u/z_u$; при турбулентном течении в качестве D_* целесообразно принимать коэффициент турбулентной диффузии на уровне $z=z_u$; при ламинарном течении $D_*=D_0$, $\bar\eta_u=1$. В дальнейшем черточки над безразмерными переменными и параметрами опускаются. При необходимости вернуться к размерным величинам будут сделаны соответствующие оговорки.

2. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ

Строгое аналитическое решение математической задачи (9)–(11) было получено с помощью конечного преобразования Фурье. Динамика ЗВ в СДО, характеризуемая величинами $C(z,t)$, $S_f(z,t)$, отслеживается в течение длительного времени, достаточного для снижения загрязненности СДО до безопасного уровня. Для решения указанной задачи вводится замена $Y=e^{z/2D_e}(C-C_c)$, $H=e^{z/2D_e}(S_f-S_{fc})$, где $C_c(z)$, $S_{fc}(z)$ являются ее стационарным решением и выражаются зависимостями

$$C_c=a_0e^{\left(\delta_0-\frac{z}{2D_e}\right)z}+b_0e^{\left(-\delta_0-\frac{z}{2D_e}\right)z}, \qquad S_{fc}=\tfrac{\alpha}{\alpha+\lambda}C_c, \tag{12}$$

$$a_0=-\left[2(1+2D_e\delta_0)e^{2\delta_0}\right]/\left[(1-2D_e\delta_0)[1+\gamma-2D_e\delta_0(1-\gamma)]-(1+2D_e\delta_0)[1+\gamma+2D_e(1-\gamma)]e^{2\delta_0}\right]$$

$$b_0=-\left[2(1-2D_e\delta_0)\right]/\left[(1-2D_e\delta_0)[1+\gamma-2D_e\delta_0(1-\gamma)]-(1+2D_e\delta_0)[1+\gamma+2D_e(1-\gamma)]e^{2\delta_0}\right],$$

$$\delta_0=\sqrt{\frac{1}{4D_e^2}+\frac{\lambda}{D_e}+\frac{\alpha\lambda R_f}{D_e(\alpha+\lambda)}}.$$

Тогда исходная задача сводится к следующему виду:

$$R_f\tfrac{\partial H}{\partial t}+\tfrac{\partial Y}{\partial t}=D_e\tfrac{\partial^2 Y}{\partial z^2}-\left(\tfrac{1}{4D}+\lambda\right)Y-\lambda R_f H, \qquad \tfrac{\partial H}{\partial t}=\alpha Y-(\alpha+\lambda)H, \tag{13}$$

$$z=0, \quad D_e\tfrac{\partial Y}{\partial z}+2\tfrac{1+\gamma}{1-\gamma}Y=0; \qquad z=-1, \quad D_e\tfrac{\partial Y}{\partial z}-\tfrac{Y}{2}=0; \tag{14}$$

$$t=0, \quad Y^0 = e^{\frac{z}{2D_e}}[C^0(z) - C_c(z)];$$
$$H^0 = e^{\frac{z}{2D_e}}[S_f^0(z) - S_{fc}(z)]. \qquad (15)$$

Ядро преобразования в соответствии с условиями (14) имеет вид

$$K(\mu_n, z) = \sin\mu_n - \frac{2D_e\mu_n(1-\gamma)}{1+\gamma}\cos\mu_n z, \qquad (16)$$

где μ_n $(n = 1, 2, ...)$ являются корнями характеристического уравнения

$$\operatorname{tg}\mu_n = \frac{4D_e\mu_n}{4D_e^2\mu_n^2(1-\gamma) - 1 - \gamma}. \qquad (17)$$

В результате применения преобразования Фурье с ядром (16) к задаче (13) – (15) получена задача Коши для изображений $\tilde{Y}_n$, $\tilde{H}_n$:

$$R_f\frac{d\tilde{H}_n}{dt} + \frac{d\tilde{Y}_n}{dt} = -\psi_n\tilde{Y}_n - \lambda R_f\tilde{H}_n,$$
$$\frac{d\tilde{H}_n}{dt} = \alpha\tilde{Y}_n - (\alpha+\lambda)\tilde{H}_n,$$
$$\tilde{Y}_n = \tilde{Y}_n^0 = \int_{-1}^{0} e^{\frac{z}{2D_e}}[C^0(z) - C_c(z)]K(z)dz, \qquad (18)$$
$$\tilde{H}_n = \tilde{H}_n^0 = \int_{-1}^{0} e^{\frac{z}{2D_e}}[S_f^0(z) - S_{fc}(z)]K(z)dz;$$

где $\psi_n = D_e\mu_n^2 + 1/(4D_e) + \lambda$.

