

BAZA DE DATE PENTRU MODELAREA MATEMATICĂ A PROCESELOR DE TRANSPORT AL CONTAMINANȚILOR ÎN MEDIU

Introducere	2
1. Modelul spațio-temporal	2
1.1. Modelul spațial al rețelei hidrografice.....	3
1.2. Modelul spațial al hidrostructurii (zona vadoasă și acviferul)	3
2. Modelul parametric	4
2.1. Modelul parametric al rețelei hidrografice.....	4
2.2. Modelul parametric al zonei vadoase.....	4
2.3. Modelul parametric al acviferului.....	5
2.4. Modelele parametrice ale proceselor de contaminare	5
2.4.1. Modelul parametric al contaminării rețelei hidrografice	5
2.4.2. Modelul parametric al contaminării zonei vadoase	6
2.4.3. Modelul parametric al contaminării acviferului	7
3. Modelul energetic.....	7
3.1. Modelul energetic al rețelei hidrografice	7
3.2. Modelul energetic al zonei vadoase	7
3.3. Modelul energetic al acviferului	8
Concluzii	8
Recomandări	8

Introducere

Modelarea matematică a proceselor de transport al contaminanților în mediu implică o paletă largă de procese fizice, chimice și biologice care au ca suport **mediul geologic** și vehicul de transport esențial, **apa**.

Modele matematice sunt construite pe suportul **modelului conceptual** al proceselor de transport al contaminanților, model conceptual care este constituit din:

- **modelul spațio-temporal** care precizează **unde**, în mediul geologic, și **când** se desfășoară procesele fizice, chimice și biologice care determină transportul contaminanților.
- **modelul parametric** descrie variabilitatea parametrilor mediului geologic și proceselor de transport a contaminanților, în spațiul (**unde**) și intervalul de timp (**când**) stabilite.
- **modelul energetic** identifică și evaluează sursele de energie care susțin procesele fizice, chimice și biologice din spațiul (**unde**) și intervalul de timp (**când**) stabilite.

Baza de date utilizată pentru realizarea celor trei componente ale modelului conceptual, alături de modelele matematice utilizate determină precizia cu care este determinată extinderea în spațiu (**unde**) și timp (**când**) a contaminării cauzate de dezastre naturale sau activități antropice.

Baza de date pentru modelarea matematică a transportului unui contaminant fictiv din zona vadoasă într-un acvifer freatic și de aici în rețeaua hidrografică aflată în comunicare hidrolică directă cu acviferul freatic (**Fig.1**), este stocată într-un **fișier excel (DATABASE_MTC.xls:**

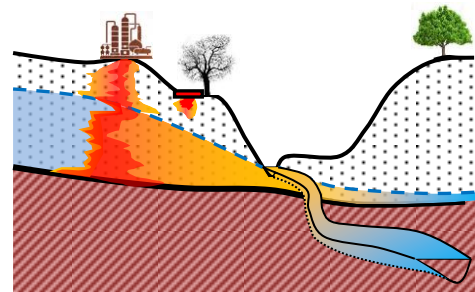


Fig.1. Căile de transport ale contaminanților într-o hidrostructură de mică adâncime

[http://ahgr.ro/specialisti/daniel-scradeanu/1 hidrogeologie/13 hidrogeologie-aplicata/transport-in-acvifer.aspx](http://ahgr.ro/specialisti/daniel-scradeanu/1_hidrogeologie/13_hidrogeologie-aplicata/transport-in-acvifer.aspx)).

Datele sunt structurate în pagini (sheets) separate corespunzătoare componentelor modelului conceptual al proceselor de transport al contaminantului. Demierea paginilor va fi identică cu acronimele stabilite în descrierea bazei de date.

1. Modelul spațio-temporal

Modelul spațial este delimitat în plan orizontal de **conturul poligonal al zonei investigate (CPZI)** (coloanele A și B), precizat prin coordonatele colțurilor poligonului de contur scrise în formatul fișierului *.bln din programul SURFER.

