

УДК 66.021+66.048.3

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА МИГРАЦИИ КОМПОНЕНТОВ ФОСФОГИПСОВОГО ОТВАЛА В ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЕ

Е. Ю. ЧЕРНЫШ¹⁾, Л. Д. ПЛЯЦУК¹⁾

¹⁾Сумский государственный университет,
ул. Римского-Корсакова, 2, 40007, г. Сумы, Украина

Определены основные факторы влияния на процесс миграции в окружающей среде тяжелых металлов из массива фосфогипсовых отвалов. Осуществлено математическое моделирование и описание показателя поступления запасов свинца (ЧЗ_{рв}) из массива в толщу почвы. Полученная формализация позволяет исследовать динамические характеристики, с помощью которых можно выявить основные зависимости, определяющие глубину миграции тяжелых металлов из массива фосфогипсовых отвалов. По экспериментальным и расчетным данным был построен график эволюции глубины залегания «центра масс» вертикального распределения свинца в почве. Результаты исследования свидетельствуют о достаточно медленном смещении концентрации свинца вглубь почвенного профиля, что может быть вызвано влиянием ряда факторов на вертикальную миграцию этого элемента, в частности, на его трансформацию в экосистеме собственно буферных свойств почвенного комплекса и поступления металла из фосфогипсового отвала в малорастворимой форме. В работе получено значение коэффициента направленного переноса $w = 0,19$ см / год, что на примере свинца соответствует расчетному значению ЧЗ.

Ключевые слова: глубина миграции; тяжелые металлы; фосфогипсовые отвалы; моделирование.

MATHEMATICAL MODELING OF THE MIGRATION PROCESS OF COMPONENTS OF PHOSPHOGYPSE DUMP IN THE ENVIRONMENT

YE. YU. CHERNYSH^a, L. D. PLYATSUK^a

^aSumy State University,
Rymkogo-Korsakova street, 2, 40007, Sumy, Ukraine
Corresponding author: l.plyacuk@ecolog.sumdu.edu.ua

The paper focused on identifies the main factors influencing the process of heavy metals migration in the environment from an array of phosphogypsum dumps. The mathematical modeling and description of the arrival of the stocks of plumbum from the dump into the soil were carried out. The graph of the evolution of the depth of occurrence of the "center of mass" of the vertical distribution of plumbum in the soil was presented according to the experimental and calculated data. The results of the investigation indicated a fairly slow shift in the plumbum concentration deep into the soil profile. It can be caused by the influence of several factors on the vertical migration of this element. In particular, the influence on its transformation in the ecosystem of the buffer properties of the soil complex and

Образец цитирования:

Черныш Е. Ю., Пляцук Л. Д. Математическое моделирование процесса миграции компонентов фосфогипсового отвала в окружающей среде // Журн. Белорус. гос. ун-та. Экология. 2017. № 1. С. 115–120.

For citation:

Chernysh Ye. Yu., Plyatsuk L. D. Mathematical modeling of the migration process of components of phosphogypse dump in the environment. *J. Belarus. State Univ. Ecol.* 2017. No. 1. P. 115–120 (in Russ.).

Авторы:

Елизавета Юрьевна Черныш – кандидат технических наук; докторант кафедры прикладной экологии.
Леонид Дмитриевич Пляцук – доктор технических наук, профессор; заведующий кафедрой прикладной экологии.

Authors:

Yelizaveta Yu. Chernysh, PhD (engineering); doctoral student of the department of applied ecology.
e.chernish@ssu.edu.ua
Leonid D. Plyatsuk, doctor of sciences (engineering), professor; head of the department of applied ecology.
l.plyacuk@ecolog.sumdu.edu.ua

include of metal from phosphogypsum dump in poorly soluble form. The value of the directional transfer coefficient $w = 0,19 \text{ cm / year}$ was obtained in the work, which corresponds to the calculated value of the stocks of plumbum.

Key words: migration depth; heavy metals; phosphogypsum dumps; modeling.

Введение

На сегодняшний день исследование проблематики накопления отходов химической промышленности в окружающей среде занимает ведущее место в мире. Существуют стандартные международные методики оценки рисков потенциального использования фосфогипса, содержащего радиоактивные элементы и соответствующая оценка рисков при его складировании, где присутствует описание путей поступления радиоактивных элементов из фосфогипса, приведены расчетные формулы по их миграции с грунтовыми водами в поверхностные водные объекты и оценка влияния на продолжительность жизни населения региона [1–3]. Однако они не направлены на оценку и анализ миграционных потоков тяжелых металлов и биогенных веществ с отвалов, что также является актуальным при складировании фосфогипса с радиационным загрязнением фонового характера, но при этом имеющего в своем составе ряд соединений с тяжелыми металлами (кадмием, свинцом и т. д.). Соответственно, первоочередное значение имеет разработка системной методики по анализу глубины миграции тяжелых металлов в сопредельные к отвалу компоненты окружающей среды.

