

На правах рукописи

Лю Юй

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СОЛЕОТВАЛОВ КАЛИЙНЫХ
КОМБИНАТОВ
НА ФИЛЬТРАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ВОДОВМЕЩАЮЩИХ ПОРОД
(на примере территории влияния 2-го Соликамского калийного
рудоправления)**

Специальность 25.00.07 – гидрогеология

**Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата геолого-минералогических наук**

Москва – 2012

Работа выполнена на кафедре гидрогеологии геологического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова

Научный руководитель: доктор геолого-минералогических наук, профессор

Алексей Владимирович Лехов

Официальные оппоненты:

доктор геолого-минералогических наук Ирина Васильевна Галицкая,
Институт геоэкологии Российской академии наук, заведующая отделом Гидро-
геоэкологии;

кандидат геолого-минералогических наук Григорий Евгеньевич Ершов,
Гидрогеологическая и геоэкологическая компания ГИДЭК, заместитель гене-
рального директора, главный научный сотрудник

Ведущая организация:

Комплексный научно-исследовательский и конструкторско-технологический ин-
ститут водоснабжения, канализации, гидротехнических сооружений и инженер-
ной гидрогеологии "НИИ ВОДГЕО"

Защита состоится 15 февраля 2013 г. в 14:30 на заседании диссертационного совета
Д 501.001.30 при Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова по
адресу: Москва, Ленинские горы МГУ, ГЗ, геологический факультет, аудитория 415

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке геологического факультета МГУ –
зона «А» главного здания, 6 этаж.

Отзывы на автореферат в 2-х экземплярах, заверенные печатью учреждения, просим
направлять по адресу: 119992, ГСП–2, Москва, Ленинские горы, МГУ, геологиче-
ский факультет, ученому секретарю диссертационного совета, профессору В.Н. Соко-
лову.

Автореферат разослан 15 января 2013 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор геолого-минералогических наук, профессор

В.Н. Соколов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Калийные производственные рудоуправления формируют комплексное влияние на геологическую среду. Долговременные хвостохранилища легко растворимых солей и пульп (солеотвалы, шламоохранилища, рассоло-сборники), являются источниками загрязнения подземных вод и геологической среды, что в дальнейшем должно приводить к преобразованию пустотного пространства пород вследствие физико-химических процессов взаимодействия постепенно разбавляющихся в подземных водах рассолов и растворимых минералов пород (карбонатов, сульфатов) и может инициировать своеобразный карстовый процесс. Кроме того, выемка полезного ископаемого приводит к образованию пустот в продуктивных пластах в виде системы штретков. Даже при обратной закладке прочностные свойства хвостов, закладываемых в штретки значительно хуже, чем у породы. Это приводит к образованию своего рода мульд оседания, причем осадки могут быть значительными и неравномерными, что, в свою очередь, приводит к образованию новых и раскрытию старых трещин. Совокупность всех процессов влияет и на земную поверхность, перестраивает пустотное пространство пород и изменяет распределение пористости и проницаемости (фильтрационно-емкостные свойства) массивов, ухудшает качество подземных вод и, в конечном итоге, поверхностных, принимающих разгружающиеся подземные воды.

На территории Верхнекамского месторождения калийных солей ВКМКС (Березниковско–Соликамский промышленный район) основным полезным ископаемым являются хлорид калия, содержащийся в руде в соизмеримых количествах с хлоридом натрия. Последний не может быть утилизирован в получаемых количествах и складывается в солеотвалы, имеющие значительную площадь 80-160 га с накоплением хлорида натрия к концу работы ГОК до 7-10 млн. тонн. При сроке работы ГОК 50-80 лет время полного растворения солеотвала около 500 лет. За это время рассол, поступающий из него в геологическую среду с концентрацией более 320 г/л, сформирует большое тело загрязненной воды. После растворения солеотвала загрязненная вода будет еще долгое время находиться в породах. Поэтому время влияния солеотвала больше времени его существования. Шламоохранилища, так же сопутствующие калийному производству, имеют соизмеримые площади и из них поступает рассол около

160 г/л. Срок распреснения шламохранилищ меньше – около 200 лет, время распреснения подземных вод примерно то же, что и загрязнения.

Соленые подземные воды имеют большую ионную силу и могут растворять имеющиеся в породах карбонатные и сульфатные минералы в виде заполнителей трещин и в составе пород. Это в свою очередь будет приводить к возрастанию пористости и проницаемости трещиноватых водовмещающих пород, изменению скорости миграции солей. В рассматриваемых условиях это может привести к ухудшению защитных свойств надсолевой толщи, препятствующей поступлению подземных вод на кровлю соляной залежи.

Цель работы – разработка методики моделирования трансформаций трещинного пространства геологической среды при воздействии поступающих с поверхности рассолов хлорида натрия.

В задачи исследования входили:

- Анализ литературных данных по проблемам влияния солеотвалов на подземные воды, рассолов на растворимость минералов, методикам моделирования геомиграционных процессов и обоснования моделей;
- Определение количественного распределения растворимых минералов в разных видах – в составе пород и заполнителя трещин;
- Построение геомиграционной схемы надсолевой толщи в окрестности объекта на основе анализа и обобщения фактических данных;
- Разработка метода моделирования миграции подземных вод с физико-химическими обменными процессами и трансформацией трещинного пространства;
- Математическое моделирование распространения рассолов и изменения пористости и проницаемости пород надсолевой толщи;
- Анализ возможностей альтернативных простых методов моделирования этих процессов.

Базисный объект исследований. Территория влияния 2-го Соликамского калийного производственного рудоуправления (СКПРУ-2) на подземные воды. Выбор этого объекта определяется не только наличием фактического материала по гидрогеологическим условиям, но и расположенными примерно в 15 км к северо-западу

створами скважин с детальными исследованиями минералов заполнителей трещин, проведенными Л.В. Мигуновым [1977] в 1962-1966 годах при работах по инженерным изысканиям для Верхнекамской ГЭС. Развитая им теория инфильтрационной минеральной зональности надсолевых толщ используются в этой работе. Рассмотренное геологическое строение и гидрогеологические условия, в той или иной мере, присущи территориям всех калийных рудоуправлений Березниковско-Соликамского промрайона.

Фактический материал. Геологическое строение и гидрогеологические условия объекта охарактеризованы более чем сотней скважин различного назначения (разведочные, структурные, гидрогеологические). Использовались результаты регулярных наблюдений за режимом уровней и химическим составом вод проводящиеся с 1987 года. Вследствие недостаточности данных на объекте о детальном распределении проницаемости по вертикали, привлекались данные расходомерии по скважинам территории ВКМКС. Характеристика и количественная оценка минерального заполнителя трещин выполнена на основе результатов кандидатской диссертации Л.В. Мигунова [1977].

Методы исследования. Основным методом исследования является математическое моделирование миграции подземных вод с учетом равновесных физико-химических процессов взаимодействия подземных вод и пород. Моделирование осуществлялось при помощи программного комплекса PMWin (Chiang W.H.), включающего необходимые для этого программы моделирования фильтрации (MODFLOW) и моделирования массопереноса с физико-химическими процессами в многокомпонентной гидрогеохимической системе (PHТ3D). При реализации модели взаимодействия была дополнена и откорректирована база термодинамических параметров, используемая PHТ3D. Для учета эффектов, возникающих за счет высокой плотности поступающего рассола в однокомпонентной постановке использовалась программа MT3DMS и SEAWAT. Кроме того, для выбора наилучшего метода решения задач с переменной плотностью фильтрующихся растворов проводилось сравнение различных методов представления этого процесса с использованием других программ.