CPZI va delimita EXTINDEREA în plan orizontal pentru:

- modele spațiale 2D (realizate cu programul SURFER);
- modele spațiale 3D (realizate cu programul ROCKWORKS);
- modelul matematic (realizat cu programul MODFLOW FLEX.15.1, pentru simularea transportului contaminantului în acviferul freatic)

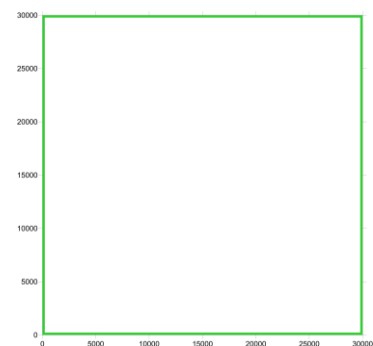


Fig.2.Contur poligonal CPZI

Modelul spațial este delimitat pe verticală, de suprafața topografică și adâncimea totală a forajelor hidrogeologice de investigare (din pagina **MS_ZV_ACV**).

Intervalul de timp (**când**) în care sunt modelate procesele de transport al contaminantului sunt determinate de viteza de curgere a apei subterane și de parametrii proceselor fizice, chimice și biologice care le controlează. Pentru aplicație vom fixa:

- începerea perioadei de simulare: 1 ianuarie 2000
 - finalul perioadei simulare: 1 ianuarie 2300 (**să avem timp să monitorizăm ce am prognozat!!!**)
- Durata mare a perioadei de simulare este determinată de migrarea lentă a contaminanților.

1.1. Modelul spațial al rețelei hidrografice

Modelul spațial (2D) al rețelei hidrografice (**MS_RH**) este constituit din

- Traseul rețelei hidrografice (este scris în formatul fișierului *.bln din programul SURFER)
 - Râul de EST
 - Traseul talvegului (coloanele A și B)
 - Râul de VEST
 - Traseul talvegului (coloanele C și D)
- Secțiunea medie de curgere a rețelei hidrografice (A) (coloana E)

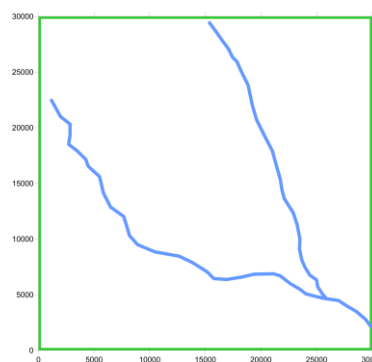


Fig.3. Modelul 2D al rețelei hidrografice

1.2. Modelul spațial al hidrostructurii (zona vadoasă și acviferul)

Modelul spațial al hidrostructurii (**MS_ZV_ACV**) include datele obținute din 45 de foraje hidrogeologice de investigare care au traversat zona vadoasă, oprindu-se în culcușul impermeabil al acviferului freatic.

- Poziția forajelor de investigare:
 - Cod foraj de investigare (coloana A)
 - X (coloana B)
 - Y (coloana C)
 - Z (coloana D)
- Adâncimea forajelor de investigare (coloana E)
- Grosimea nisipului argilos traversat (coloana F)
- Grosimea pietrișului traversat (coloana G)
- Grosimea argilei traversate (H)
- Adâncimea nivelului hidrostatic al acviferului freatic (coloana I)

2. Modelul parametric

Modelul parametric descrie variabilitatea parametrilor mediului geologic și a proceselor de transport al contaminanților, în spațiul (*unde*) și intervalul de timp (*când*) stabilite. Modelul parametric este constituit din:

- Modelul parametric al rețelei hidrografice (*MP_RH*)
- Modelul parametric al zonei nesaturate (*MP_ZV*)
- Modelul parametric al acviferului (*MP_ACV*)
- Modelul parametric al contaminării (*MP_CONT*)

2.1. Modelul parametric al rețelei hidrografice

Modelarea transportului contaminanților în rețeaua hidrografică se va realiza cu o soluție analitică (http://ahgr.ro/media/185223/model_math_transport-rh.pdf) care ține seama doar de debitul mediu al cursului de apă. Cu toate că debitul rețelei hidrografice are o variație sezonieră determinată de regimul climatic, pentru aplicație, modelul parametric al rețelei hidrografice (*MP_RH*) va fi constituit dintr-o singură valoare medie a debitului pe toată perioada de simulare, pentru ambele cursuri de apă din domeniul spațial: Q [m³/zi].

Într-o aplicație viitoare vom completa *MP_RH* cu:

- hidrografele debitelor celor două râuri pe perioada de investigare;
- chimismul apelor de suprafață
- Etc.