В принятой постановке загрязнение СДО определяется уровнем загрязненности водоисточника, влияние которого учитывается с помощью граничных условий на верхней границе СДО и начальных условий, (если данный процесс имеет предисторию) путем задания соответствующих значений исходных параметров γ, C_0, C^0, S_f^0. Однако в системе водоисточник–СДО–грунт обычно имеет место самоочищение вследствие внутренних причин – нестабильности ЗВ и жизнедеятельности биоты. Протекает оно особенно интенсивно в более мобильной и биологически активной компоненте системы – водоисточнике. Благодаря этому, а также переносу ЗВ вниз по течению в проточном водоеме загрязненность воды в нем постепенно снижается. Указанный факт может быть учтен в исходной модели заданием параметров γ, C_0 в виде известных функций от t, что в конечном итоге приводит к существенно более сложным расчетным зависимостям. Принимая во внимание, как правило, ограниченность информации об изменении физико-химического состояния данной экосистемы, целесообразно реализовать упрощенный подход, предполагающий скачкообразное изменение загрязненности водоисточника и наличие двух ее характерных уровней на протяжении расчетного периода. В соответствии с этим рассматриваются две стадии перераспределения ЗВ в СДО, причем на первой стадии водоисточник сильно загрязнен, что обуславливает поступление большого количества ЗВ в СДО. На второй стадии вследствие существенного снижения загрязненности прилегающих территорий и водоисточника фильтрация более чистой воды из него определяет ускоренное очищение СДО. Таким образом, математическая модель переноса ЗВ в СДО и обмена ЗВ с нижележащим хорошопроницаемым грунтом ставится как задача с постоянными исходными параметрами γ, C_0, которые, однако, в заданный момент времени (в конце первой стадии) резко меняются.

2.1. Первая стадия распространения ЗВ в СДО

Высокая загрязненность воды в водоисточнике, характеризуемая величиной C_0, способствует интенсивному притоку ЗВ в СДО на протяжении всей первой стадии Изменение концентраций ЗВ в растворенной C_1 и необменной S_{f1} формах на данной стадии описывается полученными в результате обращения изображений (18) зависимостями

$$C_1(z,t) = a_0 e^{\left(\delta_0 - \frac{1}{2D_e}\right)z} + b_0 e^{-\left(\delta_0 + \frac{1}{2D_e}\right)z} +$$
$$+e^{-\frac{z}{2D_e}}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\tilde{Y}_n(t)}{P_n}K_n(z),$$
$$S_{f1} = \frac{\alpha}{\alpha+\lambda}\left(a_0 e^{\left(\delta_0 - \frac{1}{2D_e}\right)z} + b_0 e^{-\left(\delta_0 + \frac{1}{2D_e}\right)z}\right) +$$
$$+e^{-\frac{z}{2D_e}}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\tilde{H}_n(t)}{P_n}K_n(z). \qquad (19)$$