Для переопределения значений фильтрационно-емкостных свойств при растворении-осаждении минерального заполнителя трещин использовались собственные

алгоритмы, развитые в данной работе и реализуемые при помощи электронной таблицы Excel. Модель строилась на основе параметров полученных при верификации геофильтрационных моделей и при анализе литературных данных, последнее было особенно необходимо для определения процессов массообмена подземных вод и пород. Дополнительные процедуры обработки фактического материала, построения геометрии области моделирования и взаимоотношений слоев выполнялись методами интерполяции на соответствующем математическом обеспечении.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Разработана методика моделирования миграции подземных вод с учетом равновесных физико-химических процессов (растворения и осаждения минералов) и изменения во времени фильтрационно-емкостных свойств пород надсолевой толщи.
2. Для моделирования изменения пористости и проницаемости трещиноватых пород под действием техногенных рассолов необходимо начальное условие – природное распределение концентраций компонентов подземных вод, формируемое моделированием геомиграции до стабилизации полей концентраций, в случае данной работы в течение 1000 лет.
3. Под действием фильтрации рассола из солеотвала через первые десятки лет в верхней части пород, содержащих гипс в виде заполнителя трещин мощностью 4-8 м, гипс полностью исчезает. На кровле залегающего ниже слоя гипсов происходит растворение приводящее к резкому увеличению горизонтальной проницаемости. Размер области растворения по горизонтали около 2 км. Этот процесс идет до конца периода засоления подземных вод в этой части пород – около 500-700 лет.
4. Для решения задач с переменной плотностью потока от сосредоточенного источника применимы методы, основанные на конвективно-дисперсионном массопереносе. Методы, применяющиеся для моделирования миграции несмешивающихся разноплотностных жидкостей, дают результаты, не согласующиеся с фактическими наблюдениями.
5. Для прогноза изменения фильтрационно-емкостных параметров трещиноватых пород возможно ограниченное применение более простого моделирования миграции рассолов с дополнительными расчетами растворения минерального заполнителя трещин. Однако это является крайне трудоемкой задачей, практически вырождаю-

щейся в моделирование многокомпонентной миграции с физико-химическими процессами для достижения приемлемой точности.

Практическая значимость. В работе дан прогноз миграции соленых вод от солеотвала в трех постановках: без учета переменной плотности, с добавлением физико-химических равновесных процессов и изменением проницаемости и пористости пород, с учетом переменной плотности. Показана высокая вероятность сохранения водозащитных свойств надсолевой толщи.

Личный вклад автора. Начиная с 2006 года в рамках студенческих работ, а затем в аспирантуре автор исследует процессы, происходящие на территориях воздействия хвостового хозяйства калийных комбинатов, преимущественно Соликамских. Автором, на основе анализа фактической и опубликованной информации, была построена геомиграционная схема территории исследований, созданы теоретическое и методическое обоснование моделирования миграции подземных вод с постоянно изменяющимися фильтрационно-емкостными свойствами. Выполнены все работы по отладке моделей и собственно многовариантному моделированию рассматриваемых процессов в нескольких постановках решения задачи.

Обоснованность и достоверность научных результатов базируется на анализе публикаций по тематике работы, анализе и обработке обширного фактического материала, проверке используемых методов моделирования сопоставлением с другими, многочисленным вариантным математическим моделированием исследуемых процессов.

Защищаемые положения

1. Миграция рассолов от накопителей отходов калийного производства вызывает растворение и осаждение карбонатных и сульфатных минералов пород и заполнителя трещин за счет переменной ионной силы растворов, приводя к изменению пористости и проницаемости. Формируются локальные области соизмеримые с источником рассолов со значительным, на несколько порядков, повышением проницаемости в местах резкой смены гидрогеохимических условий (контакты пород различного состава, уровень подземных вод) и повышенных скоростей фильтрации.
2. Для прогноза миграции рассолов и трансформации геологической среды необходимо использовать модели многокомпонентной миграции. Трансформация среды под

действием рассолов поступающих сверху должна рассчитываться на основе расщепления уравнений геомиграции многокомпонентных растворов по физическим процессам в циклической последовательности решения задач геофильтрации, массопереноса, физико-химических преобразований и пересчета пористости и проницаемости с временным шагом, определяемым шагом массопереноса. Учет переменной плотности подземных вод приводит к увеличению глубины проникновения рассолов от солеотвала и ускорению процессов растворения в пределах 10-20 %.

3. Основное увеличение проницаемости происходит в зоне загипсованных пород мощностью 4-8 м над поверхностью гипсового зеркала и на самой кровле гипсового зеркала под солеотвалом и ниже по потоку подземных вод на протяжении 2 км. Это приводит к увеличению глубины проникновения рассолов в надсолевую толщу и к изменению путей миграции рассолов в направлении основной дрены – р. Камы с постепенным уменьшением скорости растворения. Защитные свойства надсолевой толщи над кровлей соляного зеркала сохраняются при отсутствии крупных вертикальных трещин, вызванных потенциально неравномерным оседанием пород над рудником.

Апробация работы. Основные положения диссертационной работы были изложены в пяти публикациях, в том числе в двух статьях в журналах, рекомендованных ВАК, доложены на международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов» (2009 г. и 2011 г.), на научной конференции «Комплексные проблемы гидрогеологии» (2011 г.).

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы из 102 наименований, содержит 73 рисунка и 5 таблиц. Общий объем работы 142 страницы.

Благодарности. Диссертационная работа выполнена под научным руководством д.г.-м.н., профессора А.В. Лехова, которому автор выражает особую признательность за постоянную помощь и тщательное руководство. Автор благодарен д.г.-м.н., профессору К.Е. Питьевой за ценные советы и предоставление необходимых материалов, д.ф.-м.н., профессору В.М. Конюхову за предоставление программы FILTRA. Автор признателен д.г.-м.н., профессору С.П. Позднякову, к.г.-м.н., доценту Р.П. Кочетковой, и всем преподавателям и сотрудникам кафедры гидрогеологии гео-

логического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова за поддержку, ценные замечания и советы, по мере возможностей учтенные автором при написании работы.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

1. ХАРАКТЕРИСТИКА ОБЪЕКТА ИССЛЕДОВАНИЙ

Объект детальных исследований находится на территории Верхнекамского месторождения калийных солей (ВКМКС) в северной части Пермского края. Большой вклад в изучение геологического строения территории месторождения солей внесли Артемьев А.В., Белоликов А.И., Вахрамеева В.А., Грайфер Б.И., Горецкий Г.И., Иванов А.А., Копнин В.И., Кудряшов А.И., Мигунов Л.В., Сапегин Б.И., и др. Исследованиями подземных вод территории ВКМКС занимались Белоликов А.И., Бельтюкова Г.В., Иконников Е.А., Мигунов Л.В., Мироненко В.А., Роткин С.М., Часовникова Е.В., Шестов И.Н., Шимановский Л.А., Ходьков А.Е..

Территория, потенциально взаимодействующая с комплексом хвостового хозяйства СКПРУ-2 (далее солеотвал), примерно 10×10 км², расположена на левом берегу Камы (Камского водохранилища). Прибрежная часть Камского водохранилища местами заболочена, много различных озер (см. рис. 1). Кроме того есть и т.н. техногенное озеро, образовавшееся в русле р. Поповка в 1991 году.

В работе рассматривается только толща пород над т.н. соляным зеркалом. Сама соляная залежь считается абсолютным водоупором. Сверху вниз выделяют водоносные горизонты и комплексы:

Четвертичный водоносный комплекс (Q) включает водоносный горизонт аллювиальных отложений Камы и крупных притоков (aQ) сложенный в нижних частях песками мощностью до 30 м. Слабопроницаемый горизонт элювиально-делювиальных глинистых образований (eQ+dQ). В приосевой части Соликамского вала мощность глинистых образований, вероятно карстового происхождения, до 50 м.