2.2. Modelul parametric al zonei vadoase

Modelul parametric al zonei vadoase (*MP_ZV*) conține parametrii principali care condiționează migrarea contaminanților (migrare preponderant pe verticală):

- Litologia zonei vadoase (detaliat prezentată în *MS_ZV_ACV*, pentru cele 45 de foraje)
- Densitate (Dens[g/cm³])
- Permeabilitate (K[[cm²])
- Porozitate efectivă (*ne[-]*)
- Indice de discontinuitate a porilor (*C[-]*)
- Conținutul de carbon organic (*OC[%%]*)
- Capacitatea de schimb ionic (*CEC[g-echiv/g]*)
- Exponentul Freundlich (*Coef_Freund[-]*)
- **Umiditatea**, determinată de condițiile meteorologice, prin metoda bilanțului hidrologic (precipitații, temperatură etc., generate automat în programul SESOIL utilizat la simularea migrării contaminantului în zona vadoasă, pe o perioadă de **30 de ani, prea voluminos pentru a fi pus în baza de date**):
 - Temperatură aer [°C]
 - Acoperire cu nori [-](fracțiuni unitare:0-1)
 - Umiditate relativă [-](fracțiuni unitare:0-1)

- Energie solară reflectată (Short Wave Albedo); Albedo=1: corp alb; Albedo=0: corp negru; Reflectanta medie a Pamantului=0.37)
- Evapotranspirație [cm/zi]
- Precipitații [cm]
- Durată averse [zi]
- Număr averse [-]
- Durata sezonului plios [zi]: dacă probabilitatea declanșării unui averse în fiecare zi este de mai mare de 50%, atunci valoarea duratei sezonului plios=30,4 zi (365/12)

2.3. Modelul parametric al acviferului

Modelul parametric al acviferului (**MP_ACV**) conține parametrii principali care determină viteza de curgere a apei și capacitatea de transport a contaminanților:

- Conductivitatea hidraulică a pietrișului (coloana D)
- Coeficientul de înmagazinare specific (Ss): [-]
- Coeficientul de "productivitate": Sy [-]
- Porozitatea efectivă: [-]
- Porozitatea totală: [-]
- Densitatea matricii minerale (PIETRIS):[kg/m³]

2.4. Modelele parametrice ale proceselor de contaminare

Modelele parametrice al proceselor de contaminare sunt net diferențiate pentru rețeaua hidrografică, zona vadoasă și acvifer. Numărul parametrilor, în funcție și de modelele matematice utilizate, diferă semnificativ de la un model parametric la altul, așa încât sunt separate trei modele parametrice:

- Modelul parametric al contaminării rețelei hidrografice (**MP_CONT_RH**)
- Modelul parametric al contaminării zonei vadoase (**MP_CONT_ZV**)
- Modelul parametric al contaminării acviferului (**MP_CONT_ACV**)

2.4.1. Modelul parametric al contaminării rețelei hidrografice

Modelul parametric al contaminării rețelei hidrografice (**MP_CONT_RH**) este cel mai simplificat și conține:

- Masa de contaminant: M [kg]
- Durata contaminării: τ [zi]
- Coeficientul dispersiei longitudinale a contaminantului: D_L [m²/zi]

2.4.2. Modelul parametric al contaminării zonei vadoase

Modelul parametric al contaminării zonei vadoase (**MP_CONT_ZV**) este descris de un număr record de parametri care privesc **Programul de contaminare**, **Caracteristicile contaminantului** (ex.:benzen) și **Caracteristici ale acviferului freatic**:

- **Programul de contaminare** al zonei vadoase este determinant pentru transportul contaminantului, fiind caracterizat prin:
 - Conturul zonei contaminate, descrisă printr-un contur poligonal închis (este scris în formatul fișierului *.bln din programul SURFER pe coloanele A și B)
 - Concentrația benzenului în sol (coloana F; cu coordonatele forajelor din care au fost luate probele de sol pentru determinarea concentrației benzenului: coloanele C,D,E)
 - Grosimea stratului contaminat: [m]
 - Afluxul de contaminant care este introdusă în strat: $q[\mu\text{g}/(\text{lun}\times\text{cm}^2)]$
 - Cantitatea de contaminant transformată în strat: $[\mu\text{g}/(\text{lun}\times\text{cm}^2)]$
 - Cantitatea de contaminant îndepărtată din strat: $[\mu\text{g}/(\text{lun}\times\text{cm}^2)]$
 - Cantitatea de ligand introdusă în strat: $[\mu\text{g}/(\text{lun}\times\text{cm}^2)]$
 - Index de volatilizare: VOLF=0:fără volatilizare/difuzie; VOLF=1: volatilizare/difuzie totală
 - Raportul dintre concentrația contaminantului în curgerea de **suprafață** și din acoperișul stratului: Runoff Index (**numai pentru primul strat de la suprafața terenului**)
 - Raportul dintre concentrația contaminantului în **apa de ploaie** și solubilitatea contaminantului în apă: Rain Ratio (**numai pentru primul strat de la suprafața terenului**)
 - Concentrația inițială a contaminantului în apa din acvifer la începutul perioadei de simulare: [mg/L]
- **Caracteristicile contaminantului** (ex.:benzen) sunt parametri importanți ai modelului parametric de contaminare ai zonei vadoase:
 - Solubilitatea în apă: SL [mg/L]
 - Coeficientul de difuzie în aer liber: DA [cm²/zi]
 - Constanta lui Henry: H [m³-atm/mol]
 - Coeficientul partiției carbonului organic: KOC [ml/g] (Kd!!!)
 - Coeficientul de adsorbție: K [ml/g] (K=Kd dacă exponentul Freundlich =1)
 - Masa moleculară: MWT [g/mol]
 - Valența: VCAL
 - Constanta hidrolizei neutre KNH [/hr]
 - Constanta hidrolizei bazice KBH [L/mol/zi]
 - Constanta hidrolizei acide KAH [L/mol/zi]
 - Rata Degradării fazei Lichide: KDEL [/hr]
 - Rata Degradării fazei Solide: KDES [/hr]
 - Constanta de Disociere: SK [/hr]
 - Concentrația relativă a ligand-ului: B [-]
 - Masa moleculară a ligand-ului: MWTLIG [g/mol]
- **Caracteristici ale acviferului freatic din baza zonei vadoase**:
 - Grosimea acviferului: h [m]
 - Gradientul hidrolic: I [-]
 - Conductivitatea hidrolică a acviferului: K[m/s]

2.4.3. Modelul parametric al contaminării acviferului

Modelul parametric al contaminării acviferului (MP_CONT_ACV) conține parametri ai interacțiunii contaminantului cu apa și matricea minerală:

- Variația în timp a concentrației contaminantului din zona vadoasă: [mg/L] (valori medii anuale pe o perioada de 300 ani; coloanele A,B,C; **Fig.4**)
- Concentrația inițială a contaminantului: C [mg/L]
- Durata simulării:[ani]
- Dispersivitatea longitudinală: δ_L [m];
- Coeficientul de distribuție: Kd [L/mg]

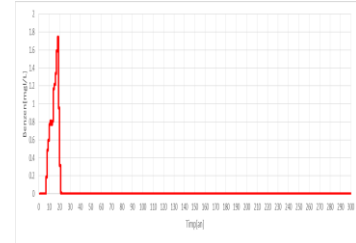


Fig.4. Variația în timp a concentrației sursei de contaminare

$$D_L = \delta_L \cdot V_L + D^*$$

D_L -coef. dispersiei longitudinale [L²/T]; V_L -viteza Darcy [L/T]; D^* -coef.dispersiei efective[L²/T]

$$Kd = \frac{\frac{\text{Masa_de_contaminant_adsorbit_pe_matricea_minerala}}{\text{Masa_matricii_minerala}}}{\frac{\text{Masa_contaminantului_ramas_in_solutie}}{\text{Volumul_solutiei}}}; \left[\frac{M}{M} \right] = \left[\frac{L^3}{M} \right]; \text{ex.: } 300 \frac{mL}{g}$$

3. Modelul energetic

Apa este factorul de transport al contaminantului în **rețeaua hidrografică, zona vadoasă și acvifer. Potențialul energetic** al apei este în principal furnizat de câmpul gravitațional (**potențialul gravitațional**), la care se adaugă, cu o importanță semnificativă pentru zona vadoasă, **potențialul capilar**. Potențialul osmotic și electrochimic au ponderi nesemnificative pentru transportul contaminanților la scară macroscopică (**Fig.5**).

Singura componentă a potențialului energetic al apei care face obiectul investigării zonei de studiu și care este prezent în baza de date este potențialul energetic al apei subterane din acvifer, motiv pentru care în baza de date **modelul energetic (ME)** are dedicată o singură pagină (sheet).

