

## MODELAREA TRANSPORTULUI DE ENERGIE ȘI MASĂ ÎN ZONA VADOASĂ A UNUI ACVIFER FREATIC AFLAT ÎN COMUNICARE HIDRAULICĂ CU REȚEAUA HIDROGRAFICĂ

### CUPRINS

Introducere .....	3
1. Aplicație propusă pentru studiu .....	4
1.1. Baza de date a aplicației .....	5
2. Modelul conceptual al hidrostructurii .....	7
2.1. Modelul spațial .....	7
2.2. Modelul parametric .....	9
2.2.1. Parametrii zonei vadoase.....	9
2.2.2. Parametrii acviferului.....	9
2.3. Modelul energetic.....	10
2.3.1. Potențialul gravitațional.....	10
2.3.2. Potențialul capilar .....	10
3. Modelul hidrologic .....	12
3.1. Umiditatea zonei vadoase.....	12
3.2. Conductivitatea hidrolică a zonei vadoase .....	13
3.3. Viteza de curgere a apei subterane în zona vadoasă.....	13
4. Modelul eroziunii .....	14
5. Modelul contaminării.....	15
5.1. Partiționarea contaminatului.....	15
5.2. Migrarea contaminantului pe verticală .....	16
5.2.1. Migrare ascendentă .....	16
5.2.2. Migrare descendentă.....	16
5.2.2.1. Advecție .....	16
5.2.2.2. Sorbție.....	17
5.2.2.3. Schimb ionic .....	17
5.2.2.4. Biodegradare.....	18
5.2.2.5. Hidroliza .....	18

5.3.	Tipul contaminatului .....	19
5.4.	Tipul contaminării .....	19
5.4.1.	Fluxul unitar de contaminant ( $q$ ) .....	19
5.4.1.1.	Datele necesare pentru evaluarea lui $q$ .....	19
5.4.1.2.	Etapele evaluării lui $q$ .....	20
5.4.1.3.	Exemplu de calcul pentru $q$ .....	20
6.	Simularea contaminării .....	21
6.1.	Stratificarea zonei vadoase .....	21
6.2.	Concentrația inițială a contaminantului .....	22
6.3.	Modelul dinamic al contaminării .....	22
6.4.	Caracteristicile acviferului freatic din baza zonei vadoase .....	23
7.	Rezultatele simulării.....	23
7.1.	Modele 1D ale distribuției benzenului.....	23
7.1.1.	Model 1D în zona vadoasă pentru octombrie anul 5.....	24
7.1.2.	Model 1D în zona vadoasă pentru septembrie anul 10.....	25
7.1.3.	Model 1D la baza zonei vadoase pentru toată perioada de simulare .....	27
7.2.	Modele 2D ale distribuției benzenului.....	29
7.2.1.	Model 2D pentru concentrația inițiale a benzenului în sol.....	29
7.2.2.	Modele 2D pentru concentrația benzenului în acvifer .....	30
7.2.2.1.	Modelul 2D_IX_an5.....	30
7.2.2.2.	Modelul 2D_IX_an10.....	31
7.2.3.	Modele 3D ale distribuției benzenului în zona vadoasă .....	32
7.2.3.1.	Modelul 3D_IX_an10.....	32
	Concluzii .....	35
	Structură temă .....	36
	Bibliografie selectivă .....	37
	Forma de prezentare a temei .....	37

## Introducere

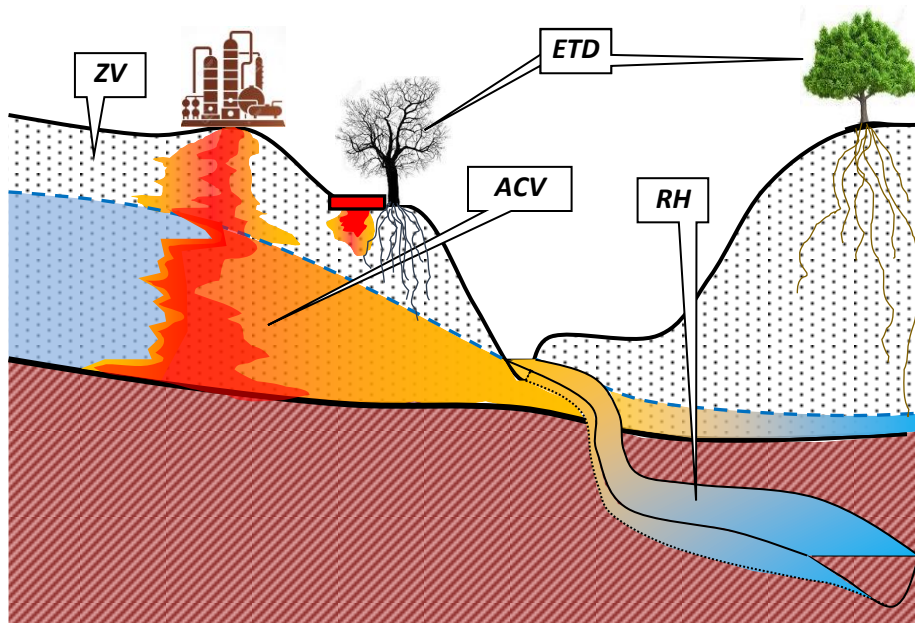
Modelarea transportului de energie și masă în **zona vadoasă** este problema de mare maximă actualitate a **HIDROGEOLOGIEI APLICATE** dedicate **protecției și conservării apelor subterane și de suprafață**.

Complexitatea problemei și numărul mare de factori care determină gradul ridicat de incertitudine al rezultatelor modelării impune ca obligatoriu pentru cei care studiază această problemă realizarea unei **aplicații** care să clarifice ( în măsura în care este posibil):

- aspectele metodologice ale modelării
- modalități de interpretare a rezultatelor
- evaluarea gradului de incertitudine al rezultatelor.

Heterogenitatea zonei vadoase recomandă simularea **unidimensională** a proceselor de transport de energie și masă din zona vadoasă, care au ca rezultat **distribuția pe o verticală** și la **un anumit moment**, **concentrația contaminantului** care are ca sursă, o contaminare plasată la partea superioară a zonei vadoase, sau în interiorul acesteia (**Fig.1**).

**Destinația** contaminantului din **zona vadoasă** este **acviferul freatic** din baza zonei vadoase și **rețeaua hidrografică** care se află în comunicare hidrolică cu acviferul freatic (**Fig.1**).



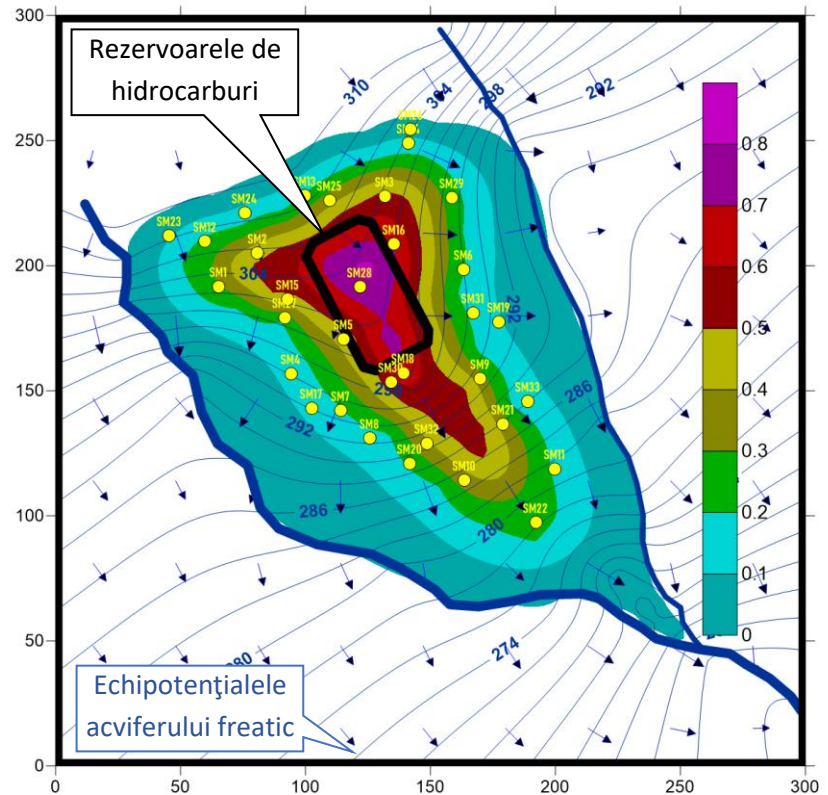
**Fig.1.** Modelul conceptual al cuplării curgerii apei și migrării contaminanților pe traseul: **zona vadoasă(ZV)**, **acvifer(ACV)**, **rețeaua hidrografică(RH)**, cu efecte asupra **ecosistemelor terestre dependente(ETD)**.

## 1. Aplicație propusă pentru studiu

Contaminarea solului din **zona vadoasă** a unui **acvifer freatic** aflat în legătură hidrolică cu **rețeaua hidrografică** a fost declanșată de dezafectarea unor **rezervoare de hidrocarburi** amplasate pe zona de **cumpană a curgerii de suprafață** (Fig.2).

Dezafectarea rezervoarelor a durat **1 an**, perioadă în care calitatea solului din vecinătatea zonei de amplasare a rezervoarelor a fost monitorizată pe **grosime de 1m**, printr-o rețea de **98** de puncte de observație. Monitorizarea a avut ca obiectiv determinarea concentrației de **benzen** din sol, **benzenul fiind unul din componentele cele mai mobile** din rezervoarele dezafectate.

Rezultatul **contaminării continue pe durata unui an**, a condus la afectarea solului pe o **grosime de 1 m**, valorile **concentrației medii ale benzenului fiind cuprinse între 0,0 și 0,8 mg/g**, concentrație raportată la masa solului (Fig.2).



**Fig.2.** Zonarea contaminării solului pe durata unui an și poziția celor 33 de profile de simulare (SM1-SM33) propuse pentru simularea migrării benzenului în zona vadoasă a acviferului freatic.

**Obiectivele** modelării și simulării migrării **benzenului** prin zona vadoasă sunt:

- distribuția concentrației benzenului **pe toată grosimea zonei vadoase**:
  - la **5 ani** de la declanșarea contaminării;
  - la **10 ani** de la declanșarea contaminării
- variația în  **timp**  a concentrației benzenului ajunsă în **acvifer** pe perioada simulării migrației contaminatului în zona vadoasă (0-10 ani).

## 1.1. Baza de date a aplicației

**Baza de date** a aplicației este stocată într-un fișier de tip **excel** și conține **datele** necesare simulării unidimensionale a migrării benzenului (pe toată grosimea zonei vadoase) în orice punct din interfluviul celor două râuri (**Fig.1**), grupate în **8 pagini** (sheets):

- 
- **1.CONTURUL MODELULUI** conține coordonatele colțurilor unui pătrat în care vor fi încadrate toate punctele de observație și cele de simulare ale aplicației.
- 
- **2.MODELUL DIGITAL AL TERENULUI** conține coordonatele celor 106 puncte pe baza cărora se va construi modelul digital al terenului.
- 
- **3.REȚEAUA HIDROGRAFICĂ** conține digitizarea celor două râuri care se află în zona modelată.
- 
- **4.COTA CULCUȘULUI ACVIFERULUI** conține coordonatele a 25 de puncte în care sunt cunoscute cotele culcușului acviferului.
- 
- **5.COTA NIVELUI PIEZOMETRIC** conține coordonatele a 61 de puncte în care se cunoște cota nivelului piezometric al **acviferului freatic** din baza **zonei vadoase**.
- 
- **6.CONCENTRAȚIA CONTAMINANTULUI** conține:
    - coordonatele a 98 de puncte în care s-a determinat **concentrația medie în benzen** a stratului de sol cu grosimea 1m, la un an după declanșarea procesului de contaminare.
    - coordonatele a 56 de puncte care sunt amplasate pe **conturul de concentrație zero** a benzenului, în stratul de grosime de 1 metru, după un an de contaminare continuă.
    - coordonatele celor 9 puncte amplasate pe **conturul zonei în care sunt amplasate rezervoarele de hidrocarburi** care produc contaminarea continuă a solului pe o grosime de 1m la finalul perioadel de contaminare de 1 an.
- 
- **7.PARAMETRII SIMULĂRII** conține :
    - **PARAMETRII ZONEI VADOASE** (pe întreaga grosime):
      - Litologia:
        - nisip argilos (Loamy sand)
      - Densitatea în stare uscată (Dry Bulk Density)[g/cm<sup>3</sup>]:
        - Dens.=1.38 g/cm<sup>3</sup>
      - Coeficientul de permeabilitate (Intrinsic Permeability)[cmp]
        - Kp=5.00E-8cm<sup>2</sup>
      - Coeficientul de discontinuitate (Disconnectedness Index: c; §3.2)[-]
        - C=3.9
      - Porozitatea efectivă (Effective porosity)[-]:

- $n_e=0.36$
- Conținutul de carbon organic (Fraction Organic Content)[%]:
  - $C_{org}=0.3\%$
- Capacitatea de schimb ionic (Cation Exchange Capacity)[g\_echiv/g]:
  - $CEC=0.00 \text{ g\_echiv/g}$
- Coeficientul Freundlich (Freundlich Coeficient)[-]:
  - $FRN=0.6$
- **PARAMETRII CONTAMINĂRII:**
  - Grosimea zonei vadoase contaminate (Thickness):
    - $ZVC=1,0 \text{ m}$
  - Concentrația medie a contaminării pe grosimea de 1 m a zonei vadoase (ZVC) la finalul perioadei de contaminare de 1 an, când s-a determinat prin monitorizare în cele 98 de puncte:
    - $ConcMedieCont=0,3 \text{ mg (contaminant: benzen)/g (sol din zona vadoasă)}$
  - Tipul contaminantului:
    - Contaminant: BENZEN
- **PARAMETRII ACVIFERULUI** (pe verticala simulării):
  - Conductivitatea hidraulică a acviferului (Saturated Hydraulic Conductivity):
    - $K=1 \text{ m/zi}$
  - Concentrația contaminantului în acvifer la începutul perioadei de simulare:
    - $C_{acvifer}=0.0 \text{ mg/l}$

- 
- **8.TEMA MASTER** conține coordonatele a 33 de puncte (notate SM1, Sm2, ..., SM33) plasate în interfluviul celor două râuri, propuse pentru simularea unidimensională a migrării benzenului.