Слабоводоносный локально водоносный шешминский комплекс ($P_1\check{s}\check{s}$) или пестроцветная толща (ПЦТ), развитая в западной и восточной частях территории исследований. Представлена переслаиванием песчаников, алевролитов, аргиллитов. Горизонтальный коэффициент фильтрации около 1 м/сут, вертикальный $3 \cdot 10^{-4}$ м/сут.

Верхнесоликамский водоносный горизонт (P_{1sl_2}) или терригенно-карбонатная толща (ТКТ), развита практически повсеместно, мощностью до 80 м. Проводимость распределена контрастно от 30-60 до 1000 м²/сут в зависимости от положения места опробования относительно рек. По расходомерии скважин выделяются проницаемые зоны мощностью меньше шага опробования (< 1 м).

Нижнесоликамский водоносный горизонт (P_{1sl_1}) или соляно-мергельная толща (СМТ) развит повсеместно, мощностью бессолевого части 80 м. Реально горизонтом является верхняя часть СМТ. В ней можно выделить два слоя с мощностями около 10 м, разделенные 30-и метровым водупором, формирующие почти всю проводимость. Проводимость распределена контрастно, изменяется от десятых до первых десятков м/сут.

Характерной особенностью данной территории является ложбина подземного стока, расположенная параллельно Каме восточнее солеотвала, сформировавшаяся за счет карстового процесса. Разгружается она у д. Родники мощными источниками.

Питание подземных вод происходит на всей площади инфильтрацией атмосферных осадков. Разгрузка преимущественно в Каму и ее крупные притоки. Химический состав вод от пресных гидрокарбонатно-кальциевых с минерализацией 0,3 г/л до солоноватых и рассолов в нижней части разреза над соляным зеркалом.

В трещинах пород содержатся вторичные минералы, распределение которых, по Л.В. Мигунову, определяется гидрогеологическими условиями питания и разгрузки подземных вод надсолевой толщи. Сверху вниз: зона гидроокисей железа и марганца, зона кальцита, зона без заполнения, зона гипса и зона галита. В верхней части зоны гипса присутствует т.н. гипсовое зеркало – слой почти чистого гипса мощностью 1-2 м, ниже также встречаются прослои или линзы гипса. Границы зон заполнителей трещин не совпадают со стратиграфическими. Гипсовое зеркало можно рассматривать как верхнюю границу зоны замедленного водообмена.

2. ОБОСНОВАНИЕ ГИДРОГЕОЛОГИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Для проведения моделирования влияния рассолов солеотвала на качество подземных вод и геологическую среду построена профильная модель поперек вытянутого вдоль Камы солеотвала. Основанием этой модели являлась шестислойная плановая модель, на которой после калибровки получены распределения коэффициентов вер-

тикальной и горизонтальной фильтрации и инфильтрации. Слои модели соответствовали: 1) аллювиальному водоносному горизонту; 2) суммарной толще элювиальных и карстовых глинистых, шешминских пород; 3) терригенно-карбонатной толще; 4) разделяющему слабопроницаемому слою верхней части СМТ; 5) водоносному горизонту СМТ; 6) нижней слабопроницаемой части СМТ. Нижний слой необходим для задания рассолов над соляным зеркалом.

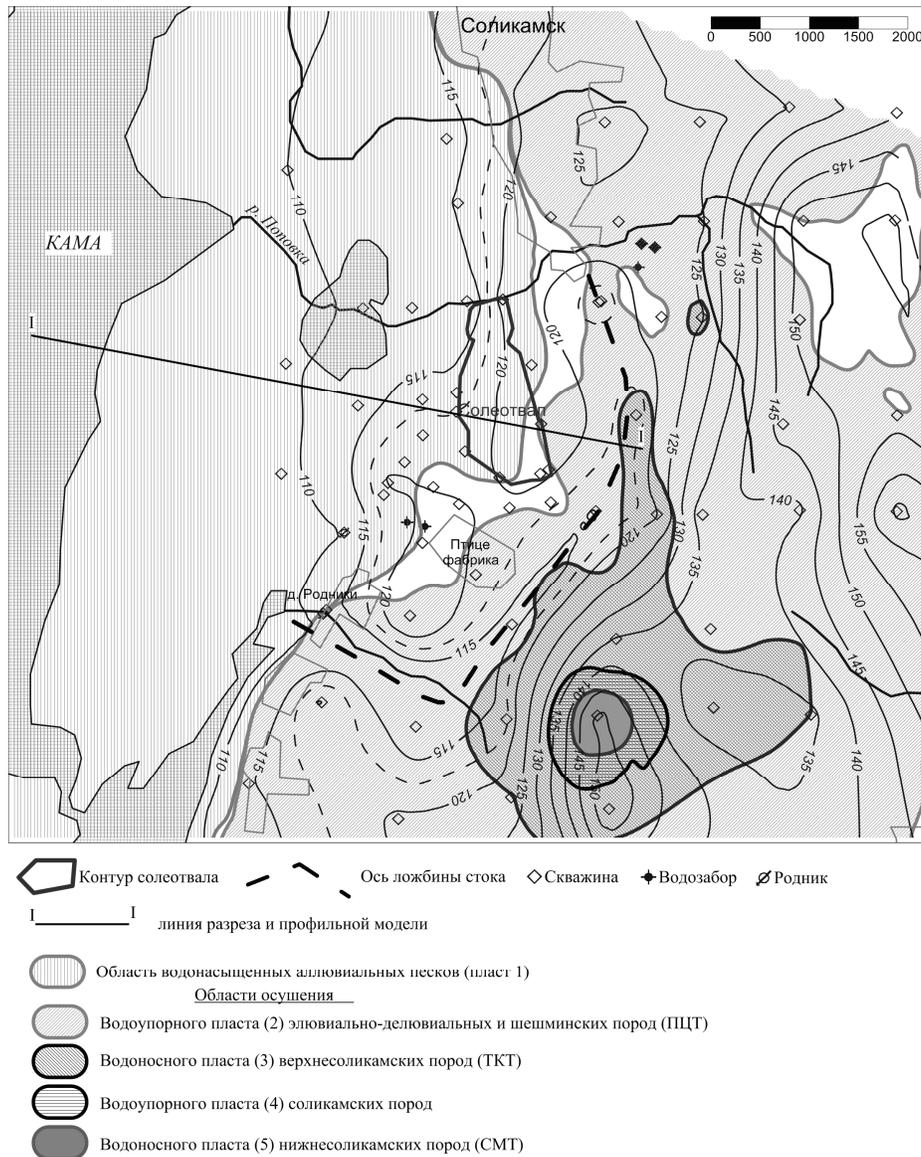


Рис. 1. Карта обобщенных для соликамских водоносных горизонтов гидроизогипс и области осушения в водоносных и водупорных пластах

Область моделирования соответствовала территории замкнутого баланса подземных вод. Внешние границы модели непроницаемые, на верхней задается инфильтрация по среднееголетним значениям модуля подземного стока. Нижняя граница также непроницаема. На территории Камского водохранилища задается условие тре-

тьего рода. Солеотвал задается областью повышенной инфильтрации 0,0012-0,0014 м/сут с концентрацией соли 320 г/л. Начальная концентрация соли в гидрогеологической системе определяется решением задачи миграции без солеотвала до стабилизации поля концентрации соли.

