

УДК 504.06:665.002.637]:658.012.16.004.94

Хаустов Александр Петрович

доктор геолого-минералогических наук,
профессор кафедры прикладной экологии,
Российский университет дружбы народов,
115093 Москва, Подольское ш., 8/5,
Экологический факультет, к. 326
e-mail: akhaustov@yandex.ru

Редина Маргарита Михайловна

доктор экономических наук, доцент,
заведующая кафедрой прикладной экологии,
Российский университет дружбы народов

Лущенкова Евгения Олеговна

инженер-эколог,
ООО «Газпром добыча Ямбург»,
629306 ЯНАО, г. Новый Уренгой,
ул. Геологоразведчиков, 9

Черепанский Михаил Михайлович

доктор геолого-минералогических наук,
доцент, заведующий кафедрой гидрогеологии,
Российский государственный
геологоразведочный университет,
117997, Москва ул. Миклухо-Маклая, 23

**МОДЕЛИРОВАНИЕ УГЛЕВОДОРОДНЫХ
ЗАГРЯЗНЕНИЙ В РАМКАХ ЭКСПЕРТНОЙ
СИСТЕМЫ ПО РЕАБИЛИТАЦИИ
ГЕОЛОГИЧЕСКОЙ СРЕДЫ****Аннотация:*

Представлен опыт коллектива РУДН по разработке экологической экспертной системы (ЭЭС) для реабилитации геологической среды (ГС), загрязненной нефтепродуктами (НП). Проект реализуется совместно с партнерами из Беларуси и Казахстана в рамках программы межгосударственного сотрудничества. В основу создания системы положены современные подходы к моделированию нефтяных загрязнений грунтов и подземных вод, а также представления о процессах самоорганизации при углеводородном загрязнении ГС. Рассмотрены основные проблемы моделирования загрязнения ГС и подходы к их решению в ЭЭС, включая применение специализированных многомерных процедур анализа данных.

Ключевые слова: геологическая среда, экспертная система, нефть, модели

DOI: 10.18454/2313-1586.2016.03.058

Khaustov Alexander P.

Doctor of geological and mineralogical sciences,
professor of the applied ecology department,
Russian university of peoples' friendship,
115093, Moscow, 8/5 Podolsky highway
Ecological faculty, r. 326
e-mail: akhaustov@yandex.ru

Redina Margarita M.

Doctor of economic sciences,
associate professor,
the head of applied ecology department,
Russian university of peoples' friendship

Lushchenkova Evgeniya O.

engineer-ecologist,
JSC "Gasprom mining Yamburg",
629306, New Urengoy, 9 Geologorazvedchikov st.

Cherepansky Mikhail M.

Doctor of geological and mineralogical sciences,
associate professor,
the head of hydrogeology department,
Russian state university of geological survey,
117997, Moscow, 23 Miklukho-Maklay st.

**HYDROCARBON POLLUTION MODELING
IN THE FRAMEWORK OF AN EXPERT
SYSTEM ON GEOLOGICAL
ENVIRONMENT REHABILITATION***Abstract:*

The experience of the team of applied ecology department (People's Friendship University of Russia) on the development of expert system (ES) for geological environment rehabilitation (GE) contaminated by petroleum products (NP) is presented. The project is realized together with the partners from Belarus and Kazakhstan in the framework of inter-state cooperation. The basis of the development of the ES are modern approaches to modeling oil pollution of soils, rock sand, groundwater, as well as the idea of self-arrangement processes under the GE hydrocarbon pollution. The basic problems of modeling the GE pollution and approaches to solving them in the ES, including the special multivariate data processing procedures, are considered.