**NOTĂ.**

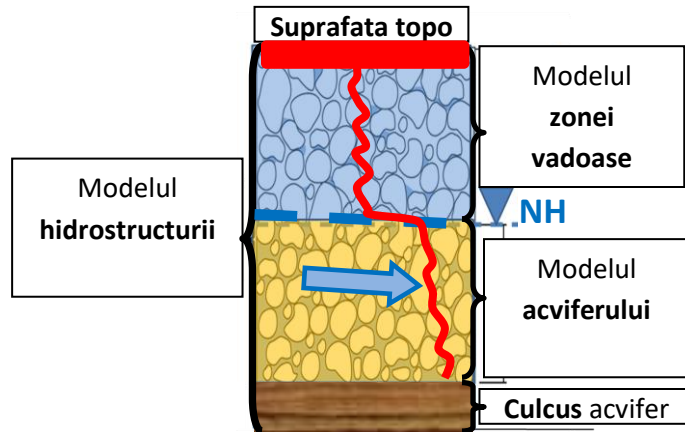
1. Parametrii geometrici necesari simulării curgerii și transportului de masă din zona vadoasă (ex.: grosimea zonei vadoase; afluxul de contaminant:  $q[\text{mg/cm}^2 \cdot \text{lună}]$ ; vezi §5.4.1; grosimea acviferului; gradientul hidraulic) se calculează pe baza datelor din primele 6 pagini (sheets) ale fișierului excel.
2. Fișierul excel are numele BAZA DE DATE\_MASTER\_2020

## 2. Modelul conceptual al hidrostructurii

Migrarea benzenului se produce în ambianța *spațială*, *parametrică* și *energetică* a hidrostructurii în care este cuprinsă *zona vadoasă*.

**Modelul conceptual al hidrostructurii** în care se produce migrarea benzenului are trei componente (**Fig.3**):

- **modelul spațial** cu cele trei unități distincte:
  - zona vadoasă
  - acviferul
  - culcușul acviferului
- **modelul parametric** al hidrostructurii
- **modelul energetic** al deplasării apei și benzenului în cele trei unități ale hidrostructurii.



**Fig.3.** Modelul conceptual al hidrostructurii și traseul potențial al migrării contaminanților

### 2.1. Modelul spațial

**Modelul spațial al hidrostructurii (Fig.4)** se construiește (cu ajutorul programului **SURFER**) pe baza **datelor** obținute din **investigarea zonei** ( fisierul de tip excel: **BAZA DE DATE\_MASTER2020**):

- Conturul în plan al modelului (1.CONTURUL MODELULUI)
- Coordonatele punctele de digitizare a cotei suprafeței topografice (2. MODELUL DIGITAL AL TERENULUI))
- Traseul rețelei hidrografice (3.RETEAUA HIDROGRAFICĂ)
- Coordonatele punctelor de digitizare a cotei culcușului acviferului (4.COTA CULCUȘULUI ACVIFERULUI))
- Cota nivelului piezometric al acviferului freatic in 61 de puncte de observație (5. COTA NIVELULUI PIEZOMETRIC))
- Pozitia stațiilor de monitorizare a calității solului (6.CONCENTRAȚIA CONTAMINATULUI).

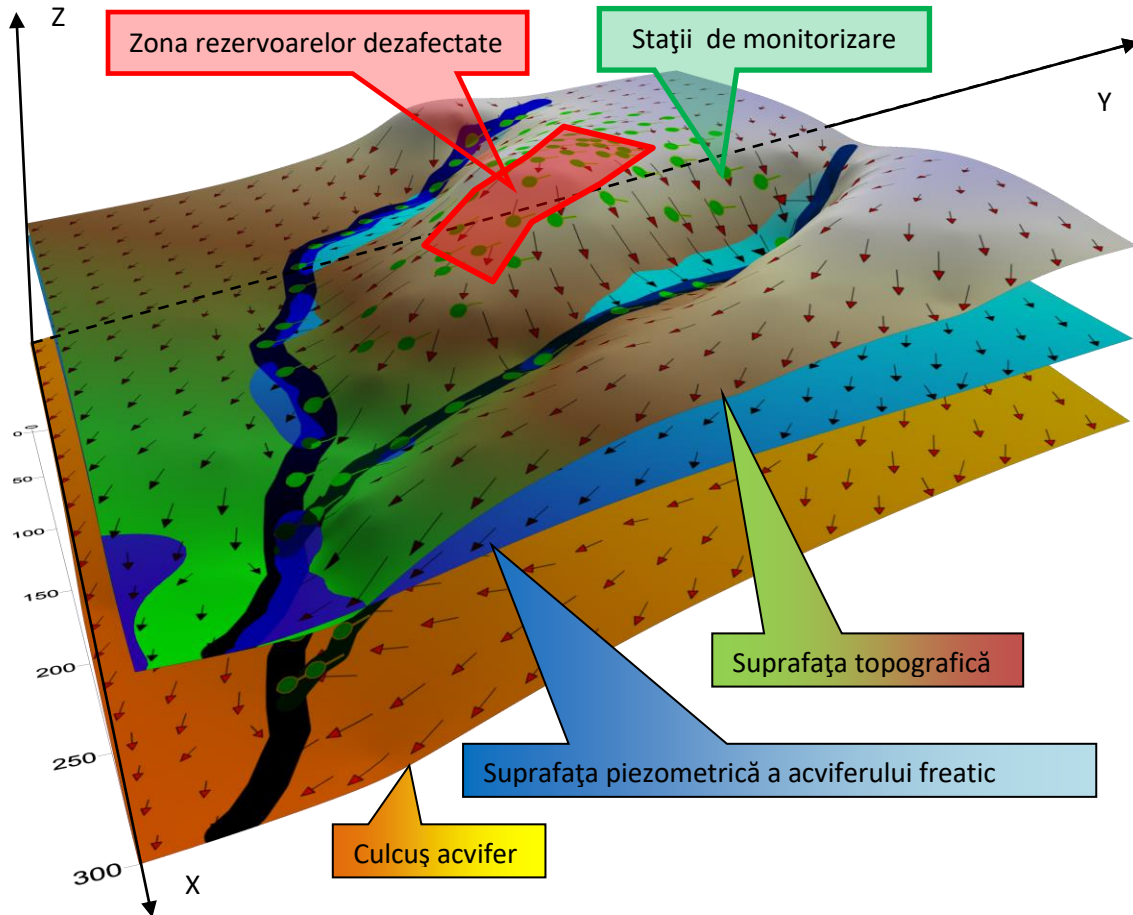
**Etapele** realizării modelului spațial al hidrostructurii sunt:

- Calculul **rețelelor de interpolare** de tip **GRD** pentru cele trei suprafețe ale modelului:
  - Suprafața topografică
  - Suprafața piezometrică a acviferului freatic
  - Suprafata culcușului acviferului

**NOTA: Geometria rețelelor de interpolare (\*.grd) trebuie să fie identică pentru toate cele 3 suprafețe, pentru calcule realizate cu rețelele de interpolare:**

- Xmin=0 m; Xmax=300 m; dX=3 m
- Ymin=0 m; Ymax=300 m; dY=3 m

- Reprezentarea celor trei suprafețe prin hărți de tip: **3D Map>Surface**
- Reprezentarea rețelei hidrografice prin hărți de tip: **Base**
- Reprezentarea poziției punctelor de monitorizare prin hartă de tip: **Post Map**
- Suprapunerea celor 5 hărți, în același sistem de coordonate



**Fig.4. Modelul spațial al hidrostructurii**

**Modelul spațial al hidrostructurii** furnizează **elementele spațiale** necesare modelării migrării benzenului (vezi și **Fig.11**):

- grosimea zonei vadoase
- grosimea acviferului freatic
- gradientul hidraulic al acviferului freatic

**NOTA: Elementele spațiale** pentru fiecare student sunt în pagina **8.TEMA MASTER** din fișierul **BAZA DE DATE\_MASTER\_2020 (coordonatele poziției pe care se va face simularea va fi distribuită după cursul introductiv)**



## 2.2. Modelul parametric

Migrarea benzenului în zona vadoasă este condiționată de două categorii de parametri ai hidrostructurii:

- parametrii zonei vadoase;
- parametrii acviferului freatic.

precizate pentru fiecare student în pagina:

**SIMULARE\_303** din fișierul de pe site:

**excel\_303 file**

### 2.2.1. Parametrii zonei vadoase

Parametrii zonei vadoase care condiționează migrarea contaminanților (benzenul în zona investigată) sunt determinați de **litologia** formațiunilor din zona vadoasă.

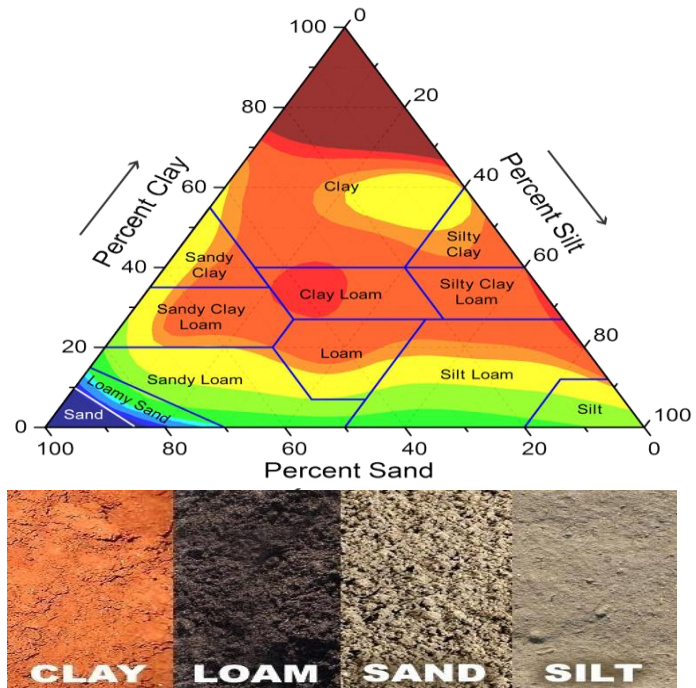
**Litologia** predominantă a zonei vadoase în zona investigată este reprezentată de un **nisip argilos (loamy sand; Fig.5)** ale cărui caracteristici luate în considerare pentru modelarea migrării benzenului sunt:

- Densitate (Dens[g/cm<sup>3</sup>])
- Permeabilitate (K[[cm<sup>2</sup>])
- Porozitate efectivă (**ne[-]**)
- Indice de discontinuitate a porilor (**C[-]**)
- Conținutul de carbon organic (**C<sub>org</sub>[%]**)
- Capacitatea de schimb ionic (**CSI[g-echiv/g]**)
- Coeficientul Freundlich (**Coef\_Freund[-]**)

### 2.2.2. Parametrii acviferului

Singurul parametrul al acviferului utilizat în modelarea migrării benzenului în zona vadoasă este **conductivitatea hidraulică în stare saturată**. Pentru acviferul freatic din baza zonei vadoase, acvifer acumulat în pietrișuri, **conductivitatea hidraulică medie** este:

$$\bar{K} = 1 \frac{m}{zi}$$



**Fig.5. Litologia zonei vadoase**

### 2.3. Modelul energetic

**Potențialul energetic total** al apei subterane din zona vadoasă ( $H$ ) are patru componente:

$$H = h_z + h_c + h_o + h_{ech}$$

- **Potențial gravitațional** ( $h_z$ );
- **Potențial capilar**/potențialul matricei minerale ( $h_c$ );
- **Potențial osmotic** ( $h_o$ );
- **Potențial electrochimic** ( $h_{ech}$ );

Componentele **potențialului energetic total** al apei subterane din zona nesaturată se grupează în două categorii (**Fig.6**):

- **Potențialul gravitațional:**  $h_z$
- **Potențialul apei din pori:**  $h = h_c + h_o + h_{ech}$

rezultând expresia simplificată:

$$H = h_z + h$$

#### 2.3.1. Potențialul gravitațional

Potențialul gravitațional se exprimă de regulă prin raportarea energiei potențiale calculată pentru o anumită cotă reper, la greutatea volumică a apei:

$$h_z = \frac{(\rho \cdot g \cdot z)}{\rho \cdot g} = z$$

În care:

$\rho$  - densitatea apei,  $[M \cdot L^{-3}]$ ;

$g$  - accelerația gravitațională  $[L \cdot T^{-2}]$

$z$  - cota în raport cu reperul energetic,  $[L]$

Pentru evaluarea curgerii în zona vadoasă se preferă măsurarea lui  $z$  de la suprafața terenului care are valoarea **ZERO** (**Fig.6**).

#### 2.3.2. Potențialul capilar

**Potențialul capilar** este în funcție de **umiditatea zonei vadoase** (vezi **Capitolul 2. Modelul hidrologic**). Valoarea potențialului capilar în zona vadoasă este **negativă** și este cu atât mai mică cu cât umiditatea este mai mică. Evaluarea potențialului capilar se face cu ecuația (Stallman):

$$h_c = \frac{2 \cdot \sigma \cdot \cos \alpha}{r_c \cdot \rho \cdot g}$$

$\sigma$  - tensiunea superficială la interfața gaz – apă  $[M \cdot T^{-2}]$ ;