В профильной модели количество слоев увеличено до 75 и сделано более точное распределение фильтрационных свойств. Западной границей является наиболее глубокое место русла Камы, восточной – середина ложбины стока. Нижняя, восточная и западная границы модели непроницаемы. На восточной границе в месте наибольшей проницаемости ложбины стока в ТКГ задается условие первого рода (122м). На верхней границе задана инфильтрация, на территории современной поймы задано условие постоянства напоров (болота), под водохранилищем задано условие линейной связи расхода и разности напоров подземных вод и водохранилища.

Для моделирования многокомпонентной геомиграции сформулирована закрытая гидрогеохимическая система, включающая:

Твердые фазы (минералы) – кальцит (CaCO_3), гипс ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$), ангидрит (CaSO_4), галит (NaCl);

Газовую фазу – углекислый газ CO_2 для создания состава инфильтрационных вод на верхней границе модели;

Набор компонентов раствора – Ca^{2+} , Na^+ , H^+ , OH^- , Cl^- , SO_4^{2-} , HSO_4^- , HCO_3^- , CO_3^{2-} , CaCO_3^0 .

Для расчета химических равновесий использовалась модель активности растворенных веществ К. Питцера, которая имеет ограниченное количество комплексных соединений, в отличие от моделей построенных на теории Дебая-Хюккеля. В частности, не содержит комплекса CaSO_4^0 . Выбор модели активности сделан сравнением с известными экспериментальными данными (рис. 2). Растворимость кальцита в зависимости от концентрации NaCl имеет аналогичный вид.

Термодинамическое моделирование химических равновесий в зависимости от температуры и давления показало возможность использования температуры 5°C и давления 1 бар с погрешностью 2-3 %.

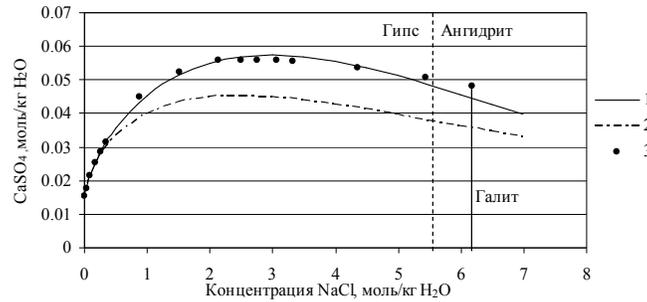


Рис. 2. Зависимость равновесной концентрации CaSO_4 от концентрации NaCl при температуре 25°C : 1 – модель с базой параметров Питцера; 2 – модель со стандартной базой параметров PHREEQC; 3 – кривая по экспериментальным данным [Штернина и Фролова, 1949]

3. ВОПРОСЫ МЕТОДИКИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ СОЛЕОТВАЛА НА ГЕОЛОГИЧЕСКУЮ СРЕДУ

3.1. ОБЩАЯ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Общее решение миграционной задачи определяется как последовательность решения частных задач по принципу расщепления основного уравнения миграции по физическим процессам.

1. моделирование распределения скоростей фильтрации, решается как задача получения поля напоров (приведенных напоров или фильтрационных сил) с помощью программы моделирования геофильтрации;
2. моделирование массопереноса подземными водами, результатом является поле концентраций доминирующего "нейтрального" мигранта (NaCl), при этом доля его концентрации от граничной определяет разбавление поступающего с границы раствора;
3. получение распределения плотностей растворов в области моделирования на основе решения задачи массопереноса, плотность раствора хлорида натрия связана практически линейной зависимостью с его концентрацией;
4. моделирование физико-химических взаимодействий в системе "подземная вода – порода", решается программой термодинамического моделирования в равновесной или неравновесной постановке, результатом является набор полей концентраций веществ раствора, обменного комплекса и минералов;
5. расчет изменения порового пространства пород за счет растворения-осаждения минералов, определяющего изменения проницаемости пород, решается на основании результатов моделирования физико-химических процессов.

Перед переходом на пункт 4 производится несколько циклов последовательного выполнения пунктов 1-3 на один и тот же шаг времени до получения не изменяющегося поля скоростей фильтрации.

Если для задач фильтрации и миграции необходимы по 2-3 параметрам (поля распределения их для всей области моделирования), то для задачи физико-химических взаимодействий уже несколько десятков параметров, а для последней задачи трансформации пустотного пространства еще около десяти. Все это определяет большое время счета и диктует необходимость использования не только современного программного обеспечения, но и компьютеров, позволяющих вести параллельные вычисления с соответствующими модификациями программ. Именно поэтому для методических проработок выбрана профильная модель.

3.2. ВЫБОР МОДЕЛИ МИГРАЦИИ РАСТВОРОВ

На тестовой модели, примерно соответствующей основной профильной, сделано сравнение двух разных подходов: 1) рассол представляется тяжелой жидкостью не смешивающейся с природными пресными водами; 2) тяжелый рассол смешивается с пресными водами при гидродинамической дисперсии. Применение модели миграции рассола, перемешивающегося с подземными водами, показало лучшее соответствие известным фактическим распределениям концентрации NaCl в надсолевой толще.

3.3. ОСОБЕННОСТИ ПРОЦЕССА РАСТВОРЕНИЯ ВТОРИЧНЫХ МИНЕРАЛОВ

Оценка длины пути насыщения гипсом в трещинах зоны загипсованности при температуре 5 °С и модельных скоростях фильтрации сделана на основании стационарной модели массоотдачи трещины-щели [Лехов, 2010]

$$\frac{C_m - C}{C_m - C_0} = e^{-kx/q} = 0,99 \rightarrow x = 4,6 \frac{q}{k},$$

где C , C_0 , C_m – текущая, граничная и равновесная концентрации растворенного гипса, k – коэффициент скорости растворения, q – единичный расход трещины. В результате путь насыщения оказался менее 1 мм. Следовательно до исчерпания заполнителя трещин преимущественно будет возрастать горизонтальная проницаемость.

Влияние вторичного гипса в порах блоков пород оценено на основании решения [Лебедев и Лехов, 2011]

$$C = C_0 + \frac{x}{q} \sqrt{\rho n D (C_m - C_0)} \cdot \frac{1}{\sqrt{2t}};$$

где ρ – плотность гипса, n – пористость блока пород, D – коэффициент диффузии в блоке. При 5 °С через год концентрация сульфата кальция в трещине становится менее 10 % от равновесной, а через 10 лет менее 2 %. Поэтому на данной стадии моделирования многокомпонентной миграции подземных вод можно полагать этот процесс мало существенным.

3.4. ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ СТРУКТУРЫ ТРЕЩИНОЙ СРЕДЫ

Трещинная среда полагается состоящей из трех систем трещин-щелей. Одна согласна напластованию (горизонтальная) и две вертикальных, перпендикулярных между собой (рис. 3).

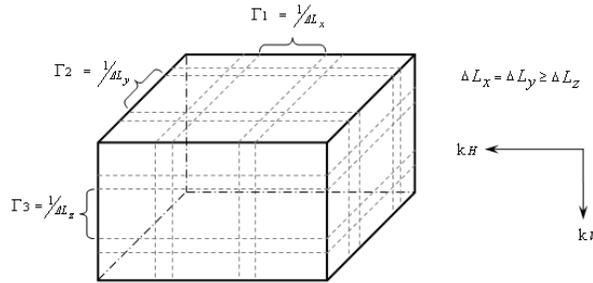


Рис. 3. Схема расположения трещин в элементарном объеме породы

Для расчета пористости и проницаемости используются теоретические разработки Е.С. Ромма [1966]. На основании формул для вертикальной k_V и горизонтальной k_H проницаемости по известным значениям коэффициентов фильтрации определяются раскрытия трещин

$$b_V = 3 \sqrt{\frac{6\nu k_V}{\Gamma_V g}} \quad b_H = 3 \sqrt{\frac{6\nu(2k_H - k_V)}{\Gamma_H g}};$$

где ν – кинематическая вязкость (0,131 м²/сут при 5 °С); g – ускорение свободного падения (7,32·10¹⁰ м/сут²); Γ_V , Γ_H – густоты вертикальных (5 м⁻¹) и горизонтальных трещин (10 м⁻¹). Значения густоты определены из литературных данных и описаний кернов скважин.