Key words: geological environment, expert system, oil, models

* Материал подготовлен при финансировании Минобрнауки России в рамках работ по проекту ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014–2020 годы» «Разработка экспертной системы реабилитации геологической среды, загрязненной нефтепродуктами, на основе принципов самоорганизации для территорий государственных участников СНГ» (идентификатор проекта RFMEFI58414X0011)

Углеродородное загрязнение геологической среды – приоритетная экологическая проблема для многих регионов России и соседних стран. Эта проблема касается не только регионов нефтедобычи: загрязнения геологической среды отмечаются практически повсеместно, особенно ярко проявляясь в зонах влияния объектов добычи, хранения, транспортировки и переработки нефти и нефтепродуктов. Острота проблемы требует поиска новых решений, которые позволили бы максимально эффективно провести ремедиацию загрязненной геологической среды и снизить нагрузку на сопредельные компоненты природных систем.

В качестве такого решения предложено создание специализированной экологической экспертной системы по реабилитации геологической среды, загрязненной углеводородами [6]. Проект «Разработка экспертной системы реабилитации геологической среды, загрязненной нефтепродуктами, на основе принципов самоорганизации для территорий государств – участников СНГ» реализуется в сотрудничестве научных коллективов России, Беларуси и Казахстана. С российской стороны участником проекта стал коллектив кафедры прикладной экологии РУДН.

Необходимость анализа сложных ситуаций и принятия решений в сжатые сроки в критических условиях требует привлечения экспертов, мнения которых могут быть эффективными в силу недостаточной информированности. Это обуславливает необходимость разработки *специализированных экологических экспертных систем* по оценке последствий нефтяных загрязнений и поддержке принятия соответствующих управленческих природоохранных решений. Их применение в случае аварий с разливом НП является ключевым условием эффективности их локализации и ликвидации последствий. Экологические экспертные системы обеспечивают оперативность получения необходимой информации в необходимых формах с учетом уровней реагирования и изменяющейся ситуации.

Экспертная система представляет собой компьютерную программу, которая использует знания и логику рассуждений эксперта с целью выработки рекомендаций или решения проблем. Экспертные системы эффективно содействуют получению обоснованной оценки характера аварийной ситуации и возможных перспектив ее развития, включая отдаленные последствия [4, 6].

В настоящее время созданы и применяются программные продукты для анализа последствий аварийных событий, однако практически все они имеют узкую направленность – это оценка количества излившегося НП, оценка риска аварии, расчеты ущерба либо медико-социальных последствий по стандартным методикам на основе ограниченного набора информации. В отличие от них применение экспертных систем предполагает решение целого комплекса вопросов для выработки оптимального с экологической и с экономической точек зрения решения по минимизации последствий аварий. Это *принципиально новый программный продукт*, отвечающий требованиям наукоемкости, возможности эволюции, гибкости, объектной ориентированности, модульности и т. п. [4]. Опыт применения экспертных систем в других отраслях показывает их высокую эффективность. Применение создаваемой экспертной системы предполагается широчайшим кругом пользователей – от руководителей конкретных объектов, где ведется обращение с нефтяными углеводородами (УВ) и возникает загрязнение, до руководителей соответствующих ведомств (МЧС, охраны природы, нефтегазового комплекса и др.).

Аварийные загрязнения – это не единственный случай, когда необходимо применение специализированных экспертных систем. Чрезвычайные ситуации, требующие использования экологических экспертных систем, возникают не только при аварийном разливе НП, но и в случае достижения фронтальной части латентно распространяющегося в подземной гидросфере НП-загрязнения участка природного или искусственного дренирования грунтовых вод [6].

Одно из наиболее эффективных приложений экспертных систем в защите окружающей среды и промышленной безопасности – разработка планов реагирования на

чрезвычайные ситуации и аварии. Это могут быть экспертные системы, ориентированные на создание планов ликвидации аварийных ситуаций для химически опасных объектов, а также планов ликвидации аварийных разливов нефти и нефтепродуктов. Подготовка данных документов требует сбора и детального анализа значительных объемов информации. Работы по прогнозу возможных аварийных событий проводятся по заранее определенным алгоритмам и зависимостям. Таким образом, возникает возможность «автоматизации» процессов обработки первичных данных с тем, чтобы в итоге были разработаны в достаточной степени точные оценки и прогнозы аварийных событий и алгоритмы ликвидации последствий аварий. Однако на практике большая часть собранных первичных данных анализируется недостаточно и остается «мертвым грузом», создавая своими объемами дополнительные сложности специалистам. В то же время отдача от данной информации должна быть гораздо более ощутимой, что и необходимо реализовать в создаваемых экологических экспертных системах.