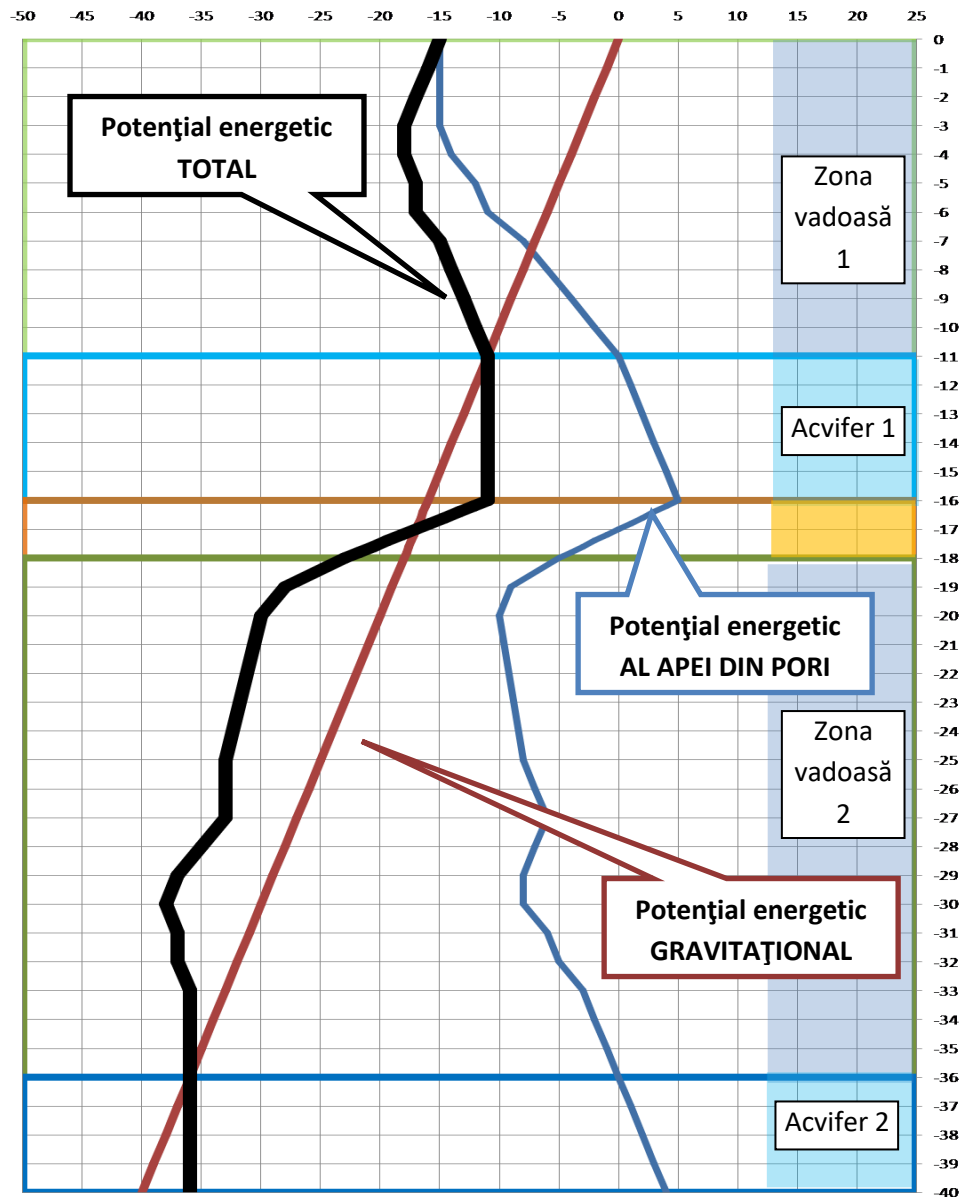
$r_c$  - raza porilor capilari  $[L]$

$\alpha$  - unghiul de contact (zero la interfața apă/matrice, în general)  $[grade - sexagesimede]$

$\rho$  - densitatea apei,  $[M \cdot L^{-3}]$ ;

$g$  - accelerația gravitațională  $[L \cdot T^{-2}]$

*Potențialul osmotic și potențialul electrochimic au gradient redus în zona vadoasă, motiv pentru care sunt **neglijate** în evaluarea **potențialului total**.*



*Fig.6. Componentele potențialului energetic TOTAL într-o hidrostructură cu două acvifere și două zone vadoase*

### 3. Modelul hidrologic

Modelul ciclului hidrologic din zona investigată are ca obiectiv determinarea **umidității** zonei vadoase, parametru important în modelul curgerii fluidelor pentru:

- Potențialul energetic al apei din pori (**vezi paragraful 1.3.2**);
- Conductivitatea hidraulică în mediu nesaturat.

#### 3.1. Umiditatea zonei vadoase

Estimarea **umidității medii a zonei vadoase** se face cu ajutorul modelului bilanțului anual exprimat prin relația:

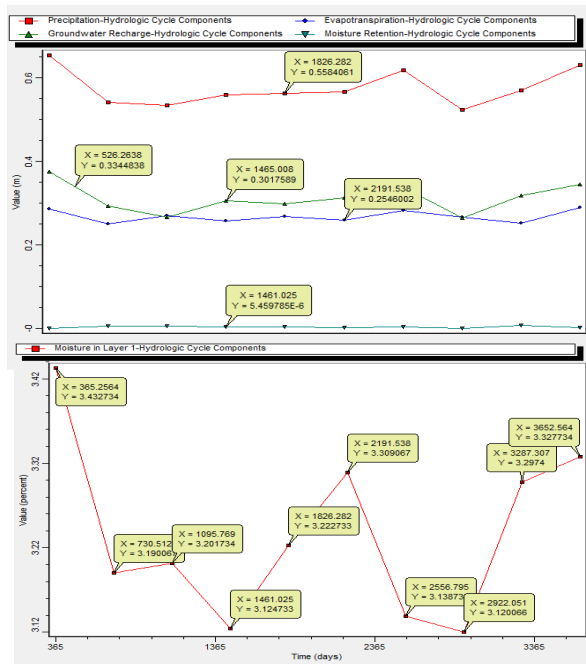
$$P - E - MR = S + G = Y$$

- $P$  : precipitația;  $E$  : evapotranspirația;  $S$  : curgerea de suprafață;
- $MR$  : refacerea umidității;  $G$  : curgerea subterană;  $Y$  : curgerea totală;
- $G_{VZ}$  - grosimea zonei vadoase
- $\theta$  - **umiditatea medie a zonei vadoase** se estimează prin raportarea volumului unitar de apă provenit din refacerea umidității la volumul unitar al zonei vadoase care a stocat această apă:

$$\theta = \frac{MR}{G_{VZ}}$$

Pentru zona investigată se vor utiliza datele meteorologice de la stația meteorologică **Târgoviște** generate pe **perioada simulării de 10 ani** cu ajutorul simulatorului **Weather generator (SESOIL:Climate)**. Se va reprezenta grafic, pentru perioada simulării procesului de migrare a benzenului (10 ani; din Annual Summary), variația parametrilor pe două grupe (**Fig.7**):

- **GRUPA 1** (exprimat în  $\left[ \frac{L^3}{L^2 \cdot T} \right]$ ; ex.: [m]):
  - precipitații
  - evapotranspirație
  - realimentarea acviferului
  - umiditatea reținută în zona vadoasă
- **GRUPA 2** (exprimat în [%])
  - umiditatea în stratul 1 (stratul de 1 m, contaminat continuu, pe durata unui an).



**Fig.7. Variația anuală a elementelor ciclului hidrologic**

### 3.2. Conductivitatea hidraulică a zonei vadoase

Evaluarea conductivității hidraulice pentru zona vadoasă depinde de:

- **Permeabilitatea** tipurilor litologice estimată pentru fiecare tip litologic cu:

$$K_p = C \cdot d_e^2$$

- Relația dintre **presiunea capilară și umiditate** determinată experimental și modelată prin formule empirice (Brooks & Corey) de tipul:

$$K(\theta) = K \cdot K_r(h)$$

- $K_r(h)$ -conductivitatea hidraulică relativă (la presiunea apei din pori)

$$K_r(h) = \theta^c$$

$$K_r(h) \in (0;1) \quad \text{pentru zona NESATURATA}$$

- $c$ -indicele discontinuității porilor estimat prin:

$$c = \frac{2 + 3 \cdot m}{m}$$

- $m$ -indicele distribuției porilor din modelul Brooks&Corey)

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\Phi - \theta_r} = \left( \frac{h_b}{h} \right)^m, h < h_b$$

- $h_b$  - presiunea minimă de drenaj [L]
- $\theta_r$  - umiditatea de retenție;  $\theta$  - umiditatea;  $\Phi$  - porozitatea
- $K$  - conductivitatea hidraulică în teren SATURAT:

$$K = \frac{K_p \cdot \rho \cdot g}{\mu}$$

- $g$  - accelerația gravitațională, [L·T<sup>-2</sup>];  $\rho$  - densitatea apei, [M·L<sup>-3</sup>];
- $\mu$  - vâscozitatea dinamică, [M·L<sup>-1</sup>·T<sup>-1</sup>];

### 3.3. Viteza de curgere a apei subterane în zona vadoasă

Modelul curgerii apei subterane în zona nesaturată este descrisă de legea lui Darcy adaptată mediului cu umiditate variabilă:

$$\vec{v}_n = - \frac{K_p \cdot K_r(h) \cdot \rho \cdot g}{\mu} \cdot \frac{\partial H}{\partial n} = -K \cdot K_r(h) \cdot \frac{\partial H}{\partial n}$$

Parametrii principali de senzitivitate ai modelului curgerii apei subterane sunt:

- coeficientul discontinuității porilor ( $c$ )
- coeficientul de permeabilitate ( $K_p$ )
- porozitatea ( $\Phi$ )

#### 4. Modelul eroziunii

Modelul eroziunii are ca obiectiv evaluarea cantității de sediment, de la suprafața solului, antrenat prin **eroziune**. Efectul proceselor din ciclul sedimentar se resimte asupra transportului și transformărilor contaminantului în zona sedimentelor.

**Eroziunea** este datorată averselor, curgerii de suprafață și factorilor specifici(**Fig.8**):

- impactul picaturilor de ploaie (care detasează sedimentele)
- caracteristicile terenului:
  - acoperire
  - panta
  - neregularitatea suprafeței terenului
- capacitatea de infiltrare



Componentele procesului de **eroziune** modelate în ciclul sedimentar sunt:

- detasare/dislocare/desprindere
- transport
- sedimentare



**Fig.8.** Efectul eroziunii asupra solului

Eroziunea are ca efect reducerea cantității de contaminant care susține migrarea acestuia spre nivelul piezometric al acviferului freatic din baza zonei vadoase. Pentru simularea migrării benzenului, procesele erozionale vor fi neglijate.

## 5. Modelul contaminării

Orice strat din zona nesaturată poate **primi, stoca sau transfera** poluantul în alt strat. Migrarea contaminanților se bazează pe un **bilanț de masă** care cuprinde componentele ce migrează în zona nesaturată dintr-un strat în altul.

Procesele modelate în ciclul transportului contaminanților sunt cuplate cu procesele din ciclurile anterioare (**ciclul hidrologic și cel de eroziune**) și sunt controlate de procesele interconectate în ecuația de bilanț:

$$O(t-1) + I(t) = T(t) + R(t) + M(t)$$

în care

- $O(t-1)$ -cantitatea de contaminant aflat în sol la momentul  $t-1$  [ $\mu\text{g} / \text{cm}^2$ ];
- $I(t)$ -cantitatea de contaminant introdusă în sol la momentul  $t$  [ $\mu\text{g} / \text{cm}^2$ ];
- $T(t)$ - cantitatea de contaminant transformată în sol la momentul  $t$  [ $\mu\text{g} / \text{cm}^2$ ];
- $R(t)$ -cantitatea de contaminant rămasă în sol la momentul  $t$ ; [ $\mu\text{g} / \text{cm}^2$ ];
- $M(t)$ -cantitatea de contaminant migrată din sol la momentul  $t$ ; [ $\mu\text{g} / \text{cm}^2$ ]

### 5.1. Partiționarea contaminatului

Participarea **contaminantului** la procesele implicate în **transportul și transformarea** lui depinde de **partiționarea concentrației contaminantului** între cele **trei faze de agregare** în care se găsește:

- **Gaz** (dispersat în aerul din sol): estimat cu legea lui Henry modificată:

$$c_{sa} = \frac{c \cdot H}{R \cdot (T + 273)};$$

- $c_{sa}$  -concentrația poluantului în aerul din sol [ $\mu\text{g} / \text{mL}$ ]
- $c$  -concentrația poluantului în apa din sol [ $\mu\text{g} / \text{mL}$ ]
- $H$  -constanta lui Henry [ $\text{m}^3 \cdot \text{atm} / \text{mol}$ ]
- $R$  -constanta gazelor [ $\text{m}^3 \cdot \text{atm} / \text{mol}$ ]
- $T$  -temperature solului [ $^{\circ}\text{C}$ ]
- **Lichid** (dizolvat în apa din sol): se determină prin măsurători în laborator
- **Solid** (adsorbit de matricea minerală a solului): se calculează utilizând izoterme de tipul izotermei lui Freundlich:

$$s = K_d \cdot c^n$$

- $s$  -concentrația contaminantului adsorbit pe sol [  $\mu\text{g} / \text{g}$  ]
- $K_d$  -coeficientul de partiție a contaminantului [  $(\mu\text{g} / \text{g}) / (\mu\text{g} / \text{mL})$  ]
- $c$  -concentrația poluantului în apa din sol [  $\mu\text{g} / \text{mL}$  ]
- $n$  -exponentul lui Freundlich

## 5.2. Migrarea contaminantului pe verticală

Migrarea contaminanților în zona vadoasă se face preponderent pe verticală:

- **ascendent** prin volatilizare
- **descendent** prin advecție, sorbție, schimb ionic și hidroliză

### 5.2.1. Migrare ascendentă

**Volatilizarea**, rezultat al procesului de **difuzie**, poate fi evaluată pe baza unui model semiempiric (Farmer et al. (1980) și Millington & Quirk(1961) care este o versiune discretizată a legii lui Fick (utilizată și pentru volatilizarea în atmosferă):

$$J_a = -D_a \cdot \left( \frac{f_a^{10}}{f^2} \right) \cdot \frac{dC_{sa}}{dz}; J_a \text{ -fluxul fazei gazoase prin sol } \left[ \mu\text{g} / \text{cm}^2 \cdot \text{s} \right]$$

- $D_a$  -coeficientul de difuzie a vaporilor [  $\frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$  ];  $C_{sa}$  -concentrația poluantului în aer [  $\mu\text{g} / \text{mL}$  ]

### 5.2.2. Migrare descendentă

Transportul descendent este controlat de patru procese: advecție, sorbție, schimb ionic și hidroliză care au efect general **reducerea** concentrației contaminantului aflat în stare **lichidă** și **solidă**.