Новые значения пористости и проницаемости на шаг времени пересчета параметров рассчитываются по значениям на начало шага (индекс 1) и изменению массы минерала заполнителя трещин ΔM из единичного объема породы

$$\Delta n = \frac{A \cdot (N_1 - N_2)}{\rho} = 2\Gamma_v \Delta b_v + \Gamma_n \Delta b_n;$$

$$k_{v2} = \frac{\Gamma_v (b_{v1} + \Delta b_v)^3 g}{6v}; \quad k_{n2} = \frac{k_{v2}}{2} + \frac{\Gamma_n (b_{n1} + \Delta b_n)^3 g}{12v}.$$

3.5. АЛГОРИТМ ПЕРЕСЧЕТА ИЗМЕНЕНИЙ КОНЦЕНТРАЦИИ ЗАПОЛНИТЕЛЯ В ПОРОВО-ТРЕЩИННОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Пористость породы n определяется как сумма пористости блока $n_{\text{блок}}$ и трещин $n_{\text{трещ}}$. Суммарная пористость взята из литературных данных для ТКТ 0,08 и для СМТ 0,02. Расчетная пористость трещин по коэффициентам фильтрации в диапазоне 0,001-0,003.

Концентрации минералов определяются так же в виде суммы концентрации в трещинах (заполнитель) и в порах блоков или, если минерал породообразующий, то в матрице блока.

$$N = \frac{M_{\text{минер}}}{V_{\text{пород}}} = \frac{M'_{\text{минер}} + M_{\text{трещ}}}{V_{\text{пород}}} = N' + N_{\text{трещ}};$$

здесь N' – концентрация минералов в блоках пород; $N_{\text{трещ}}$ – концентрация минералов в трещинах пород; $M_{\text{минер}}$, $M'_{\text{минер}}$, $M_{\text{трещ}}$ – масса суммарная, блоков и заполнителя трещин в объеме пород $V_{\text{пород}}$.

Растворение предполагается происходящим в два этапа: 1) растворение заполнителя трещин с плотностью растворяющейся части, равной плотности минерала; 2) растворение матрицы блока пород, с плотностью минерала, соответствующей его концентрации в породе. Если матрица пород не содержит растворяющегося минерала, то раскрытие трещины имеет предельное значение, оцениваемое по коэффициентам фильтрации для зоны пород без заполнителя трещин.

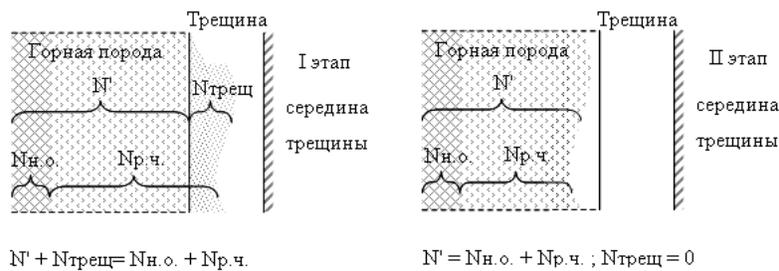


Рис. 4. Схема растворения минералов

3.6. ИЗМЕНЕНИЕ ПРОНИЦАЕМОСТИ ГЛИНИСТЫХ ПОРОД ПРИ ФИЛЬТРАЦИИ РАССОЛОВ

Рядом исследователей (В.М. Павилонского, Н.П. Скворцова и др.) на основании экспериментальных работ показана зависимость проницаемости глинистых пород от концентрации и состава фильтрующихся электролитов. На основании экспериментов [Голдберг и Скворцов, 1986] и справочных данных по кинематической вязкости таких растворов сделана экстраполяция результатов и рассчитаны кратности увеличения коэффициента фильтрации. Ожидаемые увеличения коэффициентов фильтрации в 1,5-4 раза для монтмориллонитовых глин, для каолиновой в 2-2,5 раза. В некоторых работах отмечается возможное увеличение примерно на порядок.

4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СОЛЕОТВАЛА НА ГЕОЛОГИЧЕСКУЮ СРЕДУ С УЧЕТОМ РАСТВОРЕНИЯ-ОСАЖДЕНИЯ ЗАПОЛНИТЕЛЯ ТРЕЩИН

Моделирование выполнялось на базе имеющихся математических моделей системы программ Processing Modflow [PMWin-8, 2011]. Для моделирования геофильтрации использовалась программа MODFLOW-2000, массопереноса в однокомпонентной постановке (только одна нейтральная соль) – MT3DMS, массопереноса с переменной плотностью – SEAWAT, миграции сложного раствора с равновесными физико-химическими взаимодействиями с минералами пород – PHT3D. К сожалению, программа миграции сложного раствора с переменной плотностью и физико-химическими взаимодействиями PHWAT [Mao et al., 2006] не имеет устойчивого алгоритма и построена на первой версии PHT3D, так же на дающей устойчивых решений применительно к рассматриваемой задаче.

Для решения задач трансформации порового пространства и проницаемости под влиянием растворения-осаждения минералов использовалась электронная таблица MS Excel с введенными процедурами расчетов и возможности ввода-вывода основной системы программ PMWin. Алгоритмы расчетов приведены в разделе 3.

4.1. ВЫБОР ШАГОВ ПО ВРЕМЕНИ

Проведено исследование возможности увеличения шага по времени для расчета физико-химических равновесий относительно шага массопереноса. Шаг времени для уравнения конвективного переноса является определяющим и рассчитывается на основании критерия Куранта – отношения пути массопереноса за один временной шаг к размеру блока модели, который должен быть меньше единицы, что показывает, что частица воды, стартующая с границы блока не выходит из него за этот временной шаг.

В программах моделирования обычно используется минимальный возможный временной шаг массопереноса по всей области моделирования, который соответствует местам самых высоких скоростей потока. В данной работе эти области – примыкающие к местам сосредоточенной разгрузки потока. Для интересующей нас области можно было бы использовать существенно больший временной шаг при сохранении выполнимости критерия Куранта.

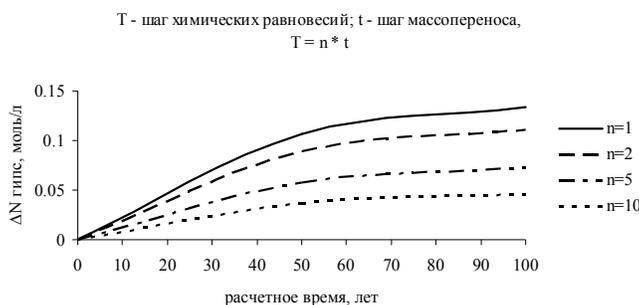


Рис. 5. График зависимости шагов химических равновесий и шагов массопереноса

Расчеты на профильной модели объекта с разными соотношениями временных шагов термодинамического моделирования и массопереноса показали наилучшим вариантом их равенство (рис. 5). Необходимость выявления этого соотношения диктуется и возможностью минимизации общего времени моделирования, определяемого в основном именно блоком термодинамического моделирования.