Особенность предлагаемого подхода заключается в том, что экспертная система по реабилитации геологической среды создается на основе принципов самоорганизации [3, 5]. Это позволяет обосновывать принятие оптимальных управленческих решений по минимизации экологических и социально-экономических рисков в случае загрязнения геологической среды.

В основу блоков экспертной системы положены модели для реализации прогнозных расчетов, определения объемов свободных и зачехленных углеводородов, контуров и мощности линз свободных НП, положения водонефтяного контакта, а также изменения параметров во времени. Для этих целей применяются различные модели вертикальной и горизонтальной миграции углеводородов с калибровкой моделей в зависимости от фильтрационных параметров и выбора технологий очистки [1].

В настоящее время существует более 250 программных продуктов, моделирующих поведение и массоперенос НП в ГС. Они имеют специфическое назначение и не универсальны по отношению к загрязняемым объектам. Наибольшее признание получила программа TOUGH2.v2 (T2VOC), моделирующая одновременно движение и массоперенос не смешивающихся с водой жидкостей. Актуально также моделирование биodeградации. Применение таких продуктов необходимо на всех стадиях оценки и ремедиации геологической среды.

Анализ действующих моделей и программных комплексов для прогноза миграции нефти и НП позволил определить возможности их использования в экспертной системе.

Отметим, что широко распространенные в настоящее время модели поведения НП в окружающей среде в ряде случаев не учитывают все многообразие природных процессов трансформации, аккумуляции и миграции веществ. Так, отмечается недоучет детального компонентного состава и процессов трансформации углеводородов, излишнее упрощение моделей их миграции; недоучет процессов самоорганизации в загрязненной геологической среде; недостаточная точность методов химического анализа загрязнения сред (в частности экстракции); разрозненность и недостаточное обоснование нормативов содержания НП в почвах и грунтах. Значительные проблемы создает также несовершенство методической базы оценки эколого-экономических ущербов при загрязнении геологической среды: это затрудняет оценку эффективности ремедиационных мероприятий.

Низкой точностью и сложностями практического применения характеризуются количественные оценки баланса НП, поступающих в окружающую среду (ОС). В частности, полноценный анализ поведения нефти в ОС предполагает учет ее биodeградации. В качестве составляющей в уравнение введена интенсивность биохимических и физико-химических процессов деградации нефти. Однако на практике детальные оценки данных параметров серьезно осложнены необходимостью учета специфики природных условий в конкретных

ландшафтах, загрязняемых нефтью, и каждый раз требуют проведения детальных исследований на местности. В создаваемой ЭС эти проблемы решаются введением специального блока моделирования биodeградации НП.

Также проблемы прогноза связаны с качеством применяемых моделей массопереноса в гомогенных и гетерогенных средах. Они справедливы для растворов, но в ряде случаев принципиально не применимы для описания формирования линз НП и движения их на поверхности грунтовых вод. Это обусловлено незнанием механизма фазовых переходов, которые определяются следующими ведущими процессами: в атмосфере – испарение и химическое окисление; в почвах – биоокисление и биоразложение; породы – сорбция, диффузия; в капиллярной зоне – формирование заземленных форм УВ; в зоне насыщения – растекание по линзе и миграция внутри в виде растворенных форм. Огромное значение имеют возраст нефтяного загрязнения, анизотропность движения и тип поллютантов. Необходимо создание принципиально новых моделей, которые учитывали бы данные процессы. В связи с этим в ЭС предполагается использование различных подходов к моделированию поведения легких и тяжелых УВ.