#### 5.2.2.1. Advecție

Transportul determinat de procesul de **advecție** care nu diferențiază contaminanții în funcție de caracteristicile lor chimice (toți ajung la nivelul hidrostatic în același timp !!!), poate fi estimat printr-un model care nu ține seama de partiția contaminantului în cele trei stări de agregare:

$$D = \frac{J_w t_c}{\theta}; D \text{ -adâncimea atinsă după timpul } t_c$$

- $J_w$  viteza apei [cm/s];  $t_c$  -timpul de advecție [s];  $\theta$  -umiditatea solului [cm<sup>3</sup>/cm<sup>3</sup>]

Pentru luarea în considerare a efectului **partiției contaminantului** în cele trei stări de agregare se utilizează modelul de tip **linear** (Jury et.al. 1984):

$$D = \frac{J_w \cdot t_c}{\theta + \rho_b \cdot K_d + \frac{f_a \cdot H}{R \cdot (T + 273)}} \text{ (Fig.8)}$$

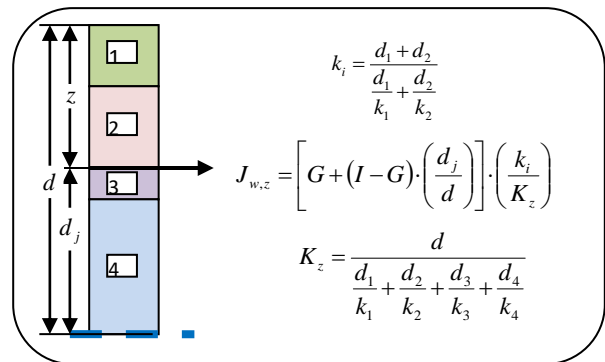


Fig. 8. Modelul partiției lineare Jury



### 5.2.2.2. Sorbție

**Sorbția** este un proces de fixarea a contaminantului pe matricea minerală, estimată cantitativ prin **izoterme experimentale**, de tipul izotermei Freundlich:

$$s = K_d \cdot c^n$$

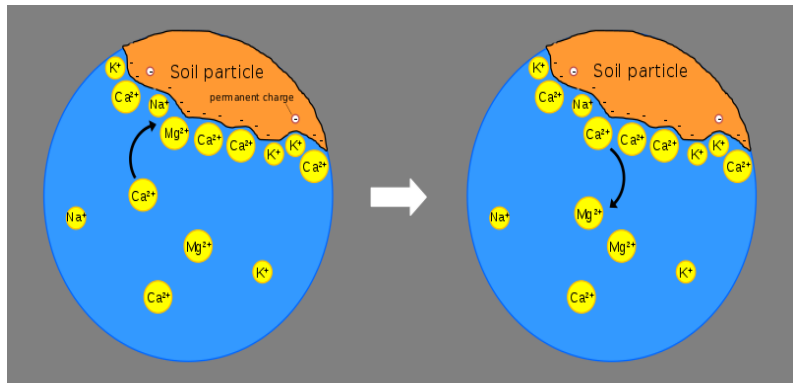
**NOTA:** Pentru substanțele organice, adsorbția are loc preponderant pe particulele de carbon organic din sol. **Coeficientul de partiție pentru carbon organic** ( $K_{oc}$ ) poate fi măsurat și convertit în **coeficient de partiție** ( $K_d$ ) prin multiplicare cu fracția de carbon organic din sol. Exponentul lui Freundlich  $n \in [0,7;1,7]$  și în lipsa datelor se utilizează  $n = 1$ .

### 5.2.2.3. Schimb ionic

Mecanismul de schimb ionic (**Fig.9**) este estimat (Bonazountas & Wagner, 1984) prin relația:

$$MEC = a \cdot CEC \cdot \frac{MWT}{VAL}$$

- $MEC$  -cantitatea maximă de contaminant fixat pe sol prin schimb ionic [ $\mu g / g_{sol}$ ]
- $a = 10$ - coeficient de omogenizare dimensională
- $CEC$  -capacitatea de schimb cationic a solului [ $meq/100_{g_{sol_{uscat}}}$ ]
- $MWT$  -greutatea moleculară cationului de contaminant [ $g/mol$ ]
- $VAL$  -valența cationului [-]



**Fig.9.** Mecanismul schimbului ionic

Schimbul ionic se presupune că se produce instantaneu și ireversibil și este alternativa la sorbție. Dacă se ia în considerare schimbul ionic se exclude funcționarea **sorbției** (prin atribuirea valorii zero **coeficientului de partiție pentru carbon organic** ( $K_{oc}$ ) și **coeficientului de partiție** ( $K_d$ )).

#### 5.2.2.4. Biodegradare

**Biodegradarea** este modificarea structurală a contaminantului și este estimată utilizând o rată a degradării atât pentru starea lichidă/dizolvată cât și pentru cea solidă/adsorbită conform modelului din ecuația:

$$P_d = (c \cdot \theta \cdot k_{dL} + S \cdot \rho_b \cdot k_{ds}) \cdot A \cdot d_s \cdot \Delta t$$

$P_d$  - masa de contaminant degradat în intervalul de timp  $\Delta t$ ; [ $\mu g$ ]

$k_{dL}$  - rata de biodegradare a componentei în stare lichidă [ $zi^{-1}$ ]

$k_{ds}$  - rata de biodegradare a componentei în stare solidă [ $zi^{-1}$ ]

$A$  - aria pe care este aplicat contaminantul [ $cm^2$ ]

$d_s$  - adâncimea substratului de sol [ $cm$ ];

$\Delta t$  - intervalul de timp [ $zi$ ]

$c$  - concentrația poluantului în apa din sol [ $\mu g / mL$ ]

$\theta$  - umiditatea solului [ $mL/mL$ ]

$\rho_b$  - densitatea solului [ $g/mL$ ]

$s$  - concentrația contaminantului adsorbit pe sol [ $\mu g / g$ ]

Parametrul cel mai incert este **rata biodegradării** ( $k_{ds}$ ) care este influențată de condițiile locale și în consecință se recomandă să fie determinată experimental.

#### 5.2.2.5. Hidroliza

Evaluarea degradării contaminantului prin **hidroliză** se bazează pe același model al biodegradării, singura modificare fiind modul de calcul al ratelor de degradare care se calculează cu relația:

$$k_{dL} = k_{ds} = k_h = k_0 + k_H [H^+] + k_{OH} [OH^-]$$

în care

$k_h$  - rata constantă a hidrolizei [ $zi^{-1}$ ]

$k_0$  - rata constantă a hidrolizei neutral [ $zi^{-1}$ ]

$k_H$  - rata constantă pentru hidroliza acidă [ $zi^{-1} \cdot mol \cdot L$ ]

$[H^+] = 10^{-pH}$  - concentrația ionilor de hidrogen [ $mol / L$ ]

$k_{OH}$  - rata constantă a hidrolizei bazice [ $zi^{-1} \cdot mol \cdot L$ ]

$[OH^+] = 10^{pH-14}$  - concentrația ionului hidroxil [ $mol / L$ ]

### 5.3. Tipul contaminatului

Tipul contaminantului ales pentru simulare este **benzenul** pentru că este printre cele mai **solubile** și **mobile** componente aflate în compoziția produsele petroliere din depozitele dezafectate.

Caracteristicile fizico-chimice ale benzenului pentru condițiile standard de presiune și temperatură (**Tabelul 1**) sunt utilizate în simularea pe durata celor 10 ani.

**Tabelul 1.** Caracteristicile fizico-chimice standard ale benzenului

Caracteristici fizico-chimice	Valoare	Unitate de măsură
Solubilitatea în apă	1780,00	mg/litru
Coeficientul de difuzie în aer	6652,80	cm <sup>2</sup> /zi
Constanta lui Henry	0,555E-2	m <sup>3</sup> *atm/mole
Coeficientul de partiție pentru Carbonul organic	31,00	mg/litru
Coeficient de adsorbție	0,00	mg/litru
Greutate moleculară	78,10	g/mol
Valență	0,00	-
Constanta de hidroliză neutră	0,00	/oră
Constanta de hidroliză bazică	0,00	litru/mol/zi
Constanta de hidroliză acidă	0,00	litru/mol/zi
Coeficientul ratei degradării fazei lichide	0,00	/oră
Coeficientul ratei degradării fazei solide	0,00	/oră
Constanta de disociere	0,00	/oră
Concentrația relativă a ligandului	0,00	-
Greutatea moleculară a ligandului	0,00	g/mol

### 5.4. Tipul contaminării

Tipul de contaminare ales este cel **continuu**, cu un flux **unitar constant** ( $q$ ) pe o perioadă cunoscută ( $T$ ), fără luarea în calcul contribuția **eroziunii** la reducerea masei de sol contaminat.

#### 5.4.1. Fluxul unitar de contaminant ( $q$ )

Determinarea **masei** (mg) de contaminant pe unitatea de **suprafață** ( $A_{unitara}$ ) și unitatea de  **timp aleasă** ( $\Delta t$ ), pentru întreaga **durată a procesului de contaminare** ( $T = n \cdot \Delta t$ ), se stabilește din valoarea **concentrației medii a contaminantului** pe **grosimea stratului poluat**, calculată pe baza probărilor executate pe **grosimea stratului contaminat** ( $g$ ) la sfârșitul procesului de contaminare.

##### 5.4.1.1. Datele necesare pentru evaluarea lui $q$

Datele necesare evaluării fluxului unitar de contaminant (**Fig.10**):

- grosimea stratului contaminat:  $g$
- densitatea matricii minerale:  $\rho_m$
- concentrația medie a contaminantului pe grosimea stratului contaminat:  $\bar{c}$
- durata contaminării:  $T$

**5.4.1.2. Etapele evaluării lui q**

- Calculul volumului matricii minerale contaminate:

$$V = g \cdot A_{unitara}$$

- Calculul masei matricii minerale din volumul contaminat:

$$M_m = V \cdot \rho_m$$

- Calculul masei contaminantului din volumul contaminat:

$$M_c = M_m \cdot \bar{c}$$

- Calculul fluxului masic (q) de contaminant pe unitatea de timp ( $\Delta t$ ) si unitatea de suprafata ( $A_{unitara}$ ) pe durata contaminarii (T):

$$q = \frac{M_c}{A_{unitara} \cdot n}$$

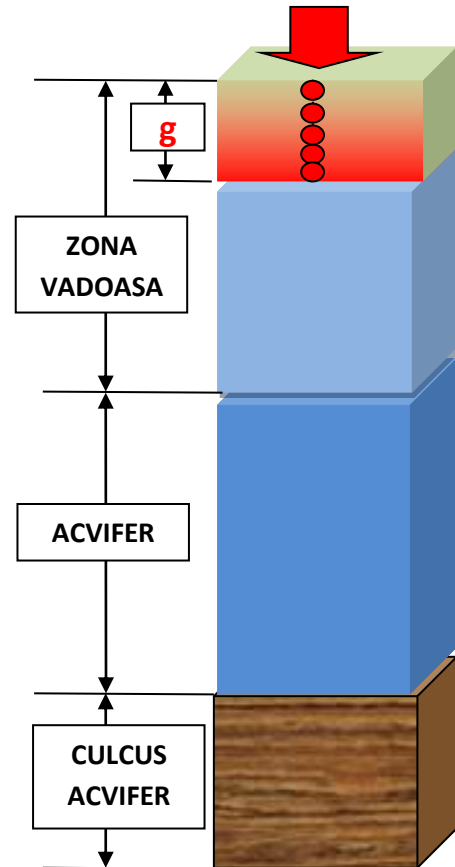
**5.4.1.3. Exemplu de calcul pentru q**

- **Date utilizate**

- $g = 1m$
- $A_{unitara} = 1cm^2$
- $\rho_m = 1,38 \frac{g}{cm^3}$
- $\bar{c} = 7 \frac{mg}{g}$  (masa contaminant/ masa matricii minerale)
- $T = 1an; n = 12; \Delta t = 1luna$

- **Etapele de prelucrare**

- $V = g \cdot A_{unitara} = 100 \cdot 1 \cdot 1 = 100cm^3$
- $M_m = V \cdot \rho_m = 100 \cdot 1,38 = 138g$
- $M_c = M_m \cdot \bar{c} = 138 \cdot 7 = 98,4mg$
- $q = \frac{M_c}{A_{unitara} \cdot n} = \frac{98,4}{1 \cdot 12} = 8,2 \frac{mg}{cm^2 \cdot luna}$



**Fig.10.** Evaluarea fluxului mediu de contaminare (q) pe baza concentratiei medii a zonei contaminate( $\bar{c}$ ).

## 6. Simularea contaminării

Proiectarea simulării migrării benzenului prin zona vadoasă, în condițiile climatice stabilite (preluate de la stația meteorologică **TARGOVIȘTE**), presupune precizarea următoarelor elemente pentru întreaga durată a simulării (**10 ani**):

- Stratificația zonei vadoase (**SESOIL: Layer Parameters**)
- Concentrația inițială a contaminatului în zona vadoasă (**SESOIL: Initial Concentrations**)
- Modelul dinamic al contaminării (**SESOIL: Contaminant Load Schedule**)
- Caracteristicile acviferului freatic din baza zonei vadoase (**SESOIL: Groundwater Settings**)

### 6.1. Stratificarea zonei vadoase

Stratificarea zonei vadoase (**SESOIL: Layer Parameters**) se face în funcție de:

- Caracteristicile contaminării
- Grosimea zonei vadoase
- Heterogenitatea litologică a zonei vadoase
- Restricțiile impuse de metodele numerice de stabilire a soluțiilor modelului matematic

Condițiile zonei investigate în care se face simularea migrării benzenului sunt:

- Caracteristicile contaminării: stratul contaminat are grosimea de **1 m**
- Grosimea zonei vadoase: de la **3 m până la 10 m**
- Heterogenitatea litologică a zonei vadoase: **nisip argilos** pe toată grosimea zonei vadoase
- Restricțiile impuse de metodele numerice de stabilire a soluțiilor modelului matematic:
  - Minimum 2 strate
  - Maximum 4 strate
  - Maximum 10 substrate pe fiecare strat

Stratificarea recomandată în condițiile zonei investigate:

- Numarul de strate: 4
  - Strat1: grosimea: 1m (egală cu grosimea contaminată după un an)
  - Strat2: grosimea: 1/ 3 din (grosimea zonei vadoase-1m)
  - Strat3: grosimea egală cu grosimea strat2
  - Strat4: grosimea egală cu grosimea strat2
- Numarul de substrate: 10 pentru fiecare strat

Parametrii suplimentari pentru completarea stratificției sunt:

- pH-ul = 7 pentru toate stratele
- permeabilitatea precizată în fisierul **excel\_303 file, pagina SIMULARE\_303**
- **RESTUL PARAMETRILOR =1,0 zona vadoasă fiind omogenă.**

## 6.2. Concentrația inițială a contaminantului

Concentrația inițială a contaminatului pentru simulare (SESOL: Initial Concentrations) va fi egală cu ZERO pentru toate stratele și substratele, zona fiind necontaminată înainte de începerea dezafectării rezervoarelor pentru hidrocarburi.

## 6.3. Modelul dinamic al contaminării

Modelul dinamic al contaminării cuprinde 7 parametri pentru primul strat și 5 parametri pentru următoarele 3 strate, completate pentru durata contaminării.