4.2. МОДЕЛИРОВАНИЕ НАЧАЛЬНОГО УСЛОВИЯ

Для создания природного распределения концентраций всех веществ в твердой и жидкой фазах – начального условия для задачи миграции рассолов из солеотвала – было проведено моделирование естественной обстановки (без солеотвала). Критерием окончания моделирования являлась стабилизация полей концентраций всех рассматриваемых веществ в подземных водах. Для концентраций минералов должна была обозначиться устойчивая тенденция растворения или осаждения. Для данной модели это время оказалось несколько меньшим 1000 лет. На участке разгрузки подземных вод в Каму сформировались купола повышенных концентраций NaCl и CaSO₄. Кальцит растворяется в у поверхности и осаждается под руслом Камы и на поверхности зоны загипсованности.

4.3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ НА СРОК ДЕЙСТВИЯ СОЛЕОТВАЛА

4.3.1. МОДЕЛЬ БЕЗ ИЗМЕНЕНИЯ ФИЛЬТРАЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ

Выполнено моделирование геомиграционной задачи на 500 лет с постоянными параметрами для определения шагов по времени пересчета пористости и коэффициента фильтрации. Определилась тенденция увеличения концентрации кальцита на поверхности зоны загипсованности, при сильном растворении непосредственно под солеотвалом. Зона загипсованности над солеотвалом теряет гипс заполняющий трещины через 50 лет и значения коэффициента фильтрации стабилизируются. На основании поинтервальных откачек [Мигунов, 1977] из зоны без заполнителя трещин предельными полагаются коэффициент горизонтальной фильтрации 10 м/сут и вертикальной 0,1 м/сут. На поверхности гипсового зеркала образуется щель с раскрытием первые миллиметры, что может увеличить горизонтальный коэффициент фильтрации в тысячи раз. По имеющимся данным определений коэффициентов фильтрации в аналогичных условиях выбран максимальный коэффициент фильтрации 50 м/сут (средний из диапазона), определяемы не только растворением, но и нагрузкой вышележащих пород и неравномерностью растворения поверхности гипса. Под солеотвалом на поверхности гипсового зеркала выбрана цепочка контрольных блоков для сравнения различных вариантов.

4.3.2. МОДЕЛЬ С ИЗМЕНЯЮЩИМИСЯ ФИЛЬТРАЦИОННЫМИ ПАРАМЕТРАМИ

Моделирование с пересчетом параметров через 50 лет показало увеличение глубины проникновения рассола и изменение конфигурации изолиний концентрации (рис. 6). На поверхности гипсового зеркала формируется локальная область длиной 1,5-2 км с повышенными коэффициентами фильтрации (рис. 7)

4.3.3. ВЛИЯНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ПРОНИЦАЕМОСТИ ГЛИНИСТЫХ ПОРОД

Увеличение коэффициентов фильтрации только для глинистых пород в 10 раз (повышение контрастности результата) сделано на основании распределения концентрации растворенной соли NaCl, с точностью необходимой для данной задачи наступающее через 50 лет. В результате повышается роль горизонтальной миграции и увеличиваются массовые расходы соли в реку на 10 %. Растворение гипса несколько интенсифицируется.

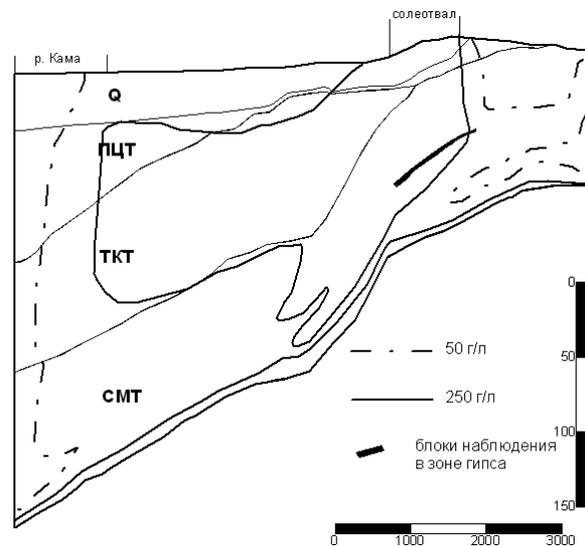


Рис. 6. Распределение концентрации NaCl на 150 лет в задаче с переменными параметрами.

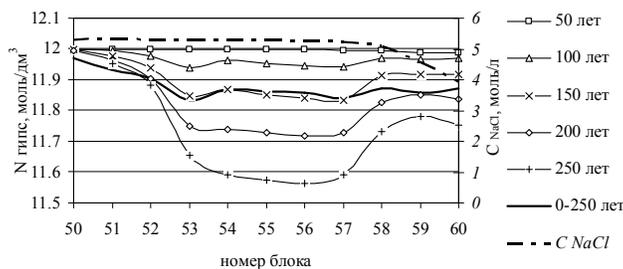


Рис. 7. Изменение концентрации гипса по блокам наблюдения (50-60) в зоне гипса при пере-
чете параметров и сравнение с моделью с постоянными параметрами (0-250 лет)

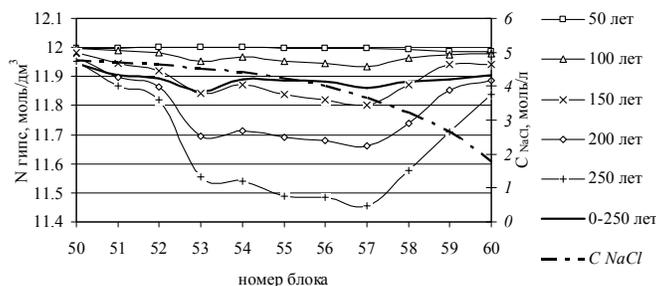


Рис. 8. Изменение концентрации гипса по блокам наблюдения (50-60) в зоне гипса при пере-
чете параметров после увеличения проницаемости глинистых пород (0-250 лет)

Выводы:

1. Длительная фильтрация рассолов в породах имеющих растворимый наполнитель трещин (гипс, кальцит) приводит к изменению их пористости и проницаемости. Зона загипсованных пород мощностью 4-8 м над гипсовым зеркалом полностью лишается гипса наполнителя трещин на длине 2000 м.

2. В кровле терригенно-карбонатной толщи под солеотвалом и вблизи него формируется узкая зона отсутствия заполнителя трещин – кальцита.
3. На поверхности гипсового слоя может сформироваться узкая зона сильного повышения пористости и проницаемости в полторы тысячи раз с 0,03 до 50 м/сут. Последняя величина взята как предельная с учетом компенсации формирующейся пустоты горным давлением и неравномерностью растворения по поверхности слоя вследствие неоднородности условий растворения.
4. Возможное увеличение проницаемости глинистых пород при фильтрации рассолов так же приводит к неравномерному увеличению проницаемости загипсованных пород, увеличивая поток растворителя – рассола от солеотвала в месте растворения.
5. При изменении проницаемости глинистых отложений под влиянием рассолов в областях, находящихся ближе к основной дрене, гипс растворяется интенсивнее. Это определяется локальным повышением коэффициентов фильтрации в области пород, расположенной под солеотвалом, увеличивающих миграцию к основной дрене.
6. Скорость распространения рассолов при увеличении проницаемости и пористости пород увеличивается, что приводит к ускорению миграции соли и увеличению разгрузки ее в основную дрину по сравнению с вариантами постоянных пористости и проницаемости.
7. При учете изменении фильтрационных параметров в прогнозе распространения рассолов из солеотвала, глубина их проникновения в соляно-мергельную толщу увеличивается и наиболее концентрированная часть ореола практически достигает соляного зеркала.