3.1. Modelul energetic al rețelei hidrografice

Curgere apei în rețeaua hidrografică este susținută de potențialul gravitațional, inclus în morfologia terenului care determină curgerea apelor de suprafață de la cote mari spre cote mici. Diferențele de energie potențială (care reprezintă consum de energie utilizat pentru învingerea rezistenței la curgerea apei), determină vitezele de curgere și debitele cursurilor de apă.

3.2. Modelul energetic al zonei vadoase

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});

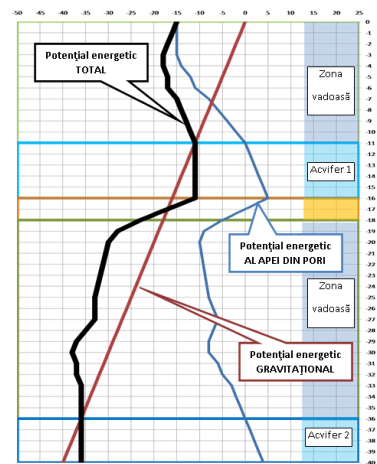


Fig.5. Componentele potențialului energetic total

3.3. Modelul energetic al acviferului

Potențialul energetic total al apei subterane din acvifer este **potențial gravitațional** (componenta cinetică este ne semnificativă valoric datorită vitezei reduse a apei subterane) și se concretizează în:

- Cota nivelului hidrostatic al acviferului freatic măsurată în toate forajele de investigare (coloana D)

Prin interpolarea cotelor nivelului piezometric din toate cele 45 de foraje hidrogeologice se obține spectrul hidrodinamic al curgerii apei din acvifer (**Fig.6**), expresie a distribuției spațiale a potențialului energetic al acviferului.

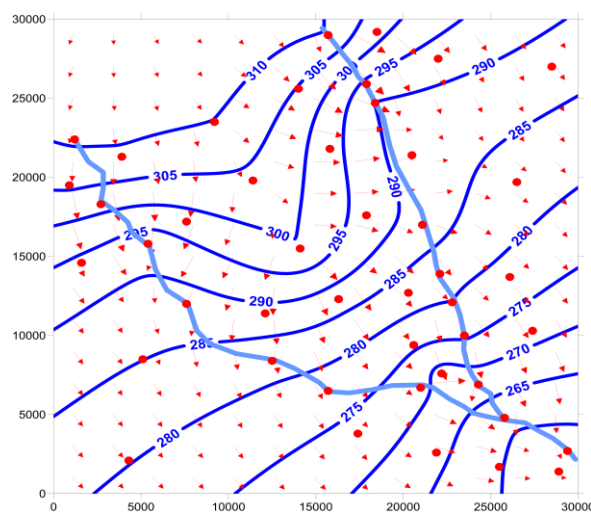


Fig.6. Spectrul hidrodinamic al acviferului freatic

Concluzii

Baza de date, stocată în fișierul excel **DATABASE_MTC.xlsx** (http://ahgr.ro/specialisti/daniel-scraideanu/1_hidrogeologie/13_hidrogeologie-aplicata/transport-in-acvifer.aspx), conține datele **minime** necesare modelării matematice a transferului unui contaminant fictiv, având ca “vehicul” **apa** din **rețeaua hidrografică**, **apa** din porii **zonei nesaturate** și **apa** din **acviferul freatic** plasat în baza zonei vadoase.

Pentru modelarea transferului contaminanților vor fi utilizate soluții analitice și numerice ale modelelor matematice, soluții care obligă utilizarea unui sistem coerent de unități de măsură.

Vom utiliza în aplicații Sistemul Internațional de unități : SI:

https://ro.wikipedia.org/wiki/Sistemul_interna%C8%9Bional_de_unit%C4%83%C8%9Bi#Unit%C4%83%C8%9Bi_SI_fundamentale

Recomandări

Conținutul bazei de date din fișierul excel **DATABASE_MTC.xlsx** trebuie protejat pe parcursul realizării aplicațiilor. Nu efectuați calcule în fișierul bază de date. Pentru prelucrările necesare aplicării soluțiilor analitice și numerice deschideți un alt fișier excel în care transferați datele necesare din fișierul excel **DATABASE_MTC.xlsx**. Succese totale!

Daca identificați erori sau neclarități în fișierul excel sau în textul care însoțește fișierul cu baza de date, vă rog să mi le comunicați pe adresa de email: daniel.scraideanu@gg.unibuc.ro

Mulțumiri anticipate!!!

2 ianuarie 2021

daniel scraideanu