На базе СумГУ проводился многолетний мониторинг фосфогипсовых отвалов ПАО «Сумыхимпром» и прилегающих территорий для выявления закономерностей влияния состава фосфогипса разных периодов складирования, изменения его химического и физического состояния, состояния загрязнения почв элементами-примесями, содержащимися в фосфогипсе, и в первую очередь такими тяжелыми металлами, как свинец и кадмий, примеси которых поступают из природного сырья при переработке фосфоритов. По результатам мониторинга было выявлено, что повышение валового содержания подвижных форм свинца и кадмия в зоне влияния отвалов фосфогипса, не достигло критических значений и не превышает ПДК, хотя является выше фоновой для этого региона [4]. Однако данная негативная тенденция в будущем может иметь нежелательные последствия, поскольку буферные и аккумулирующие свойства почвы лимитированы. При превышении порогов устойчивости грунтово-биотической системы происходит загрязнение тяжелыми металлами подземных и поверхностных вод, растениеводческая продукция становится непригодной для потребления, что приведет к снижению показателей здоровья и качества жизни населения.

Следует отметить, что моделирование процесса миграции токсичных составляющих фосфогипса с массы их отвалов является определяющей прогностической задачей для разработки эффективных мер снижения негативного техногенного воздействия на компоненты экосистемы в местах складирования этих отходов. Системная математическая формализация должна содержать прогностическую функцию, что коррелируется с разной степенью вероятности наступления неблагоприятных событий – миграции поллютантов в водоносный слой, а далее – в поверхностные водные объекты или вероятности попадания и аккумуляции в сельскохозяйственных культурах, растущих вблизи места складирования фосфогипса. При этом в процессе математической формализации необходимо учитывать составляющие функции, описывающие скорость высвобождения элементов, путь поступления, среду поглощения и т. п.

Таким образом, цель работы – моделирование процесса миграции компонентов из тела фосфогипсового массива.

Результаты исследования и их обсуждение

Разработка математической модели процесса миграции тяжелых металлов. В исследовании остановимся на формализации интегрированной функции, которая может проявлять качественные и количественные характеристики процесса миграции загрязняющих веществ (тяжелых металлов) с фосфогипсовых отвалов к первому водоносному горизонту и с грунтовыми водами их дальнейшее поступление в поверхностный водный сток. Описание ее осуществим через расчет доли поступления запасов тяжелых металлов ($ЧЗ_{Me}$) на определенную глубину почвенно-грунтового профиля за год (м / год или см / год) с фосфогипсовых отвалов следующим образом:

- при начальном условии $t_1 - t_0 < t < t_1$

$$ЧЗ_{Me} = \left[1 - \exp[-\gamma_L (t - (t_1 - t_0))] \right] \cdot \left(\frac{v_E \cdot F_h \cdot l}{L \cdot R \cdot y_L} \right) \cdot 365 \alpha_{\text{биокс}} , \quad (1)$$

- при начальном условии $t_1 \leq t$

$$ЧЗ_{Me} = [-\gamma_L \cdot (t - t_1)] [1 - \exp(-\gamma_L \cdot t_0)] \cdot \left(\frac{v_B \cdot F_h \cdot l}{L \cdot R \cdot \gamma_L} \right) \cdot 365 \alpha_{\text{биокс}}, \quad (2)$$

где t – время мониторинга (год);

t_0 – время вымывания компонентов (тяжелых металлов), содержащихся в фосфогипсе, в грунтовые воды (год);

t_1 – отрезок времени, за который могут поступить тяжелые металлы вместе с грунтовыми водами в водный объект (год);

F_h – поправочный коэффициент для дисперсии;

γ_L – доля растворимых форм тяжелых металлов из общего их объема (в год);

L – длина отвала отходов в направлении, параллельном водоносному потоку (м);

v_B – горизонтальная составляющая скорости движения грунтовых вод (м / год);

l – глубина залегания грунтовых вод (м);

R – коэффициент удержания;

$\alpha_{\text{биокс}}$ – коэффициент, учитывающий биотическую составляющую почвы в процессе биоокисления и биотрансформации компонентов фосфогипса в процессе минерализации и гумификации органического субстрата. Это находим по формуле, сут⁻¹:

$$\alpha_{\text{биокс}} = \frac{\mu_m \cdot S_{\text{орг}}}{K_S + S_{\text{орг}}} \cdot k_T, \quad (3)$$

где μ_m – максимальная удельная скорость роста почвенных групп микроорганизмов-индикаторов глубины минерализации органического субстрата в почве (сут⁻¹);

$S_{\text{орг}}$ – суммарная концентрация субстрата (г/см³);

K_S – константа насыщения по субстрату (г/см³);

k_T – поправочный коэффициент.