5. МОДЕЛИРОВАНИЕ АЛЬТЕРНАТИВНЫМИ СПОСОБАМИ

Моделирование геомиграции при помощи программы PH3D нуждается в достаточно большом наборе параметров физико-химического взаимодействия имеет невысокую скорость счета и не учитывает переменную плотность растворов. Проводится сравнение результатов полученных применением моделей миграции с учетом (программа SEAWAT) и без учета (программа MT3DMS) переменной плотности подземных вод. Прямое сравнение с результатами, получаемыми моделированием многокомпонентной геомиграции (программа PH3D) невозможно, т.к. последняя учитывает все особенности распределения концентраций веществ раствора и распределения скоростей фильтрации.

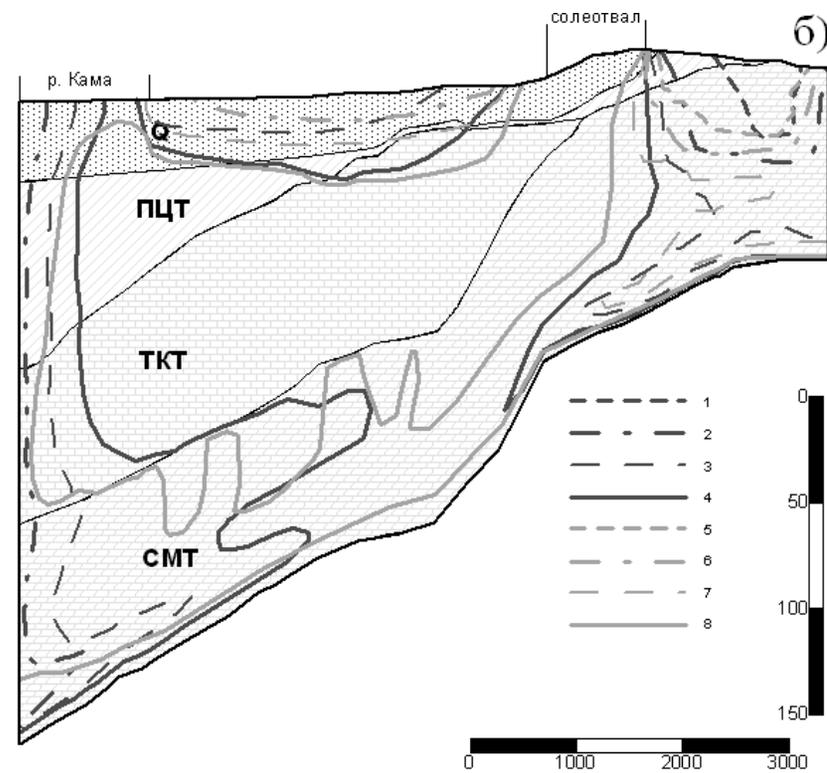
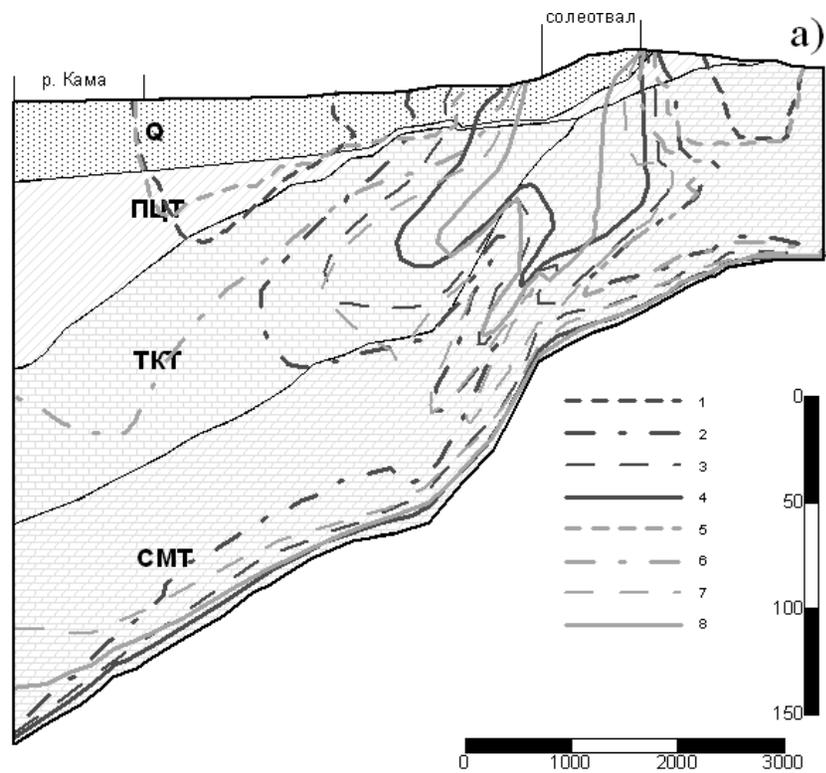


Рис. 9. Модельные распределения концентраций NaCl: задача без учета плотности 1 – 1 г/л, 2 – 50 г/л, 3 – 150 г/л, 4 – 250 г/л; задача с учетом плотности 5 – 1 г/л, 6 – 50 г/л, 7 – 150 г/л, 8 – 250 г/л. а) через 50 лет; б) через 250 лет

Используются два мигранта NaCl и CaSO₄, независимых по химическим взаимодействиям. NaCl определяет плотность раствора. Обе задачи миграции решаются одновременно, искажения поля скоростей фильтрации за счет переменной плотности используются для определения массопереноса сразу двух компонентов.

Граничные условия по хлориду натрия определяются постоянной концентрацией равновесия с галитом на нижней границе модели (соляное зеркало). При работе солеотвала на его подошве задается такое же граничное условие. Для CaSO₄, выставляется внутреннее граничное условие первого рода или постоянство концентрации в зоне загипсованности и в зоне гипса, зависящей от концентрации NaCl. Чем чаще по ходу решения задачи производится расчет равновесной концентрации CaSO₄, тем точнее решение задачи. В пределе это сводится к задаче решаемой программой PHT3D.

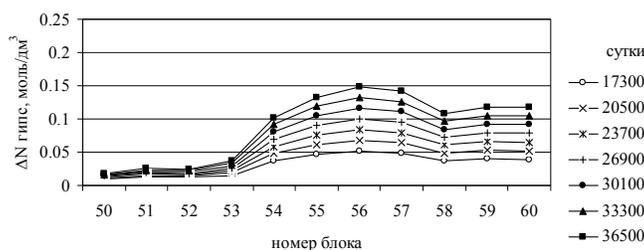


Рис. 10. Изменение количества растворения гипса в задаче без учета переменной плотности подземных вод (MT3DMS) с 50 лет до 100 лет

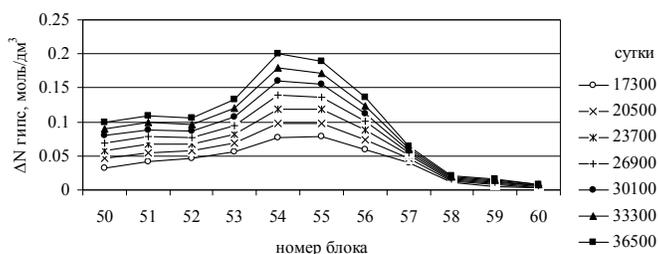


Рис. 11. Изменение количества растворения гипса в задаче с учетом переменной плотности подземных вод (SEAWAT) с 50 лет до 100 лет

Вынос гипса из каждого блока модели определяется по приращению суммы массовых расходов через грани блока модели. Сравнительный анализ делается после растворения гипса в зоне загипсованности (через 50 лет). Задачи решаются в три этапа: 1) без солеотвала – "природное" распределение концентраций; 2) с солеотвалом на 500 лет его существования, 3) без солеотвала на 500 лет – рассоление подземных вод.