Значительное упрощение и как следствие утрата точности моделей (следовательно, и ценности получаемых результатов) происходит в результате недоучета некоторых процессов, происходящих после попадания нефти и НП в ОС. Прежде всего недооценивается роль почвенного покрова как мощного барьера, на котором накапливаются и подвергаются деградации многие соединения, входящие в исходный состав нефти и НП. Упрощенное представление о проникновении нефти и НП при вертикальной миграции искажает количественные оценки вероятности присутствия в загрязняемых грунтах конкретных продуктов трансформации нефти и не позволяет прогнозировать саму вероятность достижения теми или иными опасными компонентами, например полициклическими ароматическими углеводородами (ПАУ), отдельных горизонтов. Так, традиционное представление о распределении НП в грунтовой толще излишне примитивно. По мнению Р. Ст. Джермана [7], подобная «приверженность к представлению о плавании легких, не смешивающихся с водой жидкостей на поверхности грунтовой воды» или модели «блина» стоила промышленности огромных денежных сумм, времени и моральных потерь за десятилетия...». Введение блока биodeградации с учетом констант распада различных УВ будет способствовать решению данной проблемы.

Несмотря на высочайшую актуальность проблемы учета процессов биodeградации, оценки базируются чаще всего на модельных лабораторных исследованиях либо использовании аналогий. При этом роль биоты в разрушении отдельных компонентов НП может оказаться ведущей: по опыту исследований на специализированном полигоне Бимиджи (США), более 90 % моноароматических соединений (бензол, ксилол, толуол, этилбензол) подверглось разложению именно при участии биоты.

До настоящего времени в отечественных моделях и оценках загрязнения недооцениваются процессы формирования горизонтальной геохимической зональности в зоне насыщения с выделением зоны восстановительных условий. Это приводит к появлению побочных аномальных концентраций таких металлов, как Mn, Fe, метана, а также ряда трансформантов с повышенной токсичностью. В частности, сложные эфиры фталиевой кислоты в отходах добычи, хранения и переработки нефти представлены очень широко. Соединения хорошо растворимы в воде, поэтому активно мигрируют с нисходящими потоками подземных вод, достигая зоны насыщения. Они легко проникают с растворами в организм и усваиваются в жировых отложениях. Фталатная структура отличается высокой биохимической стойкостью и обнаруживается практически во всех средах.

Весьма важной проблемой при прогнозировании рисков нефтяных загрязнений ГС является отсутствие надежных методик экстракции и аналитических определений. В частности, для алифатических УВ степень извлечения из образца может составлять 85 %, для ароматических – всего 20 %. Очевидно, что столь низкие показатели экстрагирования не позволяют получать удовлетворительные оценки концентраций загрязнителей, которые

представляют наибольший интерес. При этом каждая из изучаемых сред имеет свою специфику удерживающей (сорбционной) способности по отношению к УВ различных типов.

Перечисленные проблемы необходимо учитывать при организации мониторинга на нефтезагрязненных территориях, при выборе оптимальных технологий восстановления природных комплексов, а также при оценке рисков попадания приоритетных для контроля веществ (прежде всего супертоксикиантов – ПАУ и др.) в подземные воды. В создаваемой ЭС предполагается использовать ряд инновационных подходов к моделированию. В частности, это учет процессов биodeградации углеводородов, в том числе – с образованием особо токсичных веществ как продуктов трансформации исходных нефти и НП. Кроме того, значительное внимание уделяется процессам формирования геохимической зональности при загрязнении геологической среды углеводородами.

Выбор моделей загрязнения ГС для стран-участников осуществляется с учетом специфики их территорий (ландшафтных особенностей) и источников загрязнения – модельных объектов.