Температурный режим почв детерминирует развитие микроорганизмов и их активность. Поэтому в формулу был внесен поправочный коэффициент (k_T) как функции показателя теплопроводности, определяющейся по времени, в течение которого грунт нагревается на глубину 1 см.

Введение коэффициента $\alpha_{\text{биокс}}$ позволяет обосновать процесс естественного биохимического выщелачивания, что влияет на пути миграции основных видов загрязняющих и биогенных веществ с отвалов. Так, в процессе полевых исследований было определено [5], что открытые участки отвала фосфогипса выступают субстратом для поселения на их поверхности, в первую очередь, водорослей и мхов, а уже в дальнейшем (постепенно) высшей травянистой растительности. Этому способствует значительная влагоемкость фосфогипса, достаточное количество остаточного фосфора, серы, кальция и других веществ, выделяющихся в виде макро- и микроэлементов. Учитывая, что на корневых системах всегда присутствуют ризосферные микроорганизмы, было сделано предположение, что фосфогипс может быть минеральным субстратом для развития различных эколого-трофических групп микроорганизмов.

При этом, исходя из свойств водоносного горизонта (его мощности, плотности и пористости водоносных пород и т. п.) [1], t_0 и t_1 можно определить по формуле (год):

$$t_0 = \frac{R \cdot L}{v_B}, \quad (4)$$

$$t_1 = \frac{R \cdot (L + l_B)}{v_B}, \quad (5)$$

где l_B – расстояние от потока грунтовых вод для ближайшего края массива отвального тела к поверхностному водному объекту (м).

Таким образом, коэффициент удержания предлагаем определять при учете годового распределения осадков:

$$R = 1 + \left(\frac{\rho}{P} \right) \cdot k_d \cdot k_p, \quad (6)$$

где k_d – коэффициент поглощения в водоносном горизонте (м³/кг);

k_p – коэффициент корреляции, учитывающий летнее распределение осадков в этой местности.

Используя матрицу ковариаций элементов массива, его можно выразить как $k_p = \text{cov}(X, Y) / (\sigma_x \sigma_y)$, где в качестве X избрано среднемесячное количество осадков, а в качестве Y выступает среднегодовое количество осадков:

ρ – плотность водоносного горизонта ($\text{кг}/\text{м}^3$);
 P – пористость водоносного горизонта.

Как известно, при определенных условиях происходит постоянное питание реки подземными водами и пополнение запасов грунтовых вод во время наводнения и паводков, а также постоянное увеличение запасов грунтовых вод за счет речных. При определенном расположении водоупорных пород отсутствует связь между грунтовыми и речными водами. Иногда возможна гидравлическая связь между грунтовыми и речными водами только при наводнении или паводке и его отсутствие во время межени [6]. Эти вариации необходимо учитывать при дальнейшей реализации математического моделирования миграционных процессов на территориях, прилегающих к фосфогипсовым отвалам и, соответственно, при определении прогностической функции миграции поллютантов в экосистеме.

Исходные данные для реализации модели определяли в соответствии с физико-химическими и биохимическими условиями проведения процесса миграции элемента в почвенном профиле (табл. 1). При этом значение t с шагом $\Delta t = 1$ год изменялось в течение 2008–2017 гг.

Таблица 1

Исходные данные для проведения математического моделирования

Table 1

Source data for mathematical modeling

Начальные условия	Значение	Единицы измерения
F_h	1,5	–
γ_L	0,23	–
L	12,5	м
v_g	1,5	м/год
l	2	м
R	0,23	–
$\alpha_{\text{биокс}}$	0,34	сут^{-1}

Для решения задач статистических и кинетических характеристик процесса миграции элементов в толще грунта использовали систему MatLab 7.8.0, что позволило сократить время анализа, а также обеспечить высокую точность полученных результатов. Отображение графического совмещения данных полевых исследований и результатов моделирования осуществлялось с помощью пакета программ MS Excel. Для примера реализации модели был взят элемент (свинец).