Pentru fiecare strat trebuie precizați următorii parametri (*SESOL:Contaminant Load Schedule*):

- (1)Cantitatea de contaminant care este introdusă în strat:
  - **Pollutant Load** [ $\mu\text{g}/(\text{lună}\times\text{cm}^2)$ ]
- (2)Cantitatea de contaminant transformată în strat:
  - Pollutant transformation [ $\mu\text{g}/(\text{lună}\times\text{cm}^2)$ ]
- (3)Cantitatea de contaminant îndepărtată din strat:
  - Pollutant removal [ $\mu\text{g}/(\text{lună}\times\text{cm}^2)$ ]
- (4)Cantitatea de ligand introdusă în strat:
  - Ligand Input [ $\mu\text{g}/(\text{lună}\times\text{cm}^2)$ ]
- (5)Index de volatilizare:
  - VOLF=0:fara volatilizare/difuzie
  - VOLF=1: volatilizare/difuzie totală
- NUMAI PENTRU PRIMUL STRAT DE LA SUPRAFATA TERENULUI
  - (6)Raportul dintre concentrația contaminantului în curgerea de **suprafață** și din acoperișul stratului:
    - Runoff Index
  - (7)Raportul dintre concentrația contaminantului în **apa de ploaie** și solubilitatea contaminantului în apă:
    - Rain Ratio

### NOTA.

- Pentru **OPRIREA PERIOADEI DE CONTAMINARE** se adauga un an cu ZERO pentru toti **parametrii!!!**
- Modelul dinamic al contaminării cu **benzen** trebuie completat doar cu:
  - (1)Cantitatea de contaminant care este introdusă în strat:
    - **Pollutant Load** [ $\mu\text{g}/(\text{lună}\times\text{cm}^2)$ ] **VALOAREA LUI q CALCULATA**
  - (5)Index de volatilizare:
    - VOLF=0.6: cu volatilizare parțială

## 6.4. Caracteristicile acviferului freatic din baza zonei vadoase

Caracteristicile acviferului care trebuie precizate (SESOL: Groundwater Settings) sunt:

- **Conductivitatea hidraulică** în regim saturat (în *excel\_303 file* pagina *SIMULARE\_303*)
- **Gradientul hidraulic** (în *excel\_303 file* pagina *SIMULARE\_303*; Fig.11)
- **Grosimea acviferului** (în *excel\_303 file* pagina *SIMULARE\_303*; Fig.11)
- **Lățimea zonei contaminate**: 10 m pentru toate simulările
- **Concentrația inițială a benzenului în acvifer**: 0,0 mg/litru pentru toate simulările.

## 7. Rezultatele simulării

Rezultatele simulării pentru zona investigată se ilustrează cu modelele 1D, 2D și 3D ale distribuției concentrației benzenului pe adâncimea zonei vadoase și în acvifer, utilizând 11 profile de simulare amplasate în interfluviul celor două râuri (Fig.12).

### 7.1. Modele 1D ale distribuției benzenului

Modelele unidimensionale pentru distribuția concentrației benzenului se referă la:

- Variația pe **adâncimea** zonei vadoase a concentrației benzenului, la două momente diferite (octombrie anul 5 și septembrie anul 10) pentru cele trei faze:
  - Fază lichidă (*In Soil Moisture*)
  - Fază solidă (*Adsorbed on Soil*)
  - Fază gazoasă (*In Soil Air*)
- Variația în  **timp**  a concentrației benzenului ajunsă în  **acvifer**  pe toată perioada de simulare (septembrie anul 10).

Rezultatele vor fi ilustrate cu grafice ale variației concentrației benzenului și tabelele de valori corespunzătoare.

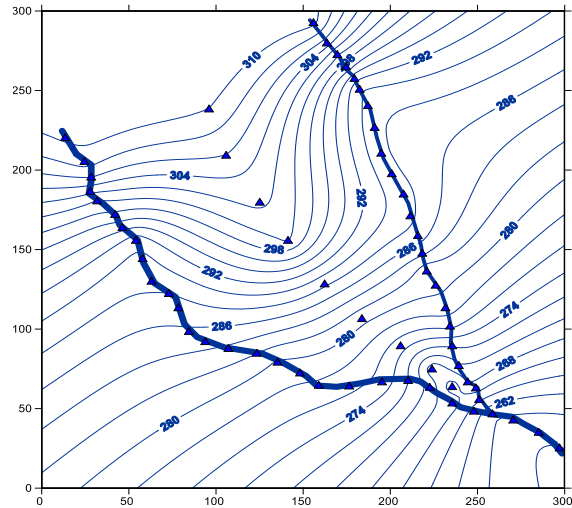


Fig.11. Harta piezometrică a acviferului freatic utilizată pentru calculul grosimii acviferului și a gradientului hidraulic.

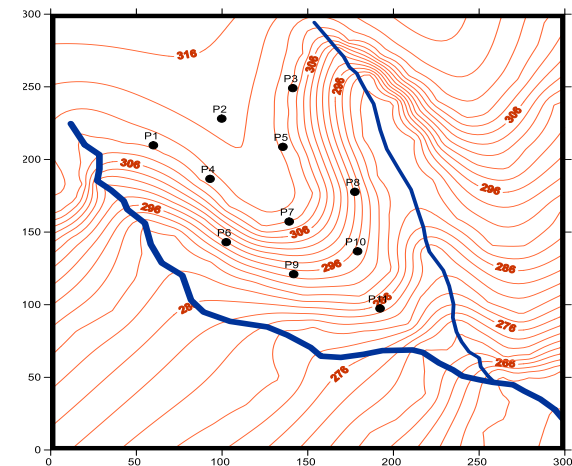


Fig.12. Poziția profilelor de simulare

7.1.1. Model 1D în zona vadoasă pentru octombrie anul 5

Variația pe adâncimea zonei vadoase a concentrației benzenului în **octombrie anul 5** al simulării, pe profilul **P11** (**Fig.13; Tabelul 2**) indică deplasarea concentrației maxime din primul strat, cu grosimea de 1m, spre nivelul piezometric al acviferului freatic aflat la adâncimea de 5,8 m.

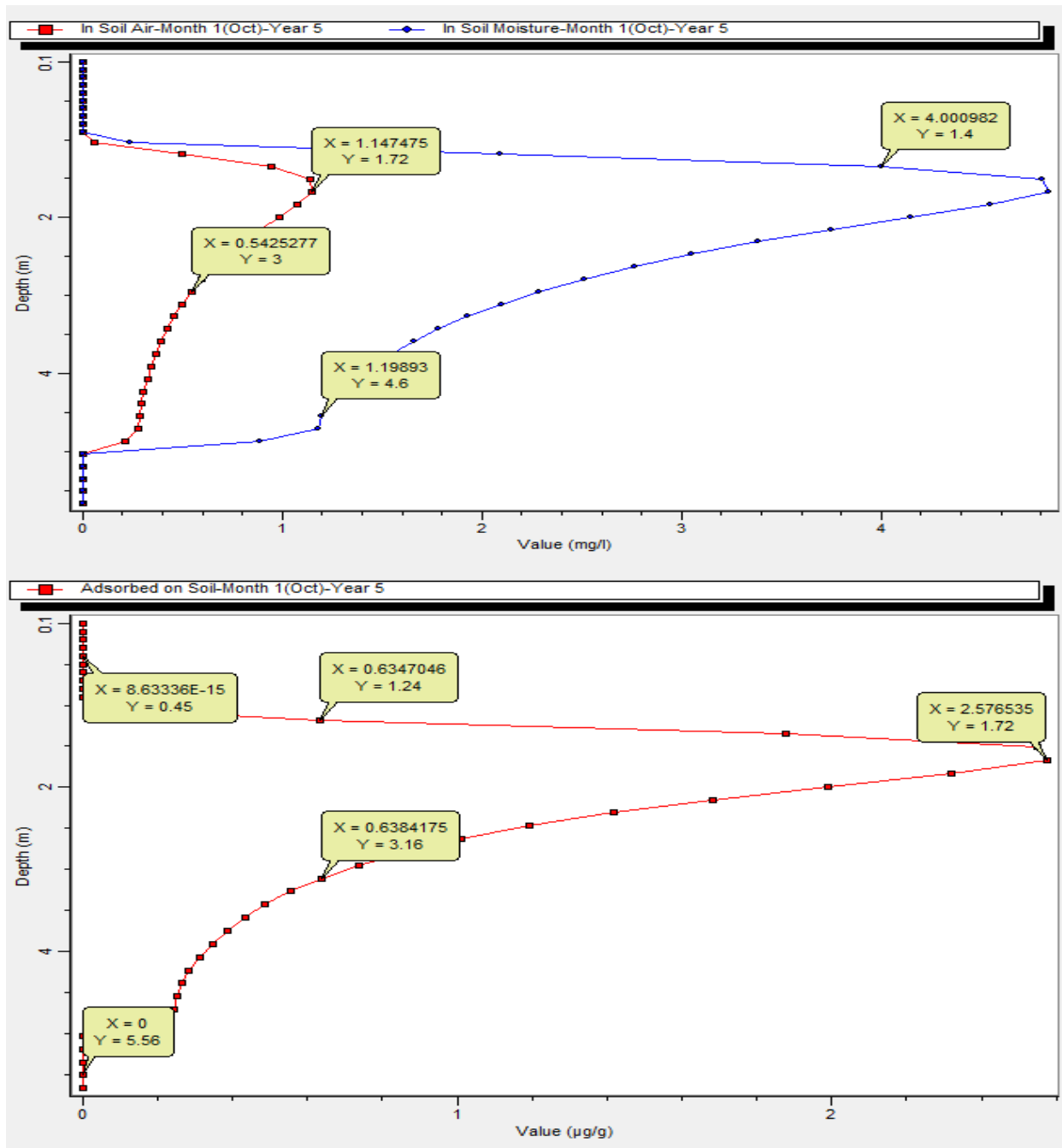


Fig.13. Variația pe adâncimea zonei vadoase a concentrației benzenului în octombrie, anul 5 al simulării, profilul P11.



**Tabelul 2. Distribuția benzenului (P11\_X\_an5)**

Adancime [m]	Benzen[mg/litru]		
	Gaz	Lichid	Solid
0.05	2.37E-09	1.00E-08	8.63E-15
0.15	2.37E-09	1.00E-08	8.63E-15
0.25	2.37E-09	1.00E-08	8.63E-15
0.35	2.37E-09	1.00E-08	8.63E-15
0.45	2.37E-09	1.00E-08	8.63E-15
0.55	2.37E-09	1.00E-08	8.63E-15
0.65	2.37E-09	1.00E-08	8.63E-15
0.75	2.37E-09	1.00E-08	8.63E-15
0.85	2.37E-09	1.00E-08	8.63E-15
0.95	2.37E-09	1.00E-08	8.63E-15
1.08	0.055333	0.233431	0.016461
1.24	0.495067	2.0885	0.634705
1.4	0.948409	4.00098	1.87553
1.56	1.13955	4.80733	2.54694
1.72	1.14747	4.84076	2.57654
1.88	1.07702	4.54354	2.3183
2.04	0.983215	4.14782	1.99164
2.2	0.888658	3.74892	1.68276
2.36	0.801357	3.38063	1.41636
2.52	0.723469	3.05204	1.19444
2.68	0.654937	2.76293	1.01188
2.84	0.594947	2.50986	0.862173
3	0.542528	2.28872	0.739323
3.16	0.496803	2.09583	0.638417
3.32	0.457061	1.92817	0.55559
3.48	0.422686	1.78315	0.487709
3.64	0.393013	1.65798	0.431993
3.8	0.367195	1.54906	0.385738
3.96	0.344194	1.45203	0.346315
4.12	0.323015	1.36268	0.311531
4.28	0.304877	1.28616	0.282925
4.44	0.292636	1.23452	0.264247
4.6	0.284199	1.19893	0.251673
4.76	0.278991	1.17696	0.244032
4.92	0.209982	0.885834	0.151973
5.08	0	0	0
5.24	0	0	0
5.4	0	0	0
5.56	0	0	0
5.72	0	0	0

La acest moment (*octombrie\_an 5*) benzenul nu a ajuns încă în acvifer, concentrația acestuia fiind 0,0 mg/l la baza zonei vadoase cu **grosime de 5,8 m**.

Se remarcă concentrația redusă a benzenului fixat pe matricea minerală (Faza **Solidă**) în raport cu celelalte două faze (Faza Gazoasă și Lichidă), motiv pentru care au fost reprezentate pe grafice diferite (**Fig.13**).

Valorile concentrațiilor calculate pe adâncimea zonei vadoase (**Date de tip P; Tabelul 2**) pot fi utilizate în programul **Rockworks** pentru realizarea modelului 3D al distribuției concentrației benzenului în volumul total al zonei vadoase, împreună cu rezultatele obținute în toate cele 11 profile de simulare (**Fig.12**)

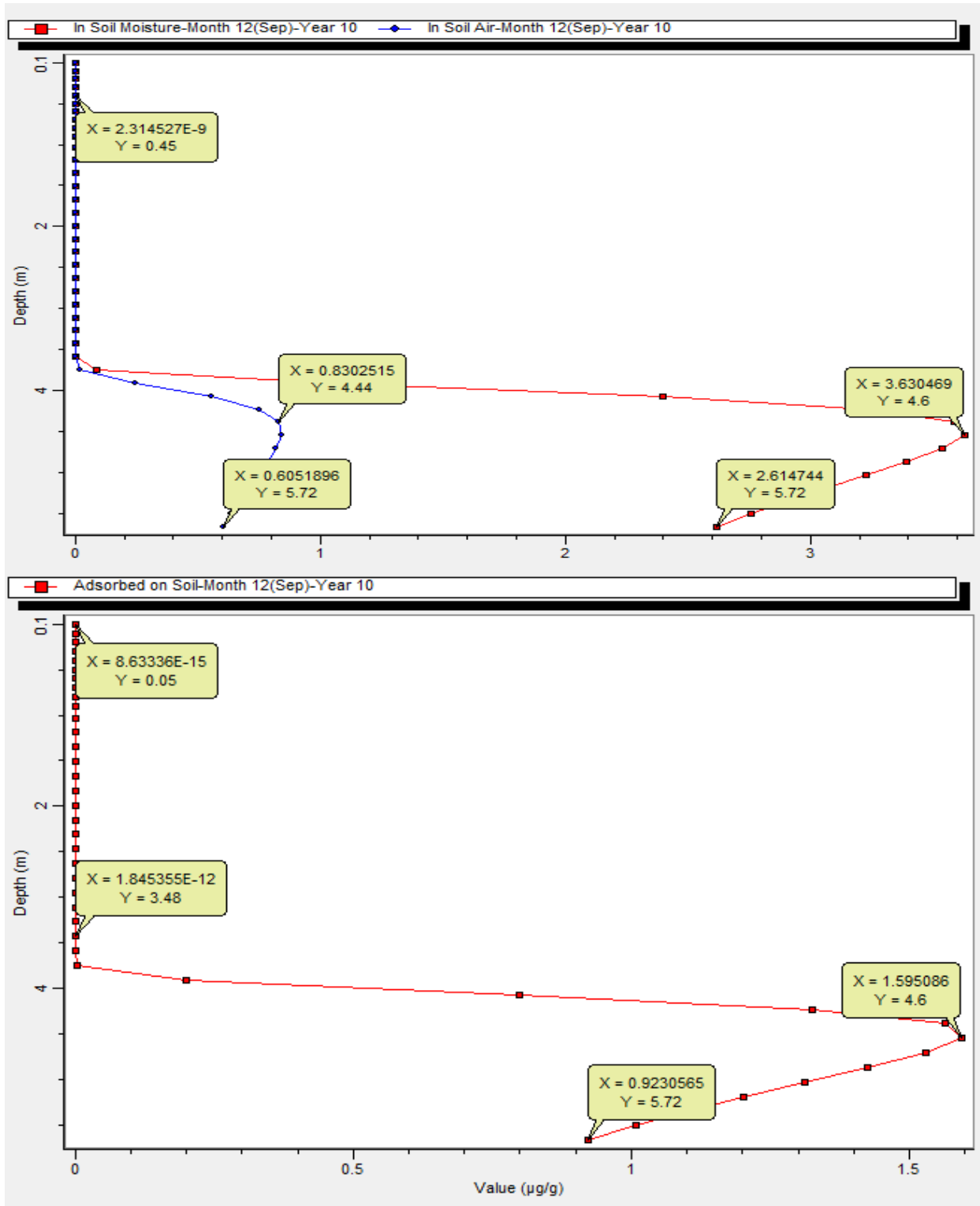
### 7.1.2. Model 1D în zona vadoasă pentru septembrie anul 10

La finalul perioadei de simulare, pe profilul **P11** se remarcă deplasarea concentrației maxime a benzenului din zona vadoasă spre nivelul piezometric al acviferului din baza zonei vadoase și creșterea concentrației de benzen în acvifer (**Fig.14** și **Tabelul 3**).