По цепи контрольных блоков отмечается смещение "центра" растворения гипсового зеркала по потоку при учете переменной плотности с увеличением выноса гипса на 10-20 %.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам выполненной работы можно сделать следующие выводы:

1. Причиной трансформации геологической среды вследствие внедрения соленых вод является изменение ионной силы раствора, взаимодействующего с минералами пород. Равновесные концентрации продуктов растворения минералов с самим минералом изменяются с ростом концентрации основной соли, в данном случае хлористого натрия, сначала повышаясь, а затем понижаясь при концентрациях соли более 3 моль/л. При этом возникает растворение минералов, их перенос с потоком подземных вод и возможное осаждение в другом месте. Наиболее подходящей для моделирования этого процесса во всем диапазоне солености подземных вод является модель активности растворов электролитов К. Питцера.
2. Растворение минералов приводит к росту раскрытий трещин, определяющих основные пути миграции, увеличению трещинной пористости и проницаемости пород. Математическая модель этого процесса построена на представлении трещиноватости в виде трех ортогональных систем трещин, одна из которых параллельна напластованию, а две других перпендикулярны ей и между собой. Раскрытия трещин определяются на основании коэффициентов фильтрации, полученных при опытно-фильтрационных работах. Густоты могут быть получены из описаний кернов скважин и бортов карьеров.
3. Наиболее подвержены растворению минералы заполняющие трещины (вторичные). Если плотность минерального заполнителя соответствует плотности собственно минерала, то плотность минерала в самой породе зависит от его происхождения. Для породообразующего минерала она практически равна плотности самой породы за вычетом нерастворимого остатка (известняк, гипс), для вторичного минерала располагающегося в поровом пространстве породы она существенно меньше. Это приводит к двухступенчатому учету изменения параметров пород при растворении минералов. В первую очередь растворяется заполнитель трещин, далее минерал собственно породы. Если минерал породообразующий, то продолжается расширение трещины и модель увеличения раскрытия не изменяется, кроме принятия другой

плотности (концентрации) растворяющегося минерала. Если минерал находится в поровом пространстве нерастворимых пород, то стенки трещины после растворения заполнителя, не смещаются, в поток массы продуктов растворения минерала из блоков пород через первые 5-10 лет становится малозначимым, составляя менее 2-5 % общего приращения концентрации растворенного минерала в движущихся подземных водах.

4. Примененный на данной стадии исследования способ расчет изменения поля проницаемости массива надсолевых пород по изменению концентрации минералов-заполнителей трещин в блоках модели, в посылке равномерного растворения по всему объему блока и без учета направления потока входящего в блок, приводит к занижению темпа увеличения или уменьшения проницаемости даже для блоков мелкой разбивки области миграции. Несмотря на то, что модель в местах действительного растворения гипса состояла из блоков мощностью менее 1-2 м, в дальнейшем необходимо совершенствование методики пересчетов проницаемости в вертикальном и горизонтальном направлениях.
5. Наиболее значительные изменения пустотного пространства пород будут происходить на кровле гипсового зеркала – слоя практически чистого гипса. Расчетное опускание кровли гипса первые миллиметры, что в посылке формирования трещины-щели приводит к горизонтальному коэффициенту фильтрации в тысячи и десятки тысяч метров в сутки. Однако субгоризонтальное расположение этой полости и расположение ее на глубине более сотни метров должно приводить к ее закрытию за счет оседания вышележащих пород. Более вероятным представляется формирование системы локальных расширений, обуславливаемых неоднородностью самого гипса и оседания вышележащих пород.
6. Возможное повышение проницаемости глинистых пород при фильтрации рассолов приводит к повышению и вертикального и горизонтального коэффициентов фильтрации и уменьшает фильтрационное сопротивление пород по направлению к области разгрузки подземных вод, смещая в этом же направлении области наибольшего изменения пористости и проницаемости пород.
7. Влияние переменной плотности подземных вод за счет поступления рассола приводит к опусканию нижней границы рассолов, поступающих сверху, и к интенсификации процесса растворения гипса на кровле гипсового зеркала на 10-20 %. При

этом увеличивается время достижения солеными водами русла реки Камы. Область распространения рассолов несколько отличается от полученной без учета плотностных эффектов, но не принципиально.

8. Моделирование миграции тяжелых рассолов, поступающих из основания солеотвалов, соответствующее природному распределению солености в наблюдательных скважинах и не может быть осуществлено программами, основанными на миграции несмешивающихся разноплотностных жидкостей. Несмотря на общую тенденцию к формированию на нижнем водоупоре купола соленых вод повышенной плотности, как и в обычных программах с переменной плотностью растворов, при таком способе моделирования не образуются конвективные ячейки, и не происходит реальное повышение солености в верхних частях разреза в отдалении от солеотвала.

9. Общая последовательность моделирования миграции соленых вод с трансформациями геологической среды основывается на расщеплении общего уравнения миграции по физическим процессам и заключается в серии последовательных моделей-шагов:

- фильтрации подземных вод (получение поля скоростей фильтрации)
- конвективного и дисперсионного переноса растворенных веществ (получение полей концентрации растворенных веществ)
- физико-химических процессов с системе подземная вода – порода (получение полей концентрации растворенных веществ и соединений пород, в частности минералов)
- трансформации пустотного пространства пород, преимущественно трещинного на основании изменения концентраций минералов в породах (получение полей пористости и проницаемости в вертикальном и горизонтальном направлениях)

Начальным условием каждой последующей модели является результат предыдущей. Наилучшие результаты получаются при одинаковом временном шаге для всех частных моделей, что требует модификации программного обеспечения.

10. Для корректного моделирования миграции веществ обменивающихся с породами и трансформации геологической среды необходимо начальное условие воспроизводящее равновесное состояние подземных вод, минералов и других соединений пород. Это достигается аналогичным циклическим моделированием природного со-

стояния объекта изучения до стабилизации полей концентраций растворенных веществ подземных вод и устойчивых тенденций растворения-осаждения твердых соединений.

11. Наибольшим преобразованиям подвергается зона загипсованных пород, располагающихся над гипсовым зеркалом и кровля самого гипсового зеркала в окрестности солеотвала. Это приводит к ускорению миграции соленых вод в направлении основной дрены р. Камы, но практически не изменяет водозащитных свойств толщи пород от соляного до гипсового зеркала, вследствие большого запаса гипса на время действия солеотвала до его полного растворения около 500 лет.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

В ИЗДАНИЯХ, РЕКОМЕНДУЕМЫХ ВАК:

1. Лю Юй. Сравнение двух моделей миграции рассолов в подземных водах // Вестник Московского университета. Серия 4. Геология. 2011, № 4. С 68-70.
2. Лю Юй, Лехов. А.В. Моделирование изменения фильтрационных параметров загипсованных пород при фильтрации рассолов // Геоэкология. Инженерная геология. Гидрогеология. Геокриология. 2012, № 6. С 551-559.

В ДРУГИХ ИЗДАНИЯХ:

3. Лю Юй. Влияние солеотвалов на подземные воды (г. Соликамск) // Материалы XVI Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2009». Секция Геология. Подсекция Гидрогеология. Москва, 13-18 апреля 2009.
4. Лю Юй. Влияние загрязнения рассолом на проницаемость пород с карбонатно-сульфатным заполнителем трещин // Материалы XVIII Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2011». Секция Геология. Подсекция Гидрогеология. Москва, 11-15 апреля 2011.
5. Лехов А.В., Лю Юй. Трансформация трещинной проницаемости под влиянием солеотвалов Соликамско-Березниковского промрайона // Комплексные проблемы гидрогеологии. СПб.: С.-Петербург. ун-т, 2011. с. 97-98.