Для создания рабочих схем, а также моделирования распространения загрязнения геологической среды проведена систематизация следующих характеристик на примере модельных объектов:

- характеристика загрязняемых водоносных горизонтов, включая информацию о генезисе, геологическом индексе, литологии, мощности слоев и отложений, минерализации в естественных условиях и после загрязнения, фоновых уровнях подземных вод и уровнях после загрязнения;
- характеристика зоны аэрации, включая описание возраста (период, эпоха, век), мощности зоны аэрации до и после загрязнения, геолого-литологического разреза, зоны аэрации, мощности прослоек, коэффициента фильтрации;
- характеристика подстилающих пород, с указанием возраста (период, эпоха, век), литологического состава и мощности;
- интенсивность загрязнения, включая общую жесткость, перманганатную окисляемость, температуру подземных вод внутри очага загрязнения, определяющее загрязняющее вещество и его содержание в подземных водах, класс опасности загрязняющего вещества, интенсивность загрязнения в единицах ПДК, степень концентрации определяющего загрязняющего вещества, скорость перемещения границ загрязнения.

Многообразие процессов, протекающих в загрязняемых средах, определяется, в частности, многообразием ландшафтных условий. В этой связи необходимо использование специализированных алгоритмов классификации и типизации условий для разработки типовых алгоритмов выбора моделей загрязнения и разработки системы мер по восстановлению нарушенных сред. Так, например, в качестве классификационных признаков должны выступать характеристики рельефа, типы почв, наличие поблизости водных объектов (как фактора дополнительных экологических рисков), климатические характеристики зон загрязнения. Учитывая масштабность загрязняемых территорий (а значит, и количество данных, которые должны подвергаться обработке и анализу), необходимо использовать специализированные методы анализа данных (процедуры классификации), в частности кластерный анализ, метод канонических корреляций и др. Наш опыт применения данных методов [2] показывает высокую эффективность для больших массивов данных.

Возможности широкого практического применения создаваемой ЭЭС обусловлены выбором модельных объектов, для которых должны быть разработаны рабочие схемы, модели, сценарии и прогнозы загрязнения геологической среды нефтепродуктами: объекты хранения нефтепродуктов; объекты добычи углеводородного сырья; объекты транспорта нефти и нефтепродуктов (трубопроводные системы); объекты переделки нефтепродуктов.

Литература

1. Основы изучения загрязнения геологической среды легкими нефтепродуктами / Н.С. Огняник, Н.К. Парамонова, А.Л. Брикс и др. - Киев: [А.П.Н.], 2006. - 278 с.
2. Луценкова Е.О. Факторы распространения загрязняющих веществ в атмосфере полярных областей (на примере п. Ямбург) / Е.О. Луценкова, А.П. Хаустов // Метеорология и гидрология. – 2014. – № 8. – С. 35 – 43.
3. Техногенные системы как феномен самоорганизации материи (на примере загрязнения среды углеводородами) / А.П. Хаустов // Литосфера. – 2014. - № 1. - С. 105 - 116.
4. Хаустов А.П. Применение экспертных систем для решения задач оценки качества питьевых вод / А.П. Хаустов // Питьевые подземные воды. Изучение, использование и информационные технологии: материалы междунар. науч.-практ. конф. 18-22.04.2011 г. Ч. 2. - Моск. обл., п. Зеленый: ВСЕГИНГЕО, 2011. - С. 239-250.
5. Хаустов А.П. Трансформация нефтепродуктов в геологической среде при изменении их битумоидного статуса / А.П. Хаустов, М.М. Редина // Геоэкология. Инженерная геология. Геоэкология. - 2013. - № 6. - С. 502 - 515.
6. Хаустов А.П. Экологическая экспертная система для реабилитации геологической среды от последствий нефтезагрязнений на основе принципов самоорганизации / А.П. Хаустов, М.М. Редина // Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе. – 2013. - № 6. - С. 44 - 50.
7. Проблемы идентификации и количественной оценки загрязнения геологической среды нефтепродуктами / А.П. Хаустов, М.М. Редина, М.М. Черепанский и др. [Электронный ресурс] – Режим доступа: www.belisa.org.by/ppt/2013/Haustov_conf_ecol.ppt.
8. St. Germain R. Your LNAPL Conceptual Site Model: It's Probably Wrong [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://www.neiwpcc.org/tanks2012/presentations/mondaypresentations/saintgermain.LNAPL.Monday.pdf>.