La finalul perioadei de simulare, **concentrațiile benzenului** în toate cele trei stări de agregare, la baza zonei vadoase sunt diferite de **zero**:

- Faza gazoasă: 0,61 mg/litru
- Faza lichidă: **2,62 mg/litru**
- Faza solidă: 0,92 mg/litru

Concentrațiile benzenului la baza zonei vadoase, la finalul perioadei de simulare, în toate cele 11 profile, pot fi utilizate pentru realizarea unui model 2D al distribuției concentrației benzenului în acvifer.



**Fig.14.** Variația pe adâncimea zonei vadoase pentru cele trei faze ale concentrației benzenului, în septembrie, anul 10 al simulării, **profil P11**

**Tabelul 3. Distribuția benzenului (P11\_X\_an10)**

Adancime [m]	Benzen[mg/litru]		
	Gaz	Lichid	Solid
0.05	2.31E-09	1.00E-08	8.63E-15
0.15	2.31E-09	1.00E-08	8.63E-15
0.25	2.31E-09	1.00E-08	8.63E-15
0.35	2.31E-09	1.00E-08	8.63E-15
0.45	2.31E-09	1.00E-08	8.63E-15
0.55	2.31E-09	1.00E-08	8.63E-15
0.65	2.31E-09	1.00E-08	8.63E-15
0.75	2.31E-09	1.00E-08	8.63E-15
0.85	2.31E-09	1.00E-08	8.63E-15
0.95	2.31E-09	1.00E-08	8.63E-15
1.08	2.31E-09	1.00E-08	8.63E-15
1.24	4.63E-09	2.00E-08	2.74E-14
1.4	4.63E-09	2.00E-08	2.74E-14
1.56	4.63E-09	2.00E-08	2.74E-14
1.72	6.94E-09	3.00E-08	5.39E-14
1.88	9.26E-09	4.00E-08	8.70E-14
2.04	1.16E-08	5.00E-08	1.26E-13
2.2	1.16E-08	5.00E-08	1.26E-13
2.36	1.39E-08	6.00E-08	1.71E-13
2.52	1.85E-08	8.00E-08	2.76E-13
2.68	2.31E-08	1.00E-07	4.01E-13
2.84	2.78E-08	1.20E-07	5.43E-13
3	3.24E-08	1.40E-07	7.02E-13
3.16	3.93E-08	1.70E-07	9.70E-13
3.32	4.86E-08	2.10E-07	1.38E-12
3.48	5.79E-08	2.50E-07	1.85E-12
3.64	1.28E-05	5.51E-05	1.49E-08
3.8	0.020055	0.08665	0.003156
3.96	0.241885	1.04507	0.200182
4.12	0.554846	2.39723	0.798662
4.28	0.752346	3.25054	1.3267
4.44	0.830251	3.58713	1.56348
4.6	0.840282	3.63047	1.59509
4.76	0.81904	3.5387	1.52845
4.92	0.78519	3.39244	1.42463
5.08	0.747307	3.22877	1.31192
5.24	0.709172	3.06401	1.20225
5.4	0.67241	2.90517	1.10019
5.56	0.637675	2.7551	1.00711
5.72	0.60519	2.61474	0.923056

### 7.1.3. Model 1D la baza zonei vadoase pentru toată perioada de simulare

Destinația migrației descendente a benzenului prin zona vadoasă este acviferul.

Pe verticala **profilului P11** din zona investigată, pe parcursul celor 10 ani de simulare, concentrația benzenului în faza lichidă ajunsă în baza zonei vadoase **crește continuu** începând din luna martie a anului 6 de simulare când concentrația este diferită de zero (0,076 mg/litru) (**Fig.15**).

La finalul simulării (septembrie anul 10 al simulării) concentrația benzenului din baza zonei vadoase este **2,62 mg/litru** (**Tabelul 4**).

Presupunând că tot benzenul aflat în stare lichidă din baza zonei vadoase ajunge în acvifer se poate estima gradul de poluare al acviferului pe durata simulării procesului de migrare a benzenului.

Migrarea benzenului în acvifer are o dinamică mai rapidă decât în zona vadoasă, chiar dacă procesele implicate sunt similare (vezi **Capitolul 4**).

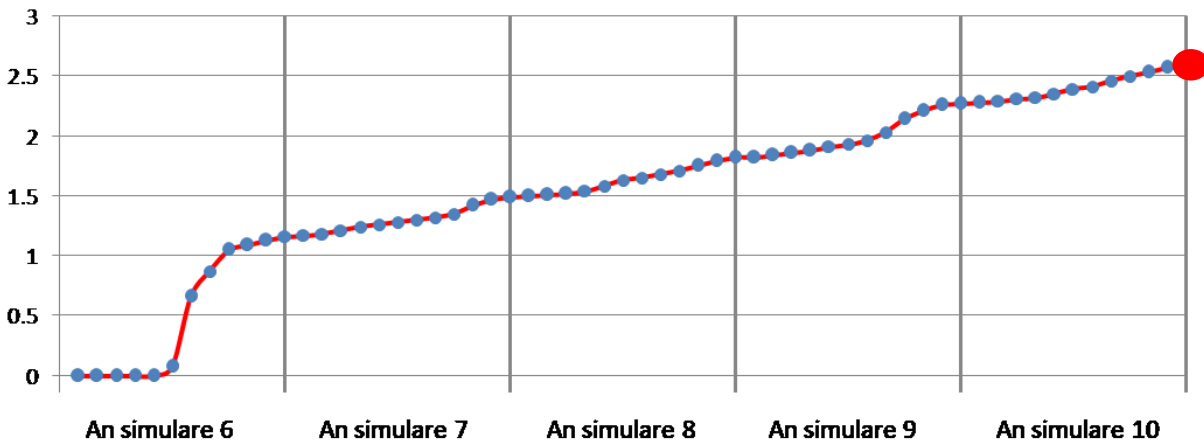


Fig.15. Variația concentrației benzenului ajuns în acvifer pe profilul P11

Tabelul 4. Variația concentrației benzenului (Conc) ajuns în acvifer pe durata simulării (10 ani-P11)

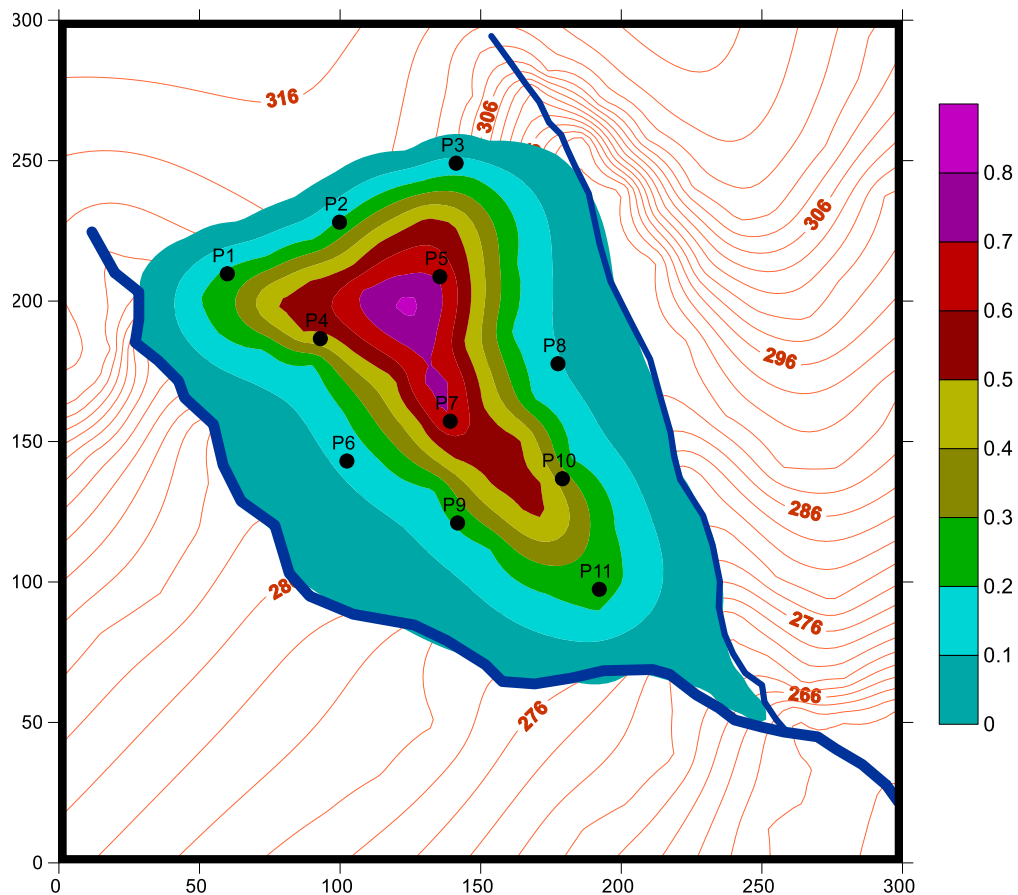
Nr.	An	Luna	Conc [mg/l]	Nr.	An	Luna	Conc [mg/l]	Nr.	An	Luna	Conc [mg/l]
1	6	octombrie	0	21	7	iunie	1.35	41	9	februarie	1.91
2	6	noiembrie	0	22	7	iulie	1.42	42	9	martie	1.93
3	6	decembrie	0	23	7	august	1.47	43	9	aprilie	1.96
4	6	ianuarie	0	24	7	septembrie	1.49	44	9	mai	2.03
5	6	februarie	0	25	8	octombrie	1.5	45	9	iunie	2.14
6	6	martie	0.076	26	8	noiembrie	1.51	46	9	iulie	2.21
7	6	aprilie	0.66	27	8	decembrie	1.52	47	9	august	2.26
8	6	mai	0.87	28	8	ianuarie	1.54	48	9	septembrie	2.27
9	6	iunie	1.05	29	8	februarie	1.58	49	10	octombrie	2.28
10	6	iulie	1.09	30	8	martie	1.63	50	10	noiembrie	2.29
11	6	august	1.13	31	8	aprilie	1.65	51	10	decembrie	2.31
12	6	septembrie	1.16	32	8	mai	1.68	52	10	ianuarie	2.32
13	7	octombrie	1.17	33	8	iunie	1.71	53	10	februarie	2.35
14	7	noiembrie	1.18	34	8	iulie	1.75	54	10	martie	2.39
15	7	decembrie	1.21	35	8	august	1.79	55	10	aprilie	2.41
16	7	ianuarie	1.24	36	8	septembrie	1.82	56	10	mai	2.46
17	7	februarie	1.26	37	9	octombrie	1.82	57	10	iunie	2.5
18	7	martie	1.28	38	9	noiembrie	1.84	58	10	iulie	2.53
19	7	aprilie	1.3	39	9	decembrie	1.86	59	10	august	2.57
20	7	mai	1.32	40	9	ianuarie	1.88	60	10	septembrie	2.62

## 7.2. Modele 2D ale distribuției benzenului

Modelul 2D a distribuției concentrației benzenului în zona investigată poate fi construit la orice moment al simulării, și la orice adâncime, începând din octombrie anul1, când concentrația în primul metru al zonei vadoase este egală cu concentrația medie determinată pe baza monitorizării calității solului în cele 96 de puncte de probare pe o perioadă de **1 an** (1 an este durata procesului de contaminare declanșat prin dezafectarea rezervoarelor cu hidrocarburi) (vezi fisierul *excel\_303 file*, pagina MONITORIZARE).

### 7.2.1. Model 2D pentru concentrația inițială a benzenului în sol

Modelul 2D al concentrației benzenului în primul metru de sol al zonei vadoase la începutul perioadei de simulare (**Fig.15**) este modelul utilizat pentru calculul fluxului unitar de benzen pentru perioada de 1 an a contaminării.