На этой стадии распространение ЗВ в рассматриваемой экосистеме и прежде всего в СДО анализируется с момента возникновения чрезвычайной ситуации, так что можно полагать $C_1^0 = S_{f1}^0 = 0$. Тогда

$$Y_n^0 = a_0\left[\frac{2D_e\mu_n(1-\gamma)}{1+\gamma}I_{2n} - I_{1n}\right] +$$
$$+b_0\left[\frac{2D_e\mu_n(1-\gamma)}{1+\gamma}I_{4n} - I_{3n}\right],$$
$$H_n^0 = \frac{\alpha}{\alpha+\lambda}Y_n^0,$$

$$I_{1n}=\frac{1}{\delta_0^2+\mu_n^2}\left(-\mu_n+\delta_0 e^{-\delta_0}\sin\mu_n+\mu_n e^{-\delta_0}\cos\mu_n\right),$$
$$I_{2n}=\frac{1}{\delta_0^2+\mu_n^2}\left(\delta_0-\delta_0 e^{-\delta_0}\cos\mu_n+\mu_n e^{-\delta_0}\sin\mu_n\right),$$
$$I_{3n}=\frac{1}{\delta_0^2+\mu_n^2}\left(-\mu_n-\delta_0 e^{\delta_0}\sin\mu_n+\mu_n e^{\delta_0}\cos\mu_n\right),$$
$$I_{4n}=\frac{1}{\delta_0^2+\mu_n^2}\left(\delta_0+\delta_0 e^{\delta_0}\cos\mu_n+\mu_n e^{\delta_0}\sin\mu_n\right), \qquad (20)$$

$$P_n=0.5+\frac{D_e(1-\gamma)}{1+\gamma}+\frac{2D_e^2\mu_n^2(1-\gamma)^2}{(1+\gamma)^2}+$$
$$+\left[\frac{D_e^2\mu_n(1-\gamma)^2}{1+\gamma}-\frac{1}{4\mu_n}\right]\sin 2\mu_n-\frac{D_e(1-\gamma)}{1+\gamma}\cos 2\mu_n.$$

Большой практический интерес представляют расходы ЗВ на верхней q_{u1} и нижней q_{b1} границах СДО, позволяющие оценивать интенсивность очищения водоисточника и загрязнения подстилающего грунта. Рассчитываются они на основе зависимостей, вытекающих из выражений (19), а именно,

$$q_{u1}=a_0(0.5+D_e\delta_0)+b_0(0.5-D_e\delta_0)+$$
$$+\frac{2\gamma}{1+\gamma}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\mu_n Y_n(t)}{P_n},$$
$$q_{b1}=a_0 e^{\left(\frac{1}{2D_e}-\delta_0\right)}+b_0 e^{\left(\frac{1}{2D_e}+\delta_0\right)}+ \qquad (21)$$
$$+e^{\frac{1}{2D_e}}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{Y_n(t)}{P_n}K_n(-1),$$

где $K_n(-1)=-\sin\mu_n-2D_e\mu_n(1-\gamma)\cos\mu_n/(1+\gamma)$. Также показательным для оценки экологической ситуации в системе водоисточник–СД–грунт, а со временем и в связанных с ней других компонентах природной среды является суммарное количество ЗВ, поступившее в СДО Q_{u1} и вынесенное из него Q_{b1} в течение периода $[0,t]$. Величины Q_{i1} $(i=u,b)$ вычисляются в результате интегрирования зависимостей (21) в пределах указанного периода, так что

$$Q_{u1}=[a_0(0.5+D_e\delta_0)+b_0(0.5-D_e\delta_0)]t+$$
$$+\frac{2\gamma D_e}{1+\gamma}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\mu_n L_n(t)}{P_n},$$
$$Q_{b1}=\left[a_0 e^{\left(\frac{1}{2D_e}-\delta_0\right)}+b_0 e^{\left(\frac{1}{2D_e}+\delta_0\right)}\right]t+ \qquad (22)$$
$$+e^{\frac{1}{2D_e}}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{L_n(t)}{P_n}K_n(-1),$$

где

$$L_n(t)=\frac{(\delta_{1n}+\alpha+\lambda)Y_n^0+\alpha R_f H_n^0}{\delta_{1n}(\delta_{1n}-\delta_{2n})}\left(e^{\delta_{1n}t}-1\right)-$$
$$-\frac{(\delta_{2n}+\alpha+\lambda)Y_n^0+\alpha R_f H_n^0}{\delta_{2n}(\delta_{1n}-\delta_{2n})}\left(e^{\delta_{2n}t}-1\right).$$

