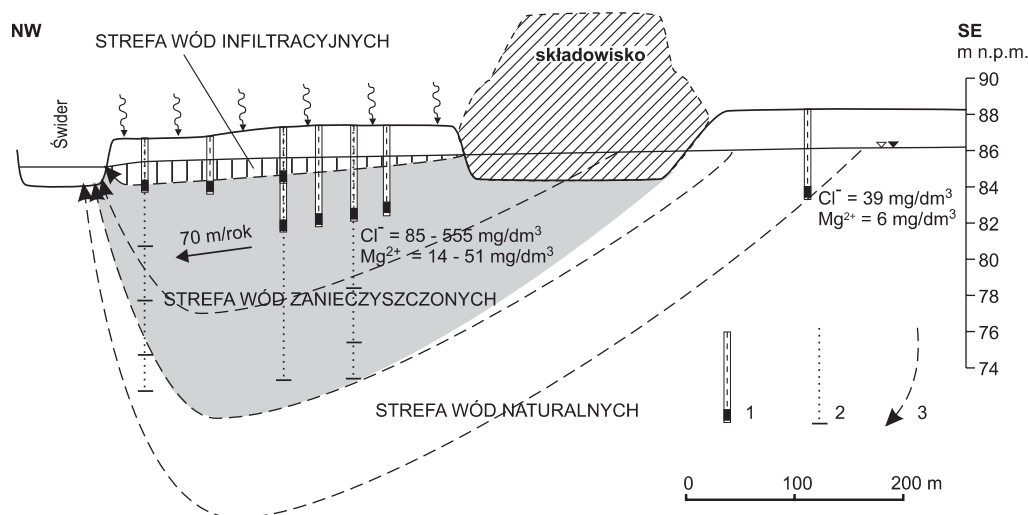


4. MATEMATYCZNY MODEL TRANSPORTU ZANIECZYSZCZEŃ

Najpowszechniej stosowanym narzędziem odwzorowania procesu migracji zanieczyszczeń w wodach podziemnych jest model matematyczny. Pojęcie modelu według ogólnej definicji oznacza reprezentację badanego zjawiska w postaci innej niż ta, w jakiej występuje ono w rzeczywistości (W. Findeistaisen, 1985). Model matematyczny jest rozumiany jako abstrakcyjne narzędzie służące do reprezentowania zachowania się systemu wód podziemnych oraz migracji zanieczyszczeń, w tym systemie w postaci liczbowej. Cechą charakterystyczną systemu hydrogeologicznego jest jego ograniczona dostępność pomiarowa. W konsekwencji jego rozpoznanie zawsze sprowadza się do znajomości zmienności parametrów w dyskretnych momentach czasu i w dyskretnych punktach przestrzeni z dokładnością, na jaką pozwalają pomiary. Można zatem uważać model matematyczny wód podziemnych za narzędzie służące do ekstrapolowania informacji z punktów pomiarowych do wszystkich pozostałych punktów obszaru przepływu (G. Siniyyn, 1997).

Numeryczny model transportu masy w przestrzeni trójwymiarowej zbudowano dla opisanego wcześniej poligonu badawczego. Badania terenowe i laboratoryjne dostarczyły danych niezbędnych do opracowania konceptualnego modelu migracji zanieczyszczeń w warstwie wodonośnej (ryc. 4.1). Model ten zakłada przenikanie substancji zanieczyszczających do wód podziemnych w efekcie przemywania składowiska przez wody infiltracyjne. Część odpadów zalegających stale lub okresowo poniżej zwierciadła wód gruntowych przemywana jest bezpośrednio strumieniem wody podziemnej. Zanieczyszczenia rozpuszczone w wodach podziemnych migrują w kierunku koryta Świdra. Jednym z podstawowych czynników warunkujących proces migracji jest stan hy-



Ryc. 4.1. Model konceptualny migracji zanieczyszczeń ze składowiska odpadów komunalnych w Otwocku

1 – piezometry z zaznaczoną głębokością zafiltrowania, 2 – sondowania PowerProbe wraz z głębokością poboru próbek wody do analiz, 3 – linie prądu

drodynamiczny systemu wodonośnego. Średnia rzeczywista prędkość przepływu w strefie wód zanieczyszczonych wynosi około 70 m/rok. Drenujący charakter Świdra zamyka drogę dalszej migracji w warstwie wodonośnej oraz powoduje ograniczenie głębokości występowania strefy wód zanieczyszczonych. Poniżej występuje strefa wód naturalnych, co znajduje potwierdzenie w wynikach opróbowania przeprowadzonego techniką PowerProbe (patrz rozdział 3.4.3.3). Wody wolne od zanieczyszczeń ze składowiska występują także w strefie przypowierzchniowej, co jest związane z zasilaniem infiltracyjnym warstwy wodonośnej. Przedstawiony poniżej numeryczny model transportu masy został opracowany zgodnie z założeniami przyjętymi dla modelu konceptualnego. Całość obliczeń wykonano w pakiecie oprogramowania Visual MODFLOW¹ firmy Waterloo Hydrogeologic Inc. Ilościowego opisu procesu transportu substancji zanieczyszczających w warstwie wodonośnej dokonano w programie MT3D (wersja MT3DMS), wchodzącym w skład pakietu. MT3D jest modułowym programem do modelowania adwekcji, dyspersji oraz niektórych reakcji chemicznych w przestrzeni trójwymiarowej. Obliczenia transportu masy są oparte na modelu przepływu wykonanym metodą różnic skończonych, przy zastosowaniu ortogonalnej siatki dyskretyzacji z punktami obliczeniowymi w centrum bloków.

4.1. MODEL PRZEPIYU

Model przepływu wykonano dla dolinnego systemu wód podziemnych w otoczeniu składowiska odpadów komunalnych Otwock. Obszar modelu wyznaczają granice poligonu badawczego, opisanego w rozdziale 3. Obliczenia dotyczyły pierwszego, czwartorzędowego poziomu wodonośnego. Warstwa wodonośna o zwierciadle swobodnym charakteryzuje się zróżnicowaną miąższością, przekraczającą lokalnie 40 m. W badaniach modelowych dążono do odwzorowania pola prędkości przepływu wód podziemnych analizowanego systemu, co dało podstawę do obliczeń migracji substancji rozpuszczonych za pomocą programu MT3D. Obliczenia przepływu wód podziemnych wykonano w programie MODFLOW.

4.1.1. Schemat obliczeniowy programu MODFLOW

Program MODFLOW jest powszechnie wykorzystywanym narzędziem obliczeniowym zarówno w badaniach naukowych, jak i w opracowaniach o charakterze użytkowym (A. Kowalczyk, 2003). Program służy do symulowania systemów jednowarstwowych oraz wielowarstwowych. Zawiera model należący do klasy modeli pseudotrójwymiarowych. Systemy hydrogeologiczne złożone z warstw wodonośnych rozdzielonych warstwami słabo przepuszczalnymi nie są w nim odwzorowane wprost jako warstwy aktywne. Ich wpływ jest opisany parametrem przesączania pionowego B pomiędzy warstwami wodonośnymi, który jest obliczany na podstawie równania:

$$B = \frac{1}{\frac{\Delta m_g / 2}{k_g} + \frac{\Delta m_{sp}}{k'_{sp}} + \frac{\Delta m_d / 2}{k_d}} \quad [4.1]$$

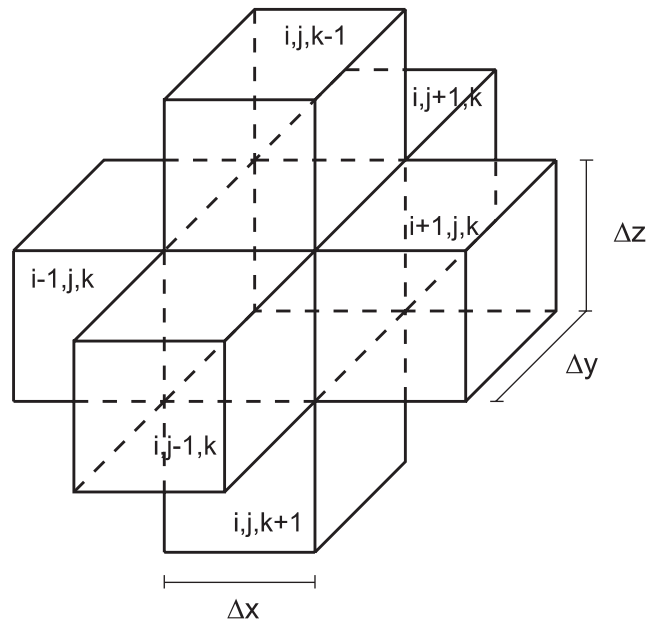
¹ SN: IV MOD-282-708457515-1274

gdzie:

- $\Delta m_g, \Delta m_{sp}, \Delta m_d$ – miąższości górnego poziomu wodonośnego, warstwy słabo przepuszczalnej i dolnego poziomu wodonośnego [m],
 k_g, k'_{sp}, k_d – współczynniki filtracji pionowej górnego poziomu wodonośnego, warstwy słabo przepuszczalnej i dolnego poziomu wodonośnego [m/d].

Numeryczny model przepływu wymaga rozwiązania układu równań różnicowych rozpisanych dla czasoprzestrzeni dyskretnej. Równania stanowią analog różnicowy równania różniczkowego cząstkowego, nazywanego w literaturze ogólnym równaniem przepływu wód podziemnych. Matematyczne podstawy opisu ruchu wody podziemnej w ośrodkach porowatych są szeroko prezentowane w literaturze (m.in. A. Szczepański, 1977; A. Wieczysty, 1982; T. Macioszczyk, W. Szestakow, 1983; T. Macioszczyk, B. Kazimierski 1987; P.A. Domenico, F. Schwartz, 1990; C.W. Fetter, 1994; P.B. Bedient i in., 1999; L.C. Lebbe, 1999; T. Macioszczyk, 1999; R.J. Charbeneau, 2000; A. Aniszewski, 2001).

Jedną z metod przybliżonego rozwiązania ogólnego równania przepływu jest model numeryczny. Modele realizowane za pomocą programu MODFLOW są oparte na metodzie różnic skończonych. Metoda ta wymaga dyskretyzacji przestrzeni i czasu. Dyskretyzacji przestrzeni w metodzie różnic skończonych dokonuje się za pomocą ortogonalnej siatki dyskretyzacji. Wyprowadzenie równania różnicowego dla pojedynczego bloku obliczeniowego z centralną lokalizacją węzła obliczeniowego jest oparte na równaniu ciągłości (M.G. McDonald, A.W. Harbaugh, 1988). Oznacza to, że suma wszystkich dopływów do bloku obliczeniowego musi być równa zmianie pojemności wodnej w tym bloku, przy założeniu, że gęstość wody jest stała. Rozpisanie analogów różnicowych poszczególnych członów równania przepływu wymaga zastosowania schematu indeksowania przedstawionego na rycinie 4.2. Według tego schematu bloki sąsiadujące z centralnym blokiem i, j, k będą oznaczone jako $i-1, j, k$; $i+1, j, k$; $i, j-1, k$; $i, j+1, k$; $i, j, k-1$; $i, j, k+1$.



Ryc. 4.2. Schemat indeksowania

Zgodnie z prawem Darcy przepływ do bloku i, j, k z bloku $i-1, j, k$ można zapisać jako:

$$q_{i-1/2,j,k} = kx_{i-1/2,j,k} \Delta y_j \Delta z_k \frac{h_{i-1,j,k} - h_{i,j,k}}{\Delta x_{i-1/2}} \quad [4.2]$$

gdzie:

- $q_{i-1/2,j,k}$ – objętość wody przepływająca między blokiem $i-1, j, k$ a blokiem i, j, k [m^3/d],
- $kx_{i-1/2,j,k}$ – wartość współczynnika filtracji zgodnie z osią x (między blokami $i-1, j, k$ oraz i, j, k) [m/d],
- $\Delta y_j, \Delta z_k$ – krok dyskretyzacji po osiach y i z dla bloku i, j, k [m],
- $\Delta x_{i-1/2}$ – odległość między węzłami $i-1, j, k$ oraz i, j, k [m].

Analogicznie można rozpisać przepływ dla pozostałych pięciu bloków obliczeniowych sąsiadujących z centralnym blokiem i, j, k .

$$\begin{aligned} q_{i+1/2,j,k} &= kx_{i+1/2,j,k} \Delta y_j \Delta z_k \frac{h_{i+1,j,k} - h_{i,j,k}}{\Delta x_{i+1/2}} \\ q_{i,j-1/2,k} &= ky_{i,j-1/2,k} \Delta x_i \Delta z_k \frac{h_{i,j-1,k} - h_{i,j,k}}{\Delta y_{j-1/2}} \\ q_{i,j+1/2,k} &= ky_{i,j+1/2,k} \Delta x_i \Delta z_k \frac{h_{i,j+1,k} - h_{i,j,k}}{\Delta y_{j+1/2}} \\ q_{i,j,k-1/2} &= kz_{i,j,k-1/2} \Delta x_i \Delta y_j \frac{h_{i,j,k-1} - h_{i,j,k}}{\Delta z_{k-1/2}} \\ q_{i,j,k+1/2} &= kz_{i,j,k+1/2} \Delta x_i \Delta y_j \frac{h_{i,j,k+1} - h_{i,j,k}}{\Delta z_{k+1/2}} \end{aligned} \quad [4.3]$$

Przy tej konwencji zapisu pierwsze dwa z równań [4.3] stanowią analog różnicowy członu $\frac{\partial}{\partial x} T_x \frac{\partial h}{\partial x}$, a kolejne dwie pary są odpowiednio analogami członów $\frac{\partial}{\partial y} T_y \frac{\partial h}{\partial y}$ i $\frac{\partial}{\partial z} T_z \frac{\partial h}{\partial z}$ ogólnego równania przepływu. Uwzględnienie w równaniu różnicowym źródeł i upustów wymaga zapisania analogu różnicowego członu źródłowego. Zewnętrzny dopływ do (lub odpływ z) bloku obliczeniowego może zależeć od wysokości hydraulicznej w zasilanym bloku lub być od niej niezależnym. Stąd zapis członu źródłowego w metodzie różnic skończonych przyjmuje postać:

$$a_{i,j,k,n} = p_{i,j,k,n} h_{i,j,k} + q_{i,j,k,n} \quad [4.4]$$

gdzie:

- $a_{i,j,k,n}$ – dopływ do bloku z n -tego źródła zewnętrznego [m^3/d],
- $p_{i,j,k,n}, q_{i,j,k,n}$ – stałe charakteryzujące wielkość dopływu, odpowiednio zależną [m^2/d] i niezależną [m^3/d] od wysokości hydraulicznej w bloku.

Reprezentacja prawej strony ogólnego równania przepływu w zapisie różnicowym wymaga dokonania dyskretyzacji czasu. Ciągły czas jest dzielony na przedziały (kroki) czasowe Δt_m , a obliczenia są wykonywane dla momentów czasu t_m , zlokalizowanych na końcu każdego kroku czasowego. Krok czasowy poprzedzający krok Δt_m jest oznaczany jako Δt_{m-1} , a następujący po nim jako Δt_{m+1} . Zgodnie z tą konwencją analog różnicowy wyrażenia $\partial h / \partial t$ dla interwału $t_m - t_{m-1}$ można zapisać jako:

$$\left(\frac{\Delta h_{i,j,k}}{\Delta t} \right)_m = \frac{h_{i,j,k}^m - h_{i,j,k}^{m-1}}{t_m - t_{m-1}} \quad [4.5]$$

Zestawiając wszystkie analogi różnicowe przedstawione powyżej, możliwe jest zapisanie sumarycznego równania stanowiącego analog różnicowy ogólnego równania przepływu:

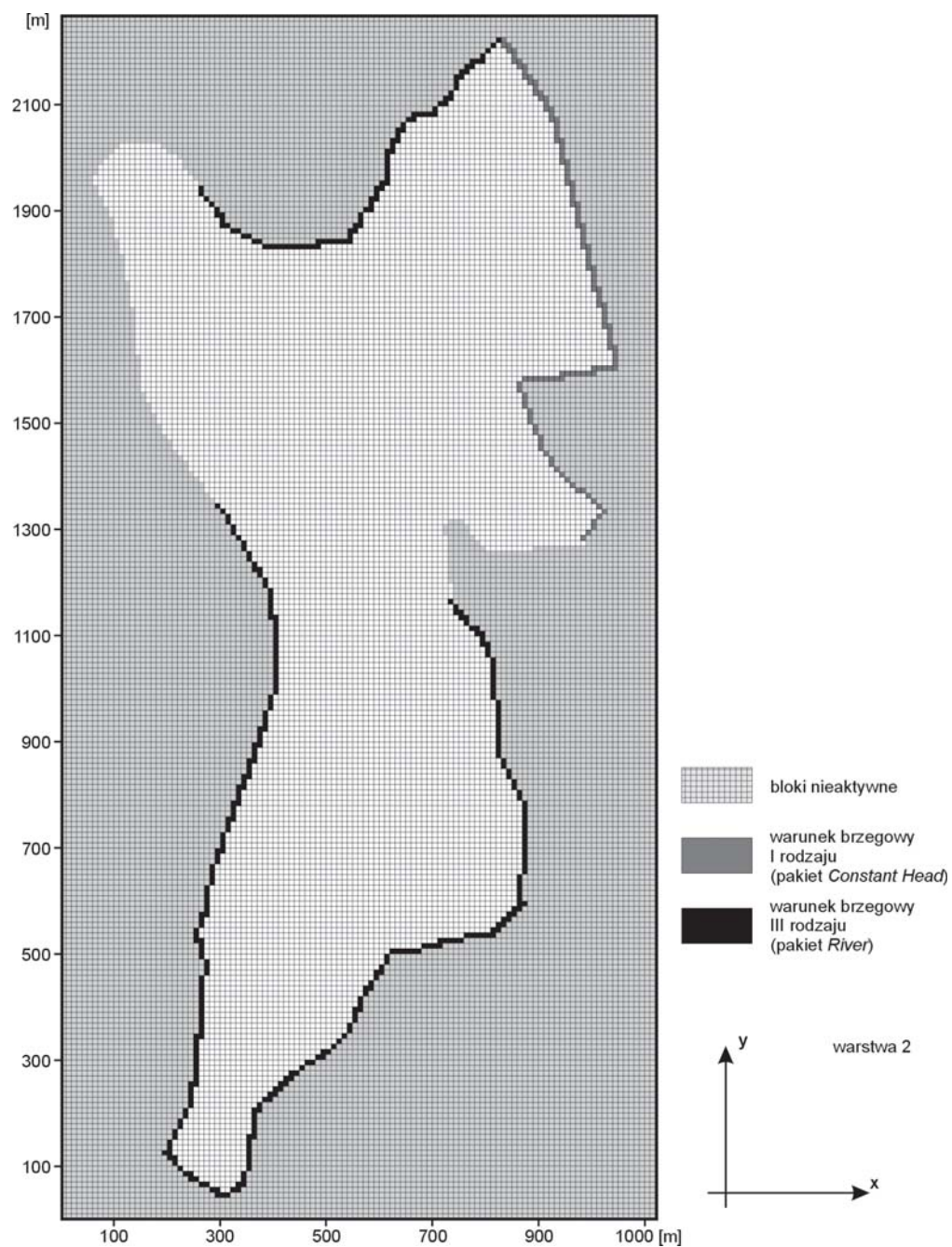
$$\begin{aligned} & kx_{i-1/2,j,k} \Delta y_j \Delta z_k \frac{h_{i-1,j,k}^m - h_{i,j,k}^m}{\Delta x_{i-1/2}} + kx_{i+1/2,j,k} \Delta y_j \Delta z_k \frac{h_{i+1,j,k}^m - h_{i,j,k}^m}{\Delta x_{i+1/2}} + \\ & + ky_{i,j-1/2,k} \Delta x_i \Delta z_k \frac{h_{i,j-1,k}^m - h_{i,j,k}^m}{\Delta y_{j-1/2}} + ky_{i,j+1/2,k} \Delta x_i \Delta z_k \frac{h_{i,j+1,k}^m - h_{i,j,k}^m}{\Delta y_{j+1/2}} + \\ & + kz_{i,j,k-1/2} \Delta x_i \Delta y_j \frac{h_{i,j,k-1}^m - h_{i,j,k}^m}{\Delta z_{k-1/2}} + kz_{i,j,k+1/2} \Delta x_i \Delta y_j \frac{h_{i,j,k+1}^m - h_{i,j,k}^m}{\Delta z_{k+1/2}} + \\ & + p_{i,j,k,n} h_{i,j,k}^m + q_{i,j,k,n} = \beta_{i,j,k} (\Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k) \frac{h_{i,j,k}^m - h_{i,j,k}^{m-1}}{t_m - t_{m-1}} \end{aligned} \quad [4.6]$$

Równanie [4.6] zostało zapisane w formie *explicite*, umożliwiającej aproksymację zmiany wysokości hydraulicznej w czasie w interwale od t_{m-1} do t_m . Istnieje także tzw. zapis *implicite*, pozwalający na wykonanie operacji odwrotnej. W zapisie tym indeksy m po lewej stronie równania zmieniają się na $m+1$.

Wykonanie modelu numerycznego wymaga rozpisania równań różnicowych dla każdego punktu przestrzeni dyskretnej dla każdego kroku czasowego. Zatem model wykonany dla czasoprzestrzeni dyskretnej odwzorowanej za pomocą i kolumn, j wierszy, k warstw i t kroków czasowych sprowadza się do zapisania układu $i \cdot j \cdot k \cdot t$ równań algebraicznych z $i \cdot j \cdot k \cdot t$ niewiadomych. Z reguły są to wielkie układy równań, które najczęściej są rozwiązywane metodami iteracyjnymi. Do rozwiązania układu równań różnicowych, podobnie jak w przypadku ogólnego równania przepływu, niezbędne jest wyznaczenie warunków brzegowych, a w przypadku filtracji nieustalanej – także warunków początkowych.

4.1.2. Schemat dyskretyzacji przestrzeni i czasu

Dyskretyzacja przestrzeni wymaga podziału modelowanego obszaru na bloki obliczeniowe o stałym lub zmiennym wymiarze. Wielkość kroku dyskretyzacji powinna być dobrana w taki sposób, aby możliwe było jak najwierniejsze odwzorowanie elementów rozpoznania hydrogeolo-

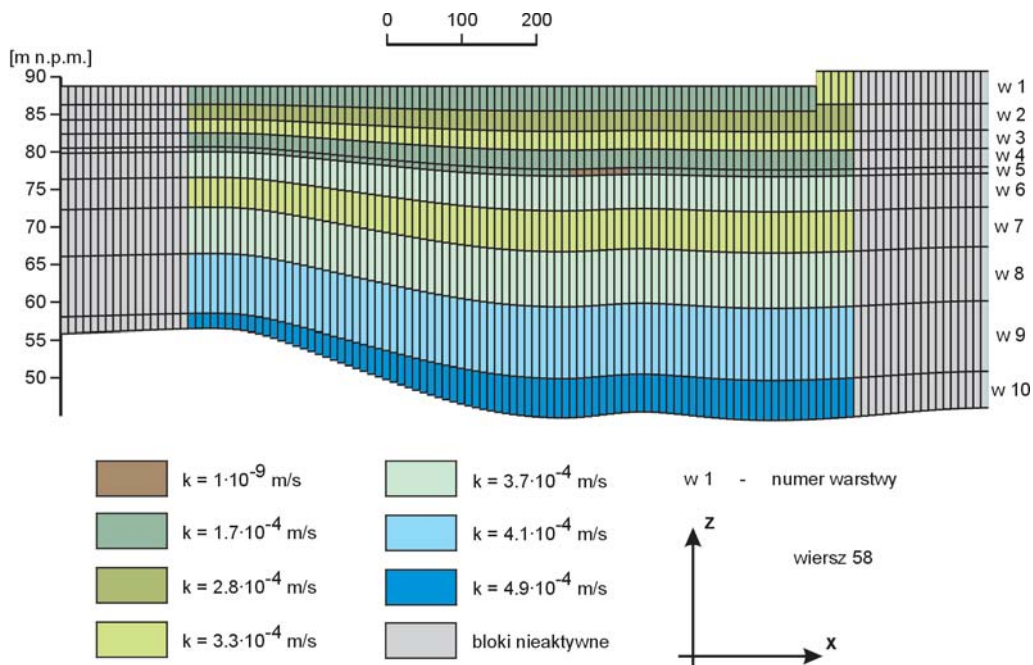


Ryc. 4.3. Dyskretyzacja przestrzeni modelowanego obszaru oraz warunki brzegowe dla warstwy 2

gicznego. W przypadku gdy model przepływu stanowi podstawę do obliczeń transportu masy, stosowany schemat dyskretyzacji powinien także uwzględniać możliwość jak najlepszego odwzorowania rozkładu stężeń początkowych migrującej substancji.

W odniesieniu do systemu hydrogeologicznego w rejonie składowiska odpadów komunalnych Otwock dyskretnego odwzorowania przestrzeni modelu konceptualnego w płaszczyźnie poziomej (XY) dokonano za pomocą siatki ortogonalnej, dzielącej obszar na kwadratowe bloki o boku długości 10 m. Następnie odwzorowano zmienną miąższość modelowanej warstwy poprzez uwzględnienie przestrzennego rozkładu rzędnej stropu iłów plioceńskich (patrz rozdz. 3.4.1). Podstawą do wyznaczenia przebiegu tej powierzchni była siatka interpolacyjna sporządzona w pliku *grd* metodą interpolacyjną *kriging*. Kolejnym krokiem było sprowadzenie modelowanego obszaru do strefy ograniczonej od zachodu brzegiem Wisły, od północy brzegiem Świdra, od południa oraz wschodu brzegiem Kanału Bielińskiego i dalej brzegiem jeziora „Starorzecze” oraz linią wyznaczaną przez piezometry 1 i 4 (ryc. 3.2). Wszystkie bloki siatki spoza tej strefy wyłącznie z obliczeń, traktując je jako bloki nieaktywne. Następnie dokonano dyskretyzacji przestrzeni po osi pionowej Z. Przestrzeń wypełnioną przez osady czwartorzędowe tworzące jedną warstwę wodonośną zdecydowano się odwzorować za pomocą 10 podwarstw o zróżnicowanej miąższości (ryc. 4.4). Taki schemat dyskretyzacji pozwolił na uwzględnienie niejednorodności warstwy wodonośnej oraz przestrzennej zmienności stężeń przy wyznaczaniu warunków początkowych do modelu transportu masy.

Dyskretyzacja czasu w programie MODFLOW jest oparta na tzw. okresach wymuszenia (*stress periods*), rozumianych jako przedziały czasu, w których wszystkie wymuszenia zadane w modelu mają stałą wartość. Użytkownik definiuje wielkość tych przedziałów pośrednio, po-



Ryc. 4.4. Schemat odwzorowania niejednorodności systemu na tle dyskretyzacji przestrzeni w płaszczyźnie XZ

przez zadanie przedziałów czasowych dla stałych wartości zadawanych warunków brzegowych oraz stałych wartości wymuszeń wynikających z członu źródłowego układu równań różnicowych. Na tej podstawie program automatycznie dokonuje dyskretyzacji czasu na okresy wymuszenia. Okresy wymuszenia są dzielone z kolei na kroki czasowe (*time steps*) o stałej lub zmiennej długości w granicach danego okresu. Wielkość kroków czasowych definiuje się poprzez zadanie ich liczby dla każdego okresu wymuszenia oraz określenie wartości mnożnika długości. Dzięki temu możliwe jest zadanie różnej długości kroków czasowych dla poszczególnych okresów wymuszeń.

Modelowany obszar obejmuje fragment dolinnej strefy drenażowej. Przeprowadzone badania statystyczne (patrz rozdz. 3.4.2.3) wykazały, że głównym czynnikiem kształtującym zmienność przepływu wód podziemnych w tej strefie jest dynamika stanów wód powierzchniowych. Dlatego też czynnik ten potraktowano jako główne kryterium dyskretyzacji czasu. Podziału na okresy wymuszenia dokonano na podstawie czasów przejścia fal wezbraniowych oraz okresów niżówek zarejestrowanych na Wiśle. Dodatkowym kryterium było zmienne natężenie infiltracji efektywnej w czasie. Na podstawie zebranych danych klimatycznych oraz oszacowanej wielkości ewapotranspiracji wyróżniono okresy, w których system był z różnym natężeniem zasilany przez infiltrację efektywną. Wyznaczono także przedziały czasowe, w których brak było tego typu zasilania, co było związane przede wszystkim z zaleganiem pokrywy śnieżnej. Ostatecznie w opracowanym modelu dokonano dyskretyzacji czasu, dzieląc odcinek czasu o długości 368 dni na 28 okresów wymuszenia. Każdy okres wymuszenia podzielono następnie na 10 kroków czasowych o długości określonej przez długość danego okresu wymuszenia oraz przez stałą wartość mnożnika.

4.1.3. Parametry modelu

Przygotowanie modelu wymaga wprowadzenia wartości parametrów hydrogeologicznych dla każdego punktu przestrzeni dyskretnej (każdego węzła obliczeniowego). Podstawowym parametrem jest współczynnik filtracji charakteryzujący wodoprzepuszczalność ośrodka. Program MODFLOW umożliwia wprowadzenie stałej wartości tego parametru dla całej warstwy, wybranego fragmentu warstwy (poligonu) lub pojedynczego bloku. Możliwe jest także określenie anizotropii ośrodka. Poza współczynnikiem filtracji do modelu wprowadzana jest także porowatość efektywna, co pozwala na wyznaczenie średniej rzeczywistej prędkości przepływu. W przypadku obliczeń filtracji nieustalonej niezbędne jest także określenie parametrów charakteryzujących pojemność wodną warstwy.

Sposób odwzorowania niejednorodności systemu ze względu na wodoprzepuszczalność (ryc. 4.4) wynikał z przestrzennego rozkładu wartości współczynnika filtracji (patrz. rozdz. 3.4.2.1). Zróżnicowane wartości tego parametru przypisano do punktów przestrzeni dyskretnej, reprezentujących odmienne typy litologiczne skał. Przyjęto także założenie o izotropowości ośrodka ($k_x = k_y = k_z$). Wartość współczynnika porowatości efektywnej ustalono na podstawie estymacji tego parametru wykonanej dla wyników oznaczeń laboratoryjnych. Pojemność wodna warstwy została wyrażona za pomocą współczynnika odsączalności grawitacyjnej. Wyniki laboratoryjnych oznaczeń tego parametru charakteryzowały się niewielkim rozproszeniem wokół wartości oczekiwanej (rozd. 3.4.2.2). Uzasadnia to przyjęcie stałej dla wszystkich punktów przestrzeni wartości współczynnika odsączalności i pozwala uznać średnią arytmetyczną uzyskanych wyników za wartość reprezentatywną dla pojemności wodnej badanego systemu.

Należy zaznaczyć, że przypisanie średniej arytmetycznej parametru do wszystkich punktów przestrzeni dyskretnej nie może być stosowane w sposób bezkrytyczny. Systemy wodonośne cha-

rakteryzują się zwykle niejednorodnością, która powinna być możliwie najpełniej rozpoznana. Jednak wobec ograniczonej dostępności pomiarowej systemu stopień rozpoznania jego niejednorodności ma zawsze charakter dyskretny. W tej sytuacji określenie przestrzennego rozkładu parametru dla potrzeb modelu matematycznego musi być poprzedzone rzetelną analizą statystyczną. W przypadku stwierdzenia wyraźnej niejednorodności systemu, przestrzenny rozkład parametrów hydrogeologicznych powinien być interpretowany w oparciu o metody geostatystyczne.

4.1.4. Warunki brzegowe i początkowe

Określenie warunków brzegowych i początkowych jest warunkiem koniecznym do rozwiązania układu równań różnicowych, stanowiącego numeryczny model przepływu w warunkach filtracji nieustalonej. Określenie warunków brzegowych pozwala uwzględnić w obliczeniach wymianę wody między systemem a otoczeniem. Zastosowanie odpowiedniego typu warunku brzegowego powinno wynikać z modelu konceptualnego, aby było możliwe odwzorowanie systemu zasilania i drenażu modelowanego ośrodka. W opisywanym modelu zastosowano zewnętrzne warunki brzegowe pierwszego, drugiego oraz trzeciego rodzaju.

Warunek brzegowy I rodzaju (Dirichleta) zakłada swobodną wymianę wody między modelowanym systemem a otoczeniem. Zadawany jest poprzez przypisanie wartości wysokości hydraulicznej na brzegu modelowanego obszaru. W opisywanym modelu warunek ten przyjęto na wschodniej granicy obszaru, na odcinku między jeziorem a korytem Świdra (ryc. 4.3). Wysokość hydrauliczną na tej granicy określono na podstawie rzędnych zwierciadła wód gruntowych obserwowanych w piezometrach 1 i 4 oraz na podstawie zarejestrowanych zmian poziomu wody w Świdrze i jeziorze. Założono, że zmiany H na odcinkach między wymienionymi punktami mają charakter liniowy. W ten sposób określono warunki brzegowe dla każdej z 10 podwarstw. Zadając warunki brzegowe, należało także określić sposób wymiany wody pod dnem cieków powierzchniowych. Założono, że drenaż i/lub infiltracja wód za pośrednictwem Kanału Bielińskiego oraz jeziora w starorzeczu Wisły ma wymiar lokalny. Oznacza to, że wymiana wody za pośrednictwem tych ośrodków dotyczy wyłącznie strefy przypowierzchniowej. W głębszych strefach warstwy, której miąższość przekracza tu zwykle 40 m, wymiana wody odbywa się poprzez przepływ podziemny. Dlatego zdecydowano się na zadanie warunku Dirichleta także na brzegach podwarstw występujących poniżej dna jeziora oraz kanału.

Warunek brzegowy II rodzaju (Neumanna) zadawany jest w sytuacji, gdy jest znana wielkość przepływu prostopadłego do brzegu modelowanego systemu. W praktyce najczęściej wykorzystywany jest szczególny przypadek warunku Neumanna dla $Q = 0$, co oznacza granicę szczelną. Warunek tego typu przyjęto dla powierzchni spągu najniższej podwarstwy, która to powierzchnia stanowi przybliżenie przebiegu stropu trudno przepuszczalnych ilów pliocenskich. Szczelne granice modelu zadano także w podwarstwach poniżej dna Wisły. Zgodnie z przyjętym modelem konceptualnym, rzeka ta stanowi bazę drenażu dla regionalnego systemu krążenia wód podziemnych. Założenie takie wyklucza możliwość wymiany wody między fragmentami warstwy wodonośnej zlokalizowanymi po przeciwnych stronach koryta. Zatem szczelność tej granicy nie wynika z nieciągłości ośrodka wodonośnego, ale ze stanu hydrodynamicznego związanego z regionalnym systemem krążenia. Wymiana wody na tym brzegu systemu odbywa się wyłącznie za pośrednictwem koryta Wisły, co zostało odwzorowane w modelu za pomocą warunku brzegowego III rodzaju.

Warunki brzegowe III rodzaju zadano przy wykorzystaniu pakietu RIVER (M.G. McDonald, A.W. Harbaugh, 1988). Warunek typu RIVER zadano dla granic obszaru wyznaczonych przez koryta rzek Wisły, Świdra, Kanału Bielińskiego oraz jeziora. Warunek ten, uwzględniając wpływ zwierciadła wody w rzece na poziom wód podziemnych, symuluje przepływ wody między ciekami a warstwą wodonośną. Zastosowanie tego warunku wymagało określenia rzędnej zwierciadła wody cieków powierzchniowych, czego dokonano na podstawie pomiarów terenowych. Dodatkowo pakiet RIVER wymaga uwzględnienia współczynnika przewodności osadów dennych c :

$$c = \frac{kLW}{m} \quad [4.7]$$

gdzie:

- k – współczynnik filtracji osadów dennych [m/s],
- m – miąższość osadów dennych [m],
- L – długość cieku [m],
- W – szerokość cieku [m].

Podstawowym problemem przy szacowaniu wartości współczynnika c jest prawidłowe określenie miąższości oraz współczynnika filtracji osadów dennych. Dlatego też oszacowania wartości tego współczynnika dla poszczególnych odcinków cieków powierzchniowych dokonano na etapie kalibracji modelu.

Zadanie warunków początkowych w modelu przepływu wód podziemnych sprowadza się do określenia wartości wysokości hydraulicznej dla każdego punktu przestrzeni dyskretnej (dla każdego bloku) w chwili początkowej t_0 . W przypadku rozważanego systemu znany był początkowy rozkład wysokości hydraulicznej wyłącznie w strefie przypowierzchniowej warstwy. W celu określenia rozkładu ciśnień dla pozostałych punktów przestrzeni zdecydowano się na wstępne wykonanie modelu filtracji ustalonej. Obliczenia przeprowadzono na podstawie wartości wymuszeń z dnia 24 maja 2004 roku. Skalibrowany model pozwolił na określenie warunków początkowych we wszystkich punktach przestrzeni dyskretnej. Jest to standardowa procedura postępowania nawet wówczas, gdy znany jest empiryczny rozkład ciśnień we wszystkich strefach głębokościowych systemu (G.O. Essink, 2000). Przyczyną jej powszechnego stosowania jest fakt, że wartości wysokości hydraulicznej wygenerowane na podstawie obliczeń filtracji ustalonej są zgodne z parametrami oraz wymuszeniami modelu. Natomiast wartości uzyskane na podstawie pomiarów terenowych nie posiadają takiej zgodności, zwłaszcza dla początkowych kroków czasowych symulacji.

4.1.5. Kalibracja modelu

Procedura kalibracji modelu polegała między innymi na estymacji wartości współczynnika przewodności osadów dennych. W tym celu we wstępnym etapie prac wykonano model filtracji ustalonej, który odniesiono do stanu hydrodynamicznego zarejestrowanego w maju 2004 r. W okresie tym wartości wszystkich wymuszeń charakteryzowały się niewielką zmiennością w czasie, a system dążył do stanu ustalonego. Stosując metodę prób i błędów, określono wartości liczbowe współczynnika przewodności osadów dennych cieków występujących na brzegach obszaru. Najczęściej stosowanym kryterium dopasowania modelu jest różnica między stanami po-

mierzonymi a obliczonymi. Przy ocenie zgodności obliczonych wartości wysokości hydraulicznej z wartościami pomierzonymi w terenie zastosowano analizę błędów. Procedurę weryfikacji modelu przeprowadzono opierając się na czterech najczęściej stosowanych metodach zapisu tego typu błędów:

– błąd średni (*mean error* – ME),

$$ME = \frac{1}{n} (h_o - h_p)_i \quad [4.8]$$

– błąd średni absolutny (*mean absolute error* – MAE)

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |h_o - h_p|_i \quad [4.9]$$

– standardowy błąd estymacji (*root mean squared* – RMS)

$$RMS = \frac{1}{n} \sqrt{\sum_{i=1}^n (h_o - h_p)_i^2} \quad [4.10]$$

– znormalizowany błąd RMS (*normalized RMS* – nRMS)

$$nRMS = \frac{RMS}{(h_p)_{\max} - (h_o)_{\min}} \quad [4.11]$$

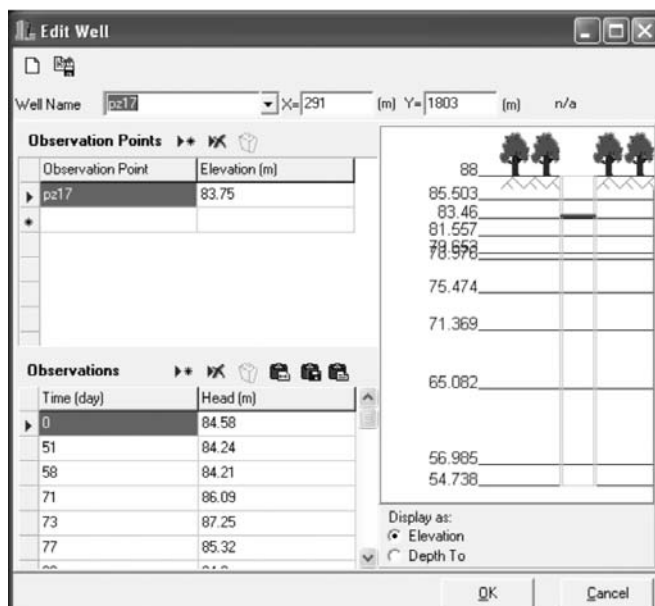
gdzie:

- h_p – pomierzona wartość wysokości hydraulicznej [m],
- h_o – obliczona wartość wysokości hydraulicznej [m],
- $(h_p)_{\max}$ – maksymalna pomierzona wartość wysokości hydraulicznej [m],
- $(h_o)_{\min}$ – minimalna obliczona wartość wysokości hydraulicznej [m],
- n – liczba węzłów obliczeniowych,
- i – numer węzła.

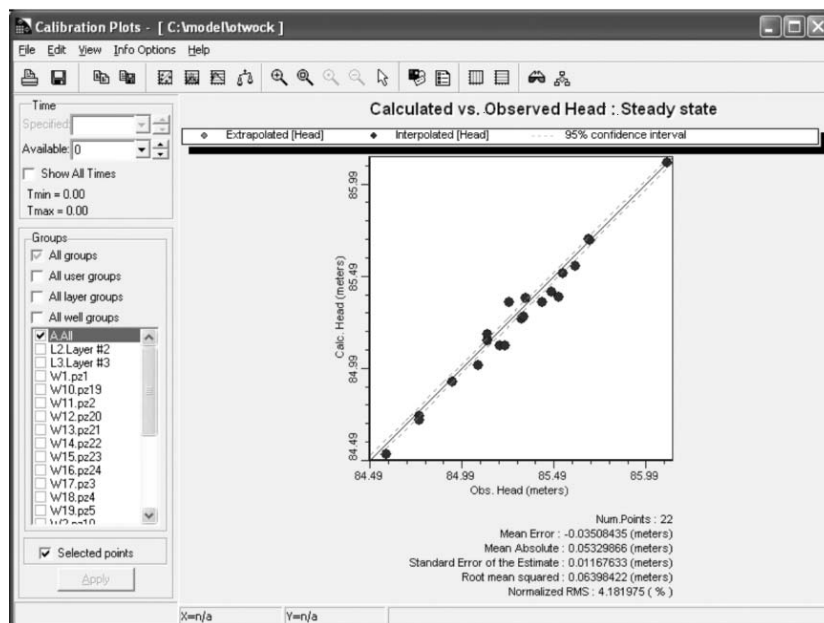
Program MODFLOW dokonuje automatycznie oszacowania wartości wymienionych błędów. Wymaga to jednak wprowadzenia znanych empirycznych wartości wysokości hydraulicznej w bloku *Head Observation Wells*. Wprowadzając dane empiryczne, należy zdefiniować współrzędne przestrzenne punktu oraz wartość wysokości hydraulicznej i czas pomiaru (ryc. 4.5).

Oceny dopasowania wartości obliczonych do danych empirycznych można następnie dokonać w module *Output* (pakiet *Graphs*). Program wyświetla wykres dopasowania oraz podaje oszacowania błędów (ryc. 4.6). W przypadku opisywanego modelu, po przeprowadzeniu kalibracji, wartości błędów kształtowały się następująco: ME = -0,04 m, MAE = 0,05 m, RMS = 0,06 m i nRMS = 4,18%. Wartości te wskazują na dobre dopasowanie wyników obliczeń do danych empirycznych. Procedura kalibracji modelu pozwoliła na określenie optymalnych wartości współczynnika przewodności osadów dennych cieków powierzchniowych, przy czym stwierdzono wyraźne różnicowanie wartości tego współczynnika określonych dla Wisły, Świdra i Kanału Bielińskiego.

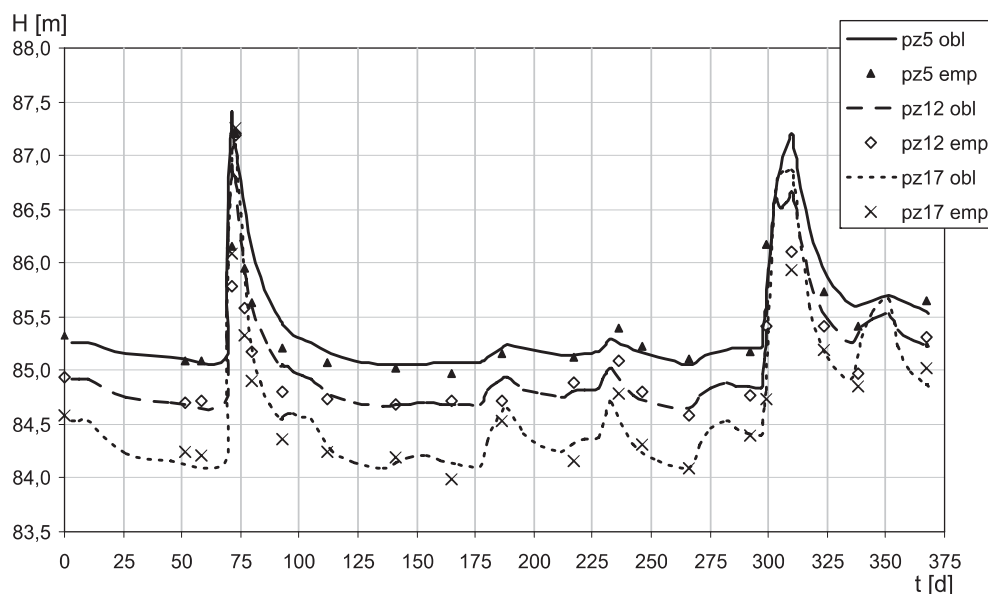
Kolejnym etapem postępowania było określenie natężenia infiltracji efektywnej dla poszczególnych kroków czasowych. Wstępnie do modelu wprowadzono wartości infiltracji oszacowane na podstawie miesięcznych sum opadów atmosferycznych oraz obliczonych miesięcznych war-



Ryc. 4.5. Schemat wprowadzenia danych do kalibracji modelu przepływu (okno programu Visual MODFLOW)



Ryc. 4.6. Porównanie empirycznych i obliczonych wartości wysokości hydraulicznej (okno programu Visual MODFLOW)



Ryc. 4.7. Porównanie reakcji systemu hydrogeologicznego i jego modelu na przykładzie wysokości hydraulicznej w piezometrach nr 5, 12 i 17

obl – wartości obliczone, emp – wartości pomierzone w terenie

tości ewapotranspiracji (rozdz. 3.4.2.3). Postępowanie przeprowadzono dla modelu filtracji nieustalonej. Zastosowana procedura polegała na porównaniu reakcji modelu na zadawane wymuszenia z reakcją systemu rzeczywistego. Szczególnie ważnym wyznacznikiem była tu reakcja modelu na intensyfikację zasilania po roztopach. Ostatecznie stwierdzono wysoką zgodność wyników obliczeń modelowych z wartościami obserwowanymi w terenie, co potwierdza poprawność przeprowadzonej procedury identyfikacji modelu oraz dokładność aproksymacji systemu (ryc. 4.7).

4.1.6. Bilans wodny modelowanego obszaru

Zestawienie całkowitego dopływu i odpływu z modelowanego systemu hydrogeologicznego nazywane jest bilansem wodnym. Bilans liczony w programie MODFLOW nie jest bilansem masy w ścisłym znaczeniu tego terminu, ponieważ odnosi się do objętości wody i objętości przepływu w modelowanym systemie. Obliczenie bilansu wodnego pozwala na ocenę poprawności iteracyjnego rozwiązania układu równań różnicowych. Techniki numeryczne stosowane w modelach przepływu wód podziemnych nie zawsze prowadzą do prawidłowego rozwiązania. Najczęściej spotykane błędy obliczeń wynikają z przedwczesnego zatrzymania procedury iteracyjnej, jeszcze przed osiągnięciem najbliższej aproksymacji prawidłowego rozwiązania. Numeryczny model przepływu oparty jest na zasadzie ciągłości w odniesieniu do każdego bloku obliczeniowego. Zasada ciągłości powinna obowiązywać także w odniesieniu do całkowitego dopływu i odpływu z modelowanego obszaru, co oznacza, że różnica między tymi wielkościami

powinna odpowiadać całkowitej zmianie w zasobności wodnej systemu. Ponieważ program MODFLOW wykonuje obliczenia bilansu wodnego niezależnie od procedury rozwiązania układu równań różnicowych, może on stanowić podstawę do oceny poprawności modelu.

Do obliczenia bilansu modelowanej warstwy wodonośnej zastosowano aplikację ZoneBudget (A.W. Harbaugh, 1990) dostępną w pakiecie Visual MODFLOW. Program ten liczy bilans wodny systemu na podstawie wyników obliczeń generowanych przez program MODFLOW. W pierwszej kolejności policzono całkowity bilans wodny obszaru dla każdego kroku czasowego. W obliczeniach nie uwzględniano bilansu przepływu w pojedynczych blokach, a jedynie całkowity dopływ i odpływ z modelowanego systemu, wynikający z wymuszeń zewnętrznych. W przypadku poprawnego rozwiązania układu równań różnicowych, wielkości dopływu i odpływu powinny być sobie równe, przy założeniu, że woda magazynowana w warstwie jest traktowana jako odpływ z systemu, a woda uwalniana z zasobów warstwy wodonośnej – jako dopływ do systemu. Przy tak zdefiniowanych założeniach możliwe jest obliczenie procentowego błędu bilansu D z zależności (A.W. Harbaugh, 1990):

$$D = \frac{100(IN - OUT)}{\frac{IN + OUT}{2}} \quad [4.12]$$

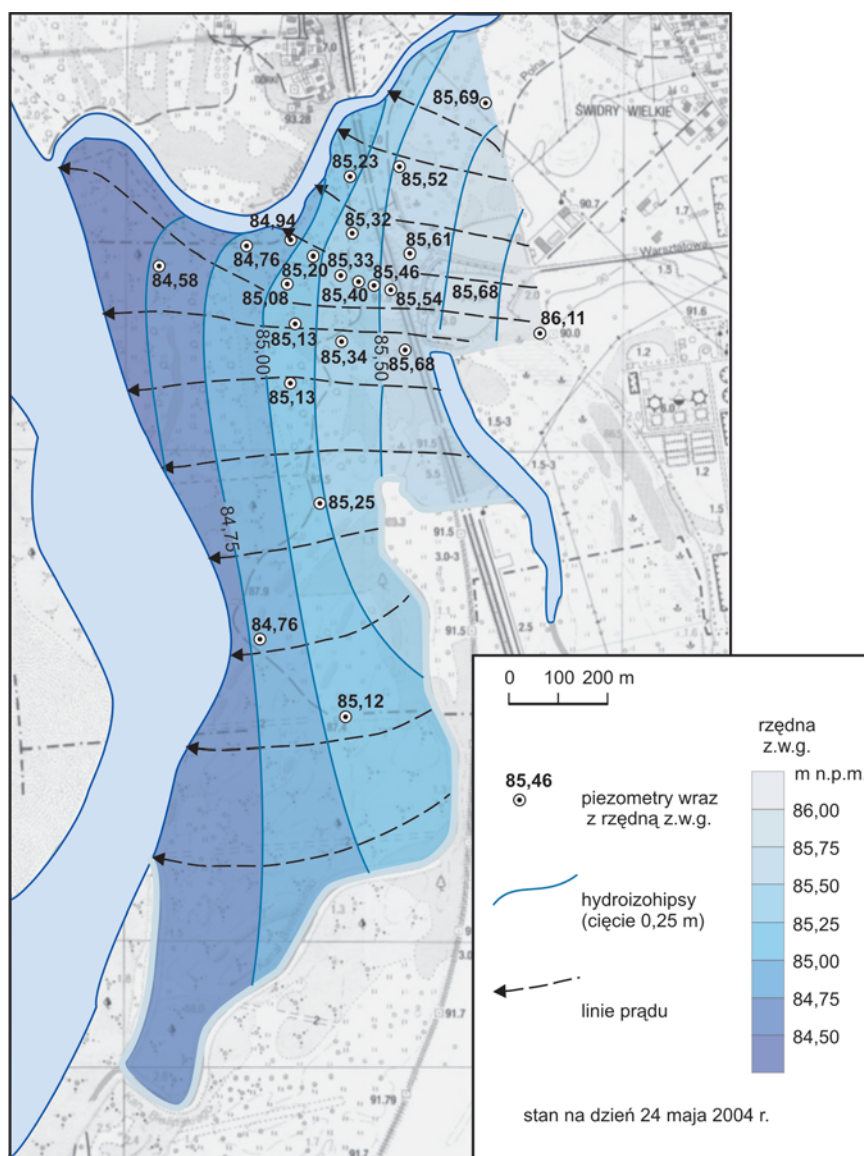
gdzie:

- IN – całkowity dopływ do systemu,
- OUT – całkowity odpływ z systemu.

Jeżeli układ równań różnicowych został rozwiązany prawidłowo, procentowy błąd bilansu powinien przyjmować małe wartości. W przypadku wykonanego modelu wartość ta w zależności od kroku czasowego zmienia się w zakresie od $-0,1$ do $0,1\%$, co wskazuje, że otrzymane rozwiązanie układu równań różnicowych nie jest obciążone błędem wynikającym z procedury iteracyjnej.

Program ZoneBudget umożliwia wykonanie obliczeń bilansu wodnego w wyznaczonych strefach modelowanego obszaru. Tego typu obliczenia wymagają zachowania przez program MODFLOW wartości bilansu wodnego dla każdego bloku obliczeniowego (opcja *cell-by-cell*). Wyróżnia się cztery główne typy dopływu lub odpływu z pojedynczego bloku w opcji *cell-by-cell*: (1) przepływ związany z zewnętrznymi wymuszeniami, jak zasilanie infiltracyjne i ewapotranspiracja, (2) przepływ związany z magazynowaniem lub uwalnianiem zasobów wodnych, (3) przepływ do lub z bloku, w którym zadano warunek brzegowy, (4) bilans przepływu między blokiem obliczeniowym a blokami sąsiadującymi. Program ZoneBudget pozwala na wyznaczenie stref w granicach modelowanego obszaru poprzez przypisanie numeru strefy do każdego bloku obliczeniowego. Następnie wykonuje obliczenia bilansu wodnego, zestawiając wymienione cztery elementy ze wszystkich bloków przypisanych do danej strefy.

Na podstawie bilansu wodnego w strefach przeprowadzono obliczenia wielkości drenażu Wisły i Świdra na odcinkach graniczących z modelowanym obszarem. Wymagało to wyznaczenia niezależnych stref wzdłuż linii brzegowej obu rzek. Następnie na podstawie mapy hydroizohips (ryc. 4.8) dokonano szacunkowych obliczeń wielkości drenażu na siatce hydrodynamicznej. W przypadku prawidłowego rozwiązania układu równań różnicowych wartości drenażu obu rzek, określone na podstawie bilansu wodnego w strefach dla pierwszego kroku czasowego, powinny być zbliżone do wartości wynikających z szacunkowych obliczeń na siatce hydrodynamicznej. Uzyskana z obliczeń bilansowych wielkość drenażu wód podziemnych z modelowanego obszaru przez Wisłę wyniosła $2543,2 \text{ m}^3/\text{d}$, a przez Świdra – $1042,7 \text{ m}^3/\text{d}$. Natomiast wartości drenażu



Ryc. 4.8. Siatka hydrodynamiczna – stan na dzień 24 maja 2004 r.

uzyskane z obliczeń na siatce hydrodynamicznej wyniosły odpowiednio 2448,5 m³/d dla Wisły i 1089,3 m³/d dla Świdra. Zbliżone wartości drenażu uzyskane obiema metodami są zatem kolejnym potwierdzeniem poprawności wykonanych modelowych obliczeń przepływu wód podziemnych.

Ryc. 4.9. Obliczony rozkład wysokości hydraulicznej wraz liniami prądu od składowiska

Wynikiem prac modelowych jest rozkład wysokości hydraulicznej uzyskany dla czasoprzeźreni dyskretniej (ryc. 4.9). Weryfikacja obliczeń numerycznych przeprowadzona