**Fig.15.** Concentrația medie a benzenului în stratul de sol monitorizat

### 7.2.2. Modele 2D pentru concentrația benzenului în acvifer

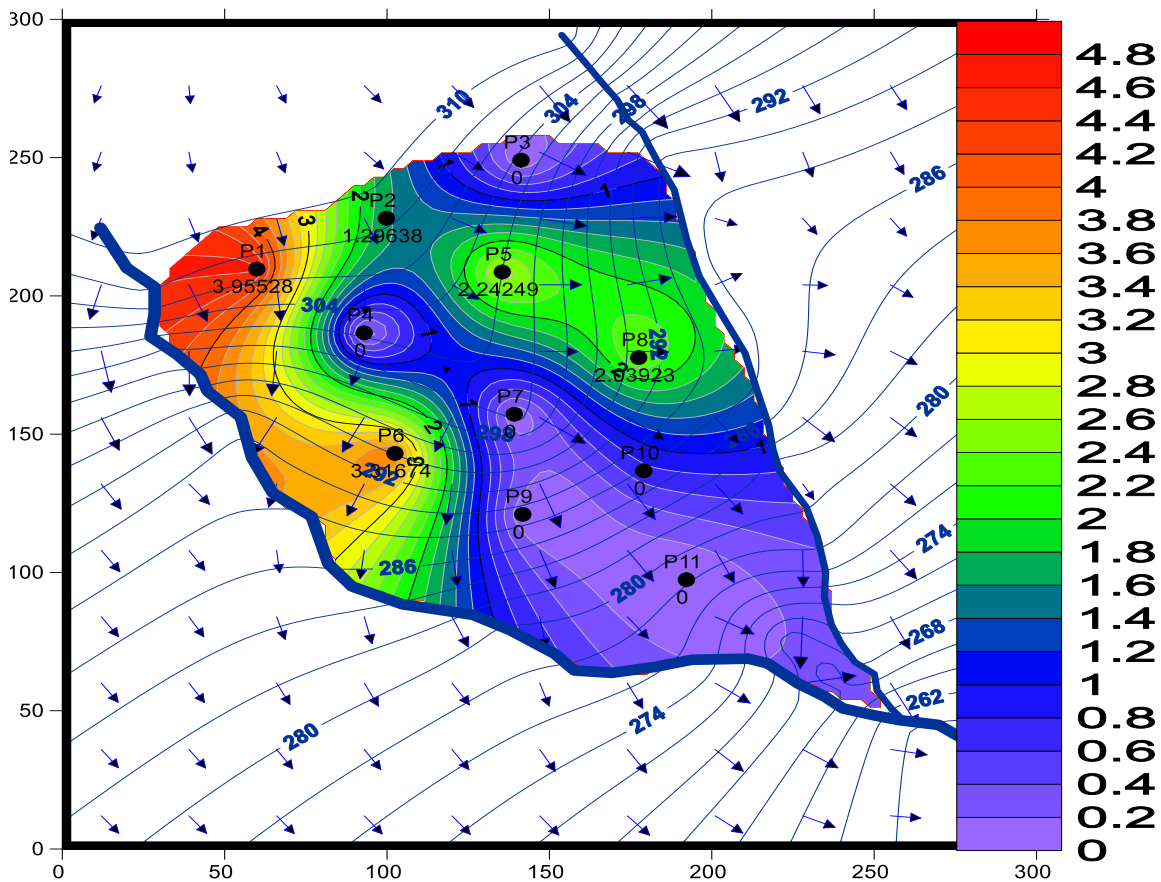
Modelele 2D al distribuției concentrației benzenului în acvifer, se pot realiza pe baza concentrațiilor benzenului din faza lichidă din cele 11 profile calculate la diferite momente (ex.: septembrie, anul 5 și 10 al perioadei de simulare;  *Tabelul 5*).

#### 7.2.2.1. Modelul 2D\_IX\_an5

*Modelul 2D\_IX\_an5* al concentrației benzenului la baza zonei vadoase (în acvifer) indică o creștere a concentrației spre partea vestică a zonei, zona corespunzătoare grosimii maxime a zonei vadoase (zona de cumpana a apelor subterane) are concentrații reduse.

**Tabelul 5. Concentrațiile benzenului în baza zonei vadoase**

Cod	X[m]	Y[m]	Conc. Benzen[mg/l]	
			IX_an5	IX_an10
P1	59.8	209.7	4.65	3.28
P2	99.7	228.0	1.63	0.40
P3	141.2	249.0	0.00	2.43
P4	92.9	186.6	0.00	1.31
P5	135.4	208.6	2.76	0.10
P6	102.4	143.0	3.86	0.00
P7	139.1	157.2	0.00	2.66
P8	177.4	177.6	2.43	0.00
P9	141.7	120.9	0.00	2.45
P10	179.0	136.7	0.74	3.85
P11	192.1	97.3	0.00	2.62



**Fig. 16.** Modelul 2D al distribuției concentrației benzenului în fază lichidă, la baza zonei vadoase, pentru septembrie anul 5 al perioadei de simulare

7.2.2.2. Modelul 2D\_IX\_an10

Modelul 2D\_IX\_an10 indică ajungerea benzenului în baza zonei vadoase și pe zona de cumpană a acviferului (Fig.17) la finalul perioadei de simulare, cu valori de 3,8 mg/litru (Fig.17).

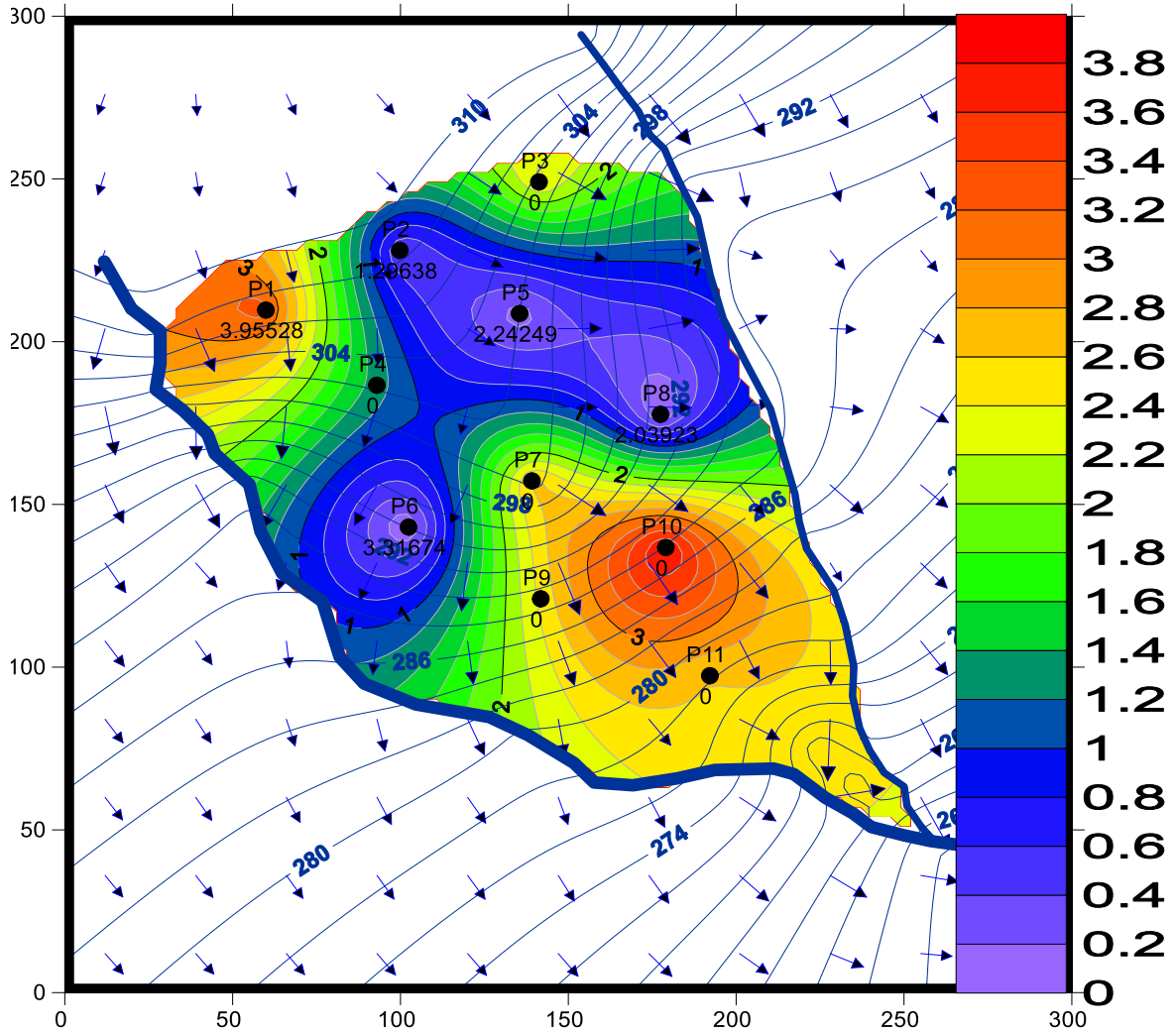


Fig. 17. Modelul 2D al distribuției concentrației benzenului în fază lichidă, la baza zonei vadoase, pentru septembrie, anul 10 al perioadei de simulare

### 7.2.3. Modele 3D ale distribuției benzenului în zona vadoasă

Realizarea modelelor 3D al distribuției concentrației benzenului pe grosimea zonei vadoase se bazează pe simulările *unidimensionale* din cele 11 profile repartizate pe suprafața zonei cercetate (**Fig.16**).

Modelele 3D pot fi realizate pentru *orice moment al simulării* în ipoteza neglijării componentelor ale migrării benzenului în plan orizontal.

#### 7.2.3.1. Modelul 3D\_IX\_an10

*M3D\_IX\_an10* utilizează concentrațiilor benzenului în stare lichidă calculate în cele 11 profile pe *toată grosimea zonei vadoase*, pentru *septembrie anul 10* al simulării (**Tabelul 6**):

- $A_i$  ( $i=1,2, \dots, 11$ )- adâncimea pe profil [m]
- $C_i$  ( $i=1,2, \dots, 11$ )- concentrația benzenului [mg/litru]
- $i$ - numărul profilului

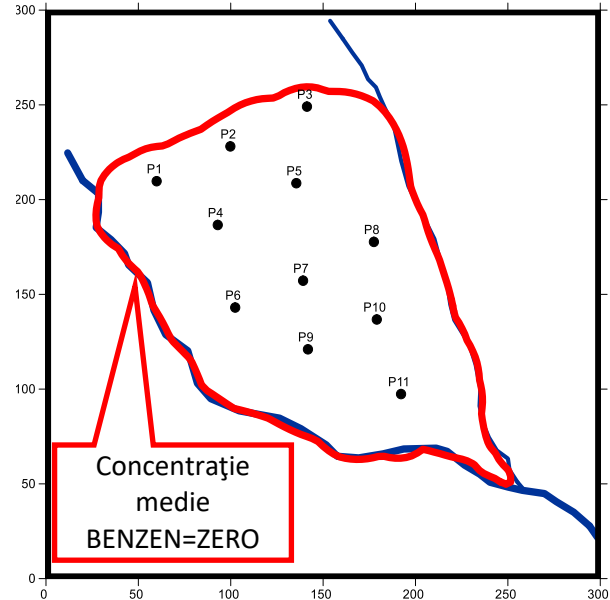
Coordonatele celor 11 profile (**Tabelul 5**) sunt aceleași cu cele utilizate pentru realizarea modelelor 2D ale distribuției concentrației benzenului în acvifer pentru luna septembrie în ani și 10 ai perioadei de simulare.

Recomandăm realizarea modelului 3D cu programul **ROCKWORKS**, într-un proiect ale cărui dimensiuni sunt (**Fig.17**):

- $X_{min}=0$ ;  $X_{max}=300$  m; cu un pas de discretizare maxim  $dx=3$  m
- $Y_{min}=0$ ;  $Y_{max}=300$  m; cu un pas de discretizare maxim  $dy=3$  m
- $Z_{min}= 278,0$  m;  $Z_{max}=315,0$  m; cu un pas de discretizare maxim  $dz=0,5$  m

Limitarea modelului 3D se face prin:

- **Suprafața topografică** (upper surface)
- **Suprafața piezometrică** a acviferului freatic (lower surface)
- **Poligonul de concentrație medie zero**, obținut prin digitizarea curbei de concentrație medie a benzenului din sol= $0,0$  mg/litru (**Fig.16**).