2.2. Вторая стадия распространения ЗВ в СДО

Вследствие скачкообразного снижения уровня загрязненности водоисточника (до концентрации ЗВ в воде C_*, причем согласно условиям задачи $C_*<1$) в момент времени t_*, имеет место постепенное очищение СДО, а впоследствии и уменьшение потока ЗВ в нижележащий грунт. Начальными для решаемой на второй стадии задачи динамики ЗВ являются распределения концентраций $C_1(z,t_*)$, $S_{f1}(z,t_*)$, формируемые в конце первой стадии и таким образом

$$C_2(z,t_*)=C_2^0(z)=C_1(z,t_*),$$
$$S_{f2}(z,t_*)=S_f^0(z)=S_{f1}(z,t_*),. \qquad (23)$$

Значение t_* выбирается исходя из фактического изменения C_0 со временем. Решение задачи для второй стадии получено по аналогии с ее решением на первой стадии и описывается зависимостями

$$C_2(z,t)=C_*\left[a_0 e^{\left(\delta_0-\frac{1}{2D_e}\right)z}+b_0 e^{-\left(\delta_0+\frac{1}{2D_e}\right)z}\right]+$$
$$+e^{-\frac{z}{2D_e}}\sum_{i=1}^{\infty}\frac{G_i(t)}{P_i}K_i(z),$$
$$S_{f2}=\frac{\alpha C_*}{\alpha+\lambda}\left[a_0 e^{\left(\delta_0-\frac{1}{2D_e}\right)z}+b_0 e^{-\left(\delta_0+\frac{1}{2D_e}\right)z}\right]+$$
$$+e^{-\frac{z}{2D_e}}\sum_{i=1}^{\infty}\frac{\Phi_i(t)}{P_i}K_i(z). \qquad (24)$$

Здесь

$$G_i^0=\int_{-1}^{0}\left[e^{\frac{z}{2D_e}}C_2^0(z)-a_0C_*e^{\delta_0 z}-\right.$$
$$\left.-b_0C_*e^{\delta_0 z}\right]K_i(z)dz=$$
$$=(1-C_*)\left[a_0\left(I_{1i}-\frac{2D_e\mu_i(1-\gamma)}{1+\gamma}I_{2i}\right)+\right.$$
$$\left.+b_0\left(I_{3i}-\frac{2D_e\mu_i(1-\gamma)}{1+\gamma}I_{4i}\right)\right]+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{Y_n(t_*)}{P_n}P_i,$$

$$\Phi_i^0 = \frac{\alpha(1-C_*)}{\alpha+\lambda}\Big[a_0\left(I_{1i} - \frac{2D_e\mu_i(1-\gamma)}{1+\gamma}I_{2i}\right) +$$
$$+b_0\left(I_{3i} - \frac{2D_e\mu_i(1-\gamma)}{1+\gamma}I_{4i}\right)\Big] + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{H_n(t_*)}{P_n}P_i.$$

Коэффициенты a_0, b_0 вычисляются по формулам (12), $K_i(z)$ – согласно (16), значения I_{ji} – по формулам (20), μ_i – корни уравнения (17). Также

$$G_i(t) = \frac{(\delta_{1i}+\alpha+\lambda)G_i^0 + \alpha R_f\Phi_i^0}{\delta_{1i}-\delta_{2i}}e^{\delta_{1i}t} -$$
$$-\frac{(\delta_{2i}+\alpha+\lambda)G_i^0 + \alpha R_f\Phi_i^0}{\delta_{1i}-\delta_{2i}}e^{\delta_{2i}t}$$
$$\Phi_i(t) = \frac{(\delta_{1i}+\psi_i+\alpha R_f)\Phi_i^0 + \alpha G_i^0}{\delta_{1i}-\delta_{2i}}e^{\delta_{1i}t} -$$
$$-\frac{(\delta_{2i}+\psi_i+\alpha R_f)\Phi_i^0 + \alpha G_i^0}{\delta_{1i}-\delta_{2i}}e^{\delta_{2i}t}. \quad (25)$$