В сером типе почв вблизи отвала фосфогипса весь запас свинца сконцентрирован в верхнем слое почвы: 0–12 см, глубже наблюдается равномерное распределение этого элемента (рис. 1). Динамика временных изменений профилей залегания Pb в верхнем слое отображает сравнительно незначительные их изменения во времени, они не превышают значений ПДК, исходя из полученных результатов процесса моделирования и полевых исследований.

Соответственно, на основе экспериментальных и расчетных данных был построен график эволюции глубины залегания «центра масс» вертикального распределения свинца в почве. Усреднив значение центра масс прямой линией, получаем значение коэффициента направленного переноса $w = 0,19$ см / год, что соответствует расчетному значению ЧЗ по свинцу. Из рис. 2 следует, что «центр масс» загрязнения постепенно смещается вглубь почвы, хотя наблюдаются «разброс» полученных положений «центра масс», что объясняется влиянием на вертикальную миграцию метеорологического, геохимического факторов и биотической составляющей почвы. При этом на рис. 2 также отражена прогностическая функция относительно возможной глубины миграции свинца на 2018 г.

Полученные результаты свидетельствуют о достаточно медленном смещении концентрации свинца вглубь почвенного профиля, что может быть вызвано влиянием ряда факторов на вертикальную миграцию этого элемента, в частности, влияния на его трансформацию в экосистеме собственно буферных свойств почвенного комплекса и поступления металла из фосфогипсового отвала в малорастворимой форме.

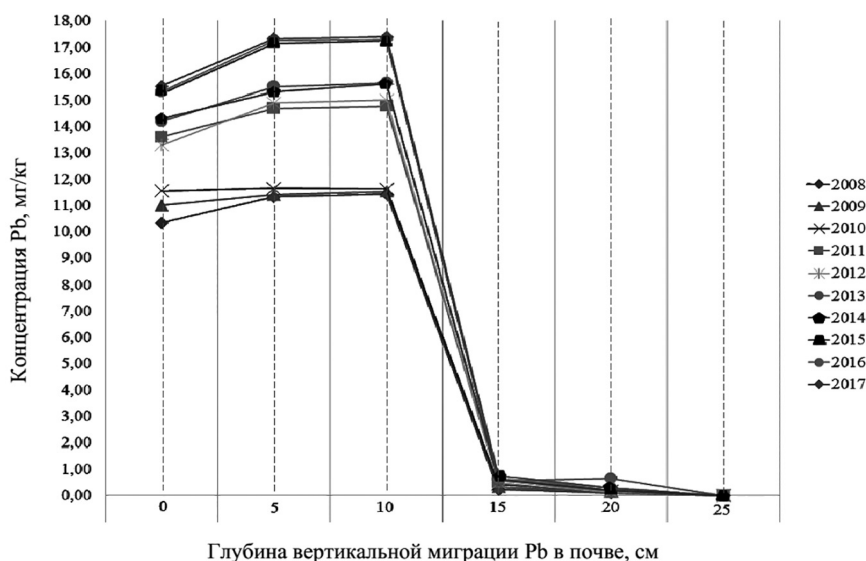


Рис. 1. Вертикальное распределение свинца в серых почвах

Fig. 1. Vertical distribution of lead in soil

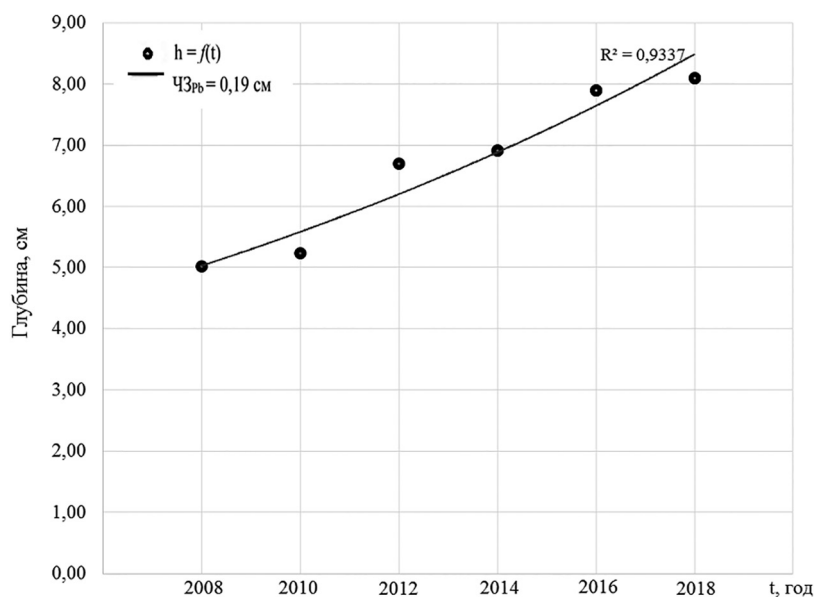


Рис. 2. Моделирование эволюции глубины залегания «центра масс» вертикального распределения плотности загрязнения свинца в сером типе почвы