**Fig.16.** Poligonul pentru delimitarea în plan orizontal a modelelor 3D.

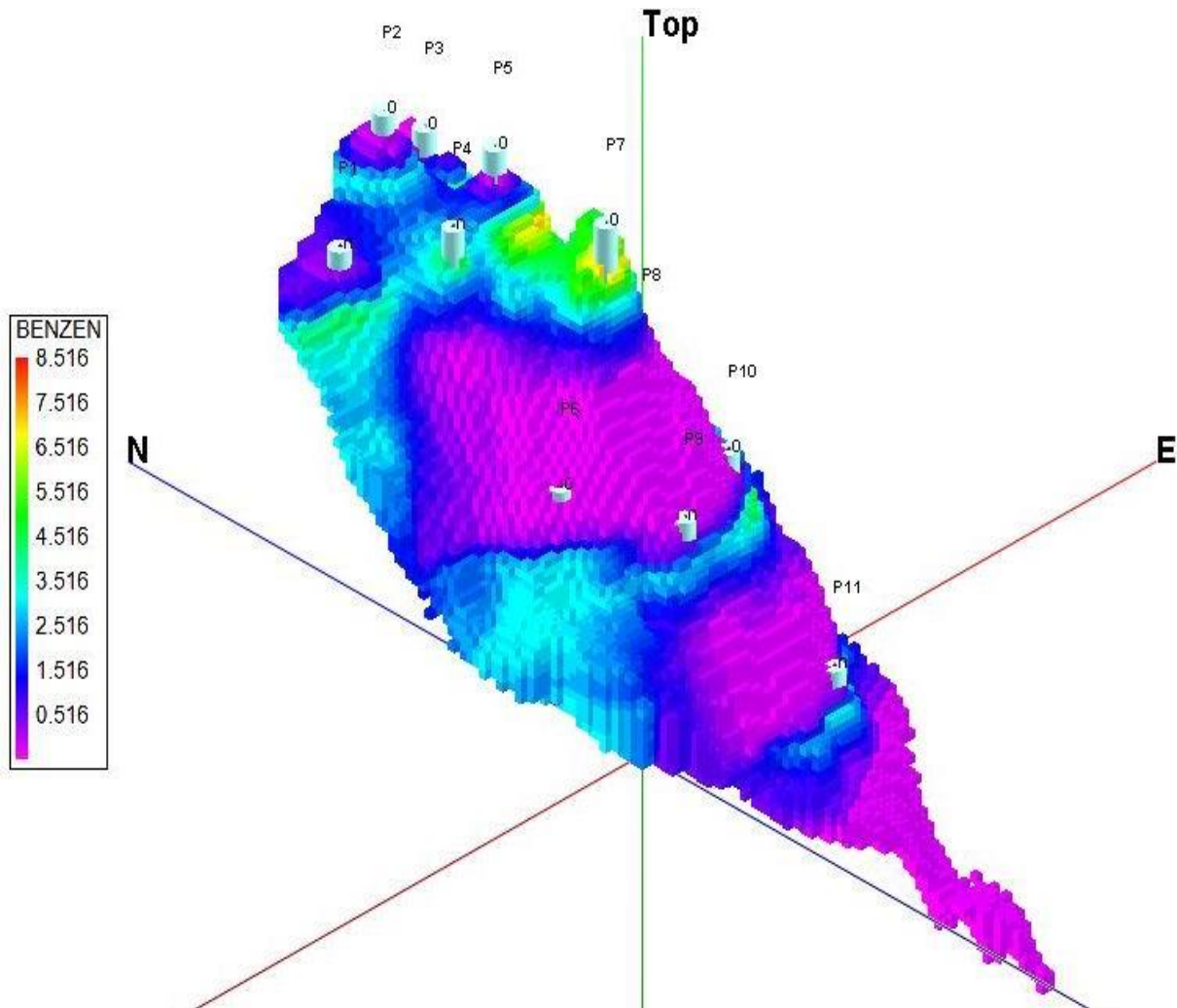


**Tabel 6.** Concentrația benzenului în zona vadoasă: septembrie an10

A1	C1	A2	C2	A3	C3	A4	C4	A5	C5	A6	C6
0.05	0.00	0.05	0.00	0.05	0.00	0.05	0.00	0.05	0.00	0.05	0.00
0.15	0.00	0.15	0.00	0.15	0.00	0.15	0.00	0.15	0.00	0.15	0.00
0.25	0.00	0.25	0.00	0.25	0.00	0.25	0.00	0.25	0.00	0.25	0.00
0.35	0.00	0.35	0.00	0.35	0.00	0.35	0.00	0.35	0.00	0.35	0.00
0.45	0.00	0.45	0.00	0.45	0.00	0.45	0.00	0.45	0.00	0.45	0.00
0.55	0.00	0.55	0.00	0.55	0.00	0.55	0.00	0.55	0.00	0.55	0.00
0.65	0.00	0.65	0.00	0.65	0.00	0.65	0.00	0.65	0.00	0.65	0.00
0.75	0.00	0.75	0.00	0.75	0.00	0.75	0.00	0.75	0.00	0.75	0.00
0.85	0.00	0.85	0.00	0.85	0.00	0.85	0.00	0.85	0.00	0.85	0.00
0.95	0.00	0.95	0.00	0.95	0.00	0.95	0.00	0.95	0.00	0.95	0.00
1.04	0.00	1.09	0.00	1.075	0.00	1.13	2.45	1.14	0.00	1.05	0.00
1.12	0.00	1.26	0.00	1.225	0.00	1.39	4.85	1.41	0.00	1.14	0.00
1.20	0.00	1.43	0.00	1.375	0.00	1.65	5.34	1.68	0.00	1.23	0.00
1.28	0.00	1.60	0.00	1.525	0.00	1.91	4.92	1.95	0.00	1.32	0.00
1.36	0.00	1.77	0.00	1.675	0.03	2.17	4.28	2.22	0.00	1.41	0.00
1.44	0.00	1.94	0.00	1.825	0.55	2.43	3.66	2.49	0.00	1.50	0.00
1.52	0.00	2.11	0.00	1.975	1.56	2.69	3.14	2.76	0.01	1.59	0.00
1.60	0.00	2.28	0.01	2.125	2.32	2.95	2.70	3.03	0.75	1.68	0.00
1.68	0.00	2.45	0.25	2.275	2.65	3.21	2.35	3.30	3.55	1.77	0.00
1.76	0.00	2.62	1.30	2.425	2.69	3.47	2.05	3.57	6.48	1.86	0.00
1.84	0.00	2.79	2.70	2.575	2.60	3.73	1.81	3.84	8.07	1.95	0.00
1.92	0.00	2.96	3.66	2.725	2.45	3.99	1.62	4.11	8.52	2.04	0.00
2.00	0.00	3.13	4.07	2.875	2.28	4.25	1.47	4.38	8.33	2.13	0.00
2.08	0.00	3.30	4.12	3.025	2.12	4.51	1.36	4.65	7.86	2.22	0.00
2.16	0.00	3.47	3.99	3.175	1.97	4.77	1.26	4.92	7.30	2.31	0.00
2.24	0.22	3.64	3.77	3.325	1.83	5.03	1.16	5.19	6.72	2.40	0.00
2.32	1.50	3.81	3.53	3.475	1.71	5.29	0.49	5.46	6.17	2.49	0.00
2.40	3.39	3.98	3.28	3.625	1.60	5.55	0.00	5.73	5.66	2.58	0.00
2.48	4.77	4.15	3.04	3.775	1.50	5.81	0.00	6.00	5.20	2.67	0.02
2.56	5.45	4.32	2.82	3.925	1.40	6.07	0.00	6.27	4.78	2.76	0.32
2.64	5.66	4.49	2.61	4.075	1.32	6.33	0.00	6.54	4.40	2.85	1.32
2.72	5.63	4.66	2.42	4.225	1.26	6.59	0.00	6.81	4.06	2.94	2.53
2.80	5.48	4.83	2.24	4.375	1.23	6.85	0.00	7.08	3.75	3.03	3.36
2.88	5.28	5.00	2.08	4.525	1.19	7.11	0.00	7.35	3.46	3.12	3.77
2.96	5.05	5.17	1.94	4.675	0.99	7.37	0.00	7.62	3.21	3.21	3.89
3.04	4.82	5.34	1.81	4.825	0.00	7.63	0.00	7.89	2.98	3.30	3.86
3.12	4.60	5.51	1.70	4.975	0.00	7.89	0.00	8.16	2.77	3.39	3.76
3.20	4.37	5.68	1.57	5.125	0.00	8.15	0.00	8.43	2.58	3.48	3.62
3.28	4.16	5.85	1.44	5.275	0.00	8.41	0.00	8.70	2.40	3.57	3.47
3.36	3.96	6.02	1.30	5.425	0.00	8.67	0.00	8.97	2.24	3.66	3.32

**Tabel 6.** Concentrația benzenului în zona vadoasă: septembrie an10 (continuare)

A7	C7	A8	C8	A9	C9	A10	C10	A11	C11
0.05	0.00	0.05	0.00	0.05	0.00	0.05	0.00	0.05	0.00
0.15	0.00	0.15	0.00	0.15	0.00	0.15	0.00	0.15	0.00
0.25	0.00	0.25	0.00	0.25	0.00	0.25	0.00	0.25	0.00
0.35	0.00	0.35	0.00	0.35	0.00	0.35	0.00	0.35	0.00
0.45	0.00	0.45	0.00	0.45	0.00	0.45	0.00	0.45	0.00
0.55	0.00	0.55	0.00	0.55	0.00	0.55	0.00	0.55	0.00
0.65	0.00	0.65	0.00	0.65	0.00	0.65	0.00	0.65	0.00
0.75	0.00	0.75	0.00	0.75	0.00	0.75	0.00	0.75	0.00
0.85	0.00	0.85	0.00	0.85	0.00	0.85	0.00	0.85	0.00
0.95	0.00	0.95	0.00	0.95	0.00	0.95	0.00	0.95	0.00
1.15	0.03	1.07	0.00	1.08	0.00	1.11	0.00	1.08	0.00
1.44	1.56	1.20	0.00	1.24	0.00	1.33	0.00	1.24	0.01
1.73	5.23	1.33	0.00	1.40	0.11	1.55	0.00	1.40	0.52
2.02	7.67	1.46	0.00	1.56	1.11	1.77	0.00	1.56	2.04
2.31	8.22	1.59	0.00	1.72	2.50	1.99	0.27	1.72	3.30
2.60	7.74	1.72	0.00	1.88	3.33	2.21	1.77	1.88	3.82
2.89	6.92	1.85	0.00	2.04	3.57	2.43	3.73	2.04	3.85
3.18	6.06	1.98	0.00	2.20	3.49	2.65	4.94	2.20	3.65
3.47	5.27	2.11	0.00	2.36	3.27	2.87	5.32	2.36	3.37
3.76	4.59	2.24	0.00	2.52	3.02	3.09	5.22	2.52	3.08
4.05	4.01	2.37	0.00	2.68	2.76	3.31	4.91	2.68	2.80
4.34	3.51	2.50	0.00	2.84	2.52	3.53	4.51	2.84	2.55
4.63	3.09	2.63	0.00	3.00	2.30	3.75	4.11	3.00	2.33
4.92	2.73	2.76	0.00	3.16	2.11	3.97	3.73	3.16	2.13
5.21	2.43	2.89	0.00	3.32	1.94	4.19	3.39	3.32	1.95
5.50	2.17	3.02	0.08	3.48	1.79	4.41	3.07	3.48	1.80
5.79	1.95	3.15	0.57	3.64	1.66	4.63	2.79	3.64	1.67
6.08	1.75	3.28	1.48	3.80	1.55	4.85	2.54	3.80	1.55
6.37	1.57	3.41	2.31	3.96	1.45	5.07	2.32	3.96	1.45
6.66	1.40	3.54	2.79	4.12	1.35	5.29	2.12	4.12	1.35
6.95	1.29	3.67	2.99	4.28	1.26	5.51	1.94	4.28	1.26
7.24	1.26	3.80	3.01	4.44	1.21	5.73	1.78	4.44	1.21
7.53	0.58	3.93	2.94	4.60	1.19	5.95	1.64	4.60	1.19
7.82	0.00	4.06	2.83	4.76	1.12	6.17	1.52	4.76	1.12
8.11	0.00	4.19	2.69	4.92	0.00	6.39	1.43	4.92	0.00
8.40	0.00	4.32	2.56	5.08	0.00	6.61	1.33	5.08	0.00
8.69	0.00	4.45	2.42	5.24	0.00	6.83	1.21	5.24	0.00
8.98	0.00	4.58	2.29	5.40	0.00	7.05	0.68	5.40	0.00
9.27	0.00	4.71	2.16	5.56	0.00	7.27	0.00	5.56	0.00
9.56	0.00	4.84	2.04	5.72	0.00	7.49	0.00	5.72	0.00



**Fig.17.** Distribuția concentrației benzenului în zona vadoasă, la finalul perioadei de simulare (septembrie, anul 10 al simulării)

## Concluzii

Tema pentru examen va respecta succesiunea etapelor *Modelării migrării benzenului în zona vadoasă a unui acvifer freatic aflat în comunicare hidrolică cu rețeaua hidrografică*, cu evidențierea aspectelor aplicative realizate pe baza *datelor* din fișierele *excel\_BAZA DE DATE\_MASTER\_2020* și a programelor de prelucrare: *SURFER*, *UNSAT-SESOIL* și *ROCKWORKS*.

## Structură temă

**INTRODUCERE:** în care trebuie precizate

- Cauza contaminării
- Durata contaminării
- Efectele contaminării
- Obiectivele simulării

**1.MODELUL CONCEPTUAL AL HIDROSTRUCTURII:** în care trebuie precizate și realizate:

- Componentele modelului conceptual
- Modelul spațial 3D al hidrostructurii (conform **Fig.4**)
- Parametrii zonei vadoase și ai acviferului (**Tabel** cu valorile parametrilor)

**2.MODELUL HIDROLOGIC:** în care trebuie precizate și realizate:

- Modelul pentru calculul umidității vadoase
- Variația componentelor ciclului hidrologic

**3.MODELUL CONTAMINĂRII:** în care trebuie precizate și realizate

- Modelul contaminării ( ecuația de bilanț )
- Procesele de migrarea a contaminantului pe verticală (definire)
- Calculul fluxului unitar de benzen (q)

**4.SIMULAREA CONTAMINĂRII:** în care trebuie precizate și realizate:

- Stratificația zonei vadoase (**Tabel** cu parametrii de lucru)
- Modelul dinamic al contaminării (**Tabel** pentru **Contaminant Load Schedule**)
- Caracteristicile acviferului (**Tabel** pentru **Groundwater Settings**)

**5.REZULTATELE SIMULĂRII:** în care trebuie realizare :

- Model 1D (graphic și tabel cu valorile utilizate în grafic)) pentru variația **concentrației** benzenului cu **adâncimea** (la momentele: octombrie anul 5 și septembrie anul 10 al simulării) pentru:
  - Faza lichidă (**In Soil Moisture**)
  - Faza solidă (**Adsorbed on Soil**)
  - Faza gazoasă (**In Soil Air**)
- Model 1D cu variația în **timp** a **concentrației** benzenului ajunsă în apa din acvifer:
  - **Tabel** cu valorile concentrației benzenului în baza zonei vadoase pentru toți cei **10 ani** ai simulării
  - Grafic al variației în **timp** a **concentrației** benzenului ajunsă în acvifer

- Model 2D (*Harta Conturala* realizată cu SURFER) pentru distribuția concentrației benzenului în sol, în octombrie, anul 1 al simulării.

### **FACULTATIV!!!!**

- Model 2D (*Harta Conturală* realizată cu SURFER) pentru distribuția concentrației benzenului ajuns în acvifer în septembrie, **anul 5** al simulării.
- Model 2D (*Harta Conturală* realizată cu SURFER) pentru distribuția concentrației benzenului ajuns în acvifer în septembrie, **anul 10** al simulării
- Model 3D (realizate cu ROCKWORKS) pentru distribuția spațială a concentrației benzenului în zona vadoasă din interfluviul celor două râuri pentru septembrie **anul 5** al simulării
- Model 3D (realizate cu **ROCKWORKS**) pentru distribuția spațială a concentrației benzenului în zona vadoasă din interfluviul celor două râuri pentru septembrie **anul 10** al simulării.

**CONCLUZIILE TEMEI:** care trebuie să conțină:

- Comentarii privind **utilitatea** rezultatelor simulării migrării benzenului în zona vadoasă
- Comentarii privind **variația în timp a contaminării acviferului** cu benzen
- Comentarii asupra **gradului de încredere** în rezultatelor obținute
- Precizarea **factorilor care afectează gradul de încredere** în rezultatele simulării
- Etc. ...**aștept contribuții personale!!!**

## **Bibliografie selectivă**

Fetter, C., W., Biving, T., Kreamer, D., 2018, Contaminat Hydrogeology, 3<sup>rd</sup> Edition

[https://www.amazon.com/Contaminant-Hydrogeology-Third-C-Fetter/dp/1478632798/ref=dp\\_ob\\_image\\_bk](https://www.amazon.com/Contaminant-Hydrogeology-Third-C-Fetter/dp/1478632798/ref=dp_ob_image_bk)

Manual de utilizare UNSAT suite: [https://topslide.net/view-doc.html?utm\\_source=user-s-manual-for-whi-unsat-suite-includes-visual-help-the-intuitive-unsaturated-zone-analysis-package&utm\\_campaign=download](https://topslide.net/view-doc.html?utm_source=user-s-manual-for-whi-unsat-suite-includes-visual-help-the-intuitive-unsaturated-zone-analysis-package&utm_campaign=download)

Scradeanu, D., Gheorghe, A., 2007, Hidrogeologie general, Editura Universității din București

## **Forma de prezentare a temei**

Tema va fi trimisă pe email în format pdf și predarea lui constituie condiția de admitere în examen.

Tema se predă cu 3 zile înainte de ziua în care este programat examenul și se susține online, pe platforma team.

**SUCCESE NEBANUITE!!**