Текущий расход ЗВ через нижнюю границу СДО q_{b2} рассчитывается по формуле

$$q_{b2} = C_*\left[a_0 e^{\left(\frac{1}{2D_e}-\delta_0\right)} + b_0 e^{\left(\frac{1}{2D_e}+\delta_0\right)}\right] +$$
$$+e^{\frac{1}{2D_e}}\sum_{i=1}^{\infty}\frac{G_i(t)}{P_i}K_i(-1). \quad (26)$$

Суммарное количество ЗВ, вынесенных фильтрационным потоком из СДО в течение периода $[t_*, t]$, составляет

$$Q_{b2} = \int_{t_*}^{t} q_{b2}d\tau = \left[a_0 e^{\left(\frac{1}{2D_e}-\delta_0\right)} + b_0 e^{\left(\frac{1}{2D_e}+\delta_0\right)}\right]C_*t +$$
$$+e^{\frac{1}{2D_e}}\sum_{i=1}^{\infty}\frac{L_i(t)}{P_i}K_i(-1), \quad (27)$$

где

$$L_i(t) = \frac{(\delta_{1i}+\alpha+\lambda)G_i^0 + \alpha R_f\Phi_i^0}{\delta_{1i}(\delta_{1i}-\delta_{2i})}\left(e^{\delta_{1i}t}-1\right) -$$
$$-\frac{(\delta_{2i}+\alpha+\lambda)G_i^0 + \alpha R_f\Phi_i^0}{\delta_{2i}(\delta_{1i}-\delta_{2i})}\left(e^{\delta_{2i}t}-1\right).$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экосистема "водоисточник–СДО–подстилающий грунт" не является автономной, а функционирует как составляющая более общей экосистемы, включающей приземный слой атмосферы, а также граничащие с водоисточником загрязненные территории и подстилающим грунтом геологические структуры. В связи с этим наиболее общий подход к решению экологических задач в данной системе должен включать детальное формализованное описание особенностей поведения ЗВ как в самой системе, так и в отмеченных сопредельных средах. Однако подобный подход с самых общих позиций к рассматриваемой экосистеме приводит к крайнему усложнению формулировки математических задач. Дальнейшие модельные исследования здесь теряют смысл прежде всего из-за нереальности получения необходимой исходной информации в полном объеме. Представленная выше математическая модель динамики ЗВ в СДО отражает только наиболее характерные стороны этого сложного явления, а лежащие в ее основе допущения существенно ограничивают область применения теоретического решения. На практике многим донным отложениям свойственна неоднородность и выраженный активный слой, консолидация которого приводит к росту мощности стабильного подслоя. В отдельных случаях важную роль играет взаимодействие ЗВ с динамической химической системой. В то же время долговременное влияние внешних по отношению к данной экосистеме компонентов и факторов природной среды обуславливает перестройку профилей концентрации ЗВ на нижнем участке СДО и снижение выноса ЗВ из СДО. Кроме того, оно приводит к постепенному увеличению общей мощности СДО и дополнительной аккумуляции ЗВ в нем вследствие преобладающего над взмучиванием осаждения взвешенных в водном потоке твердых частиц. Формирование активного слоя в принципе можно приближенно учесть, оставаясь в рамках реализованной выше модели, но с уже зависящими от t коэффициентами в граничном условии на верхней границе СДО. Снятие других допущений ведет к более существенному усложнению формулировки математической задачи распространения ЗВ и в значительной степени осложняет получение точного решения. Именно строгость полученного выше решения и сравнительно небольшое количество модельных параметров способствуют его использованию при обосновании методологии экспериментальных исследований и приближенных решений аналогичных задач. Результаты обстоятельного анализа закономерностей переноса ЗВ в СДО и их выноса в подстилающий грунт, выполненного на базе данного решения для разнообразных физико-химических свойств в СДО и водоисточнике, представлены во второй части работы.

1. *Huyakorn P. S., Lester B. H., Mercer J. W.* An efficient finite element technique for modeling transport

in fractured porous media. 1. Single species transport // Water Resour. Res.– 1983.– **19**.– P. 841–854.