Fig. 2. Modeling of the evolution of the depth of occurrence of the «center of mass» of the vertical distribution of lead pollution density in the grey type of soil

Заклучение

Таким образом, определены основные факторы влияния на процесс миграции в окружающей среде тяжелых металлов из массива фосфогипсовых отвалов. Осуществлено описание показателя поступления запасов паллютантов ($ЧЗ_{Me}$) из массива в толщу почвы. Полученная формализация позволяет исследовать динамические характеристики, с помощью которых можно выявить основные зависимости, определяющие глубину миграции тяжелых металлов из массива фосфогипсовых отвалов, от следующих факторов: времени вымывания компонентов из фосфогипса, доли растворимых форм тяжелых металлов из общего их объема, глубины залегания грунтовых вод, скорости движения грунтовых вод, плотности и пористости водоносного горизонта, максимальной удельной скорости роста групп микро-

организмов-индикаторов глубины минерализации органического субстрата в почве, температурного режима почв, распределения осадков в этой местности и т. д.

Определено, что в сером типе почв (вблизи отвала фосфогипса) весь запас свинца сконцентрирован в верхнем слое почвы (0–12 см), глубже наблюдается равномерное распределение этого элемента. Результаты полевых исследований и моделирования динамики временных изменений профилей залегания Pb в верхнем слое отражают незначительные их изменения во времени, которые не превышают значений ПДК. В работе получено значение коэффициента направленного переноса этого элемента ($w = 0,19$ см / год), что соответствует расчетному значению доли поступления его в процессе вертикальной миграции в почвенно-грунтовой профиле.

Библиографические ссылки

1. National Emission Standards for Radon emission from phosphogypsum stacks. Washington: U. S. Environment Protection Agency, 1992.
2. Dube A., Zbytniewski R., Kowalkowski T., et al. Adsorption and Migration of Heavy Metals in Soil. *Polish Journal of Environmental Studies*. 2001. Vol. 10, № 1. P. 1–10.
3. Guidelines for management and handling of phosphogypsum generated from phosphoric acid plants (final draft). Hazardous Waste Management Series. Parivesh Bhawan, East Arjun Nagar, 2013.
4. Пляцук Л. Д., Черныш Е. Ю., Яхненко Е. Н. и др. Системный подход к экологическому мониторингу в районе размещения отвала фосфогипсовых отходов // Экологический вестник. 2015. № 4 (34). С. 77–85.
5. Яхненко О. М., Черныш С. Ю., Пляцук Л. Д. і інші. Самозаростання відвалу фосфогіпсу як показник рівня техногенного навантаження на довкілля. Екологічна безпека та збалансоване ресурсокористування. 2016. № 1 (13). С. 110–119.
6. Коржик О. М. Основи гідрології, метеорології і кліматології [Электронный ресурс] URL: http://lubbook.net/book_532.html (дата обращения: 20.05.2017).

References

1. National Emission Standards for Radon emission from phosphogypsum stacks. Washington: U. S. Environment Protection Agency, 1992.
2. Dube A., Zbytniewski R., Kowalkowski T., et al. Adsorption and Migration of Heavy Metals in Soil. *Polish J. of Environm. Stud.* 2001. Vol. 10, № 1. P. 1–10.
3. Guidelines for management and handling of phosphogypsum generated from phosphoric acid plants (final draft). Hazardous Waste Management Series. Parivesh Bhawan, East Arjun Nagar, 2013.
4. Plyatsuk L. D., Chernysh Ye. Yu., Yakhnenko E. N., et al. Systematic approach to environmental monitoring near phosphogypsum waste dump. *Ekolog. vestn.* 2015. No. 4 (34). P. 77–85 (in Russ.).
5. Yakhnenko E. N., Chernysh Ye. Yu., Plyatsuk L. D., et al. Self-overgrowing of the phosphogypsum dump as a level indicator of technogenic loading on environment. *Envir. safety and sust. res. use*. 2016. No. 1 (13). P. 110–119 (in Ukrainian).
6. Korzyk O. M. Osnovy hidrolohiyi, meteorolohiyi i klimatolohiyi [Fundamentals of hydrology, meteorology and climatology]. URL: http://lubbook.net/book_532.html (date of access: 20.05.2017).

Статья поступила в редколлегию 02.06.2017
Received by editorial board 02.06.2017