2. *Hwang J. C., Chen C.-J., Sheikhoslami M., Panigrahi B. K.* Finite analytic solution two-dimensional groundwater solute transport // Water Resour. Res.– 1985.– **21**.– P. 1354–1360.
3. *Lerman A., Jones B. F.* Fluxes in a growing sediment layer // Am. J. Sci.– 1977.– **277**.– P. 25–37.
4. *Pickens J. F., Gillham R. W.* Finite element analysis of solute transport under hysteretic unsaturated flow conditions // Water Resour. Res.– 1980.– **16**.– P. 1071–1078.
5. *Лаврик В. И., Никифорович Н. А.* Математическое моделирование в гидроэкологических исследованиях.– Киев: Фитосоциоцентр, 1998.– 288 с.
6. *Al-Niami A. N., Rushton K. R.* Dispersion in stratified porous media: analytical solutions // Water Resour. Res.– 1979.– **15**.– P. 1044–1048.
7. *Rudakov D. V., Rudakov V. C.* Analytical modeling aquifer pollution caused by solid waste depositories // Ground Water.– 1999.– **37**.– P. 352–357.
8. *Toride N., Leij F. J., Genuchten van M. T.* A comprehensive set of analytical solutions for nonequilibrium solute transport with first-order decay and zero-order production // Water Resour. Res.– 1993.– **29**.– P. 2167–2182.
9. *Бреховских В. Ф., Габитов И. Р., Романов В. В.* Моделирование процессов массопереноса в донных отложениях // Водн. ресурсы.– 1991.– N 6.– С. 193–195.
10. *Batu V.* A generalized two-dimensional analytical solution for hydrodynamic dispersion in bounded media with the first-type boundary condition at the source // Water Resour. Res.– 1989.– **25**.– P. 1125–1132.
11. *Gillham R. W., Sudicky E. A., Cherry J. A., Frind E. O.* An advection-diffusion concept for solute transport in heterogeneous unconsolidated geological deposits // Water Resour. Res.– 1984.– **20**.– P. 369–378.
12. *Yates S. R.* An analytical solution for one-dimensional transport in porous media with an exponential dispersion function // Water Resour. Res.– 1992.– **28**.– P. 2149–2154.
13. *Jackman A. P., King T. Ng.* The kinetics of ion exchange on natural sediments // Water Resour. Res.– 1986.– **22**.– P. 1664–1674.
14. *Nicold R. M., Scheweich D.* Solute transport in porous media with solid-liquid mass transfer limitations: application to ion exchange // Water Resour. Res.– 1989.– **25**.– P. 1071–1082.
15. *Пачепский Я. А.* Математические модели физико-химических процессов в почвах.– М.: Наука, 1990.– 188 с.
16. *Hesslein R. H.* In situ measurements of pore water diffusion coefficients using tritiated water // Can. J. Fish. Aquat.– 1980.– **37**.– P. 545–551.
17. *Ullman W.J., Aller R. C.* Diffusion coefficients in nearshore marine sediments // Limnol. Oceanogr.– 1982.– **27**.– P. 552–556.
18. *Най П. Х., Тинкер П. Б.* Движение растворов в системе почва – растение.– М.: Колос, 1980.– 368 с.
19. *Li Y., Gregory S.* Diffusion of ions in seawater and in deep-sea sediments // Geohim. Cosmochim. Acta.– 1974.– **38**.– P. 703–714.
20. *Голосов С. Д., Крейман К. Д.* Теплообмен и термическая структура системы вода – донные отложения // Водн. ресурсы.– 1992.– N 6.– С. 12–18.
21. *Fand X., Stefan H. G.* Dynamics of heat exchange between sediment and water in a lake // Water Resour. Res.– 1996.– **32**.– P. 1719–1727.
22. *Бреховских В. Ф., Вишневская Г. Н.* Влияние микробентоса на массообмен на границе вода – донные отложения (Обзор) // Водн. ресурсы.– 1991.– N 3.– С. 326–333.
23. *Cornett R. J., Risto B. A., Lee D. R.* Measuring ground water transport through lake sediments by advection and diffusion // Water Resour. Res.– 1989.– **25**.– P. 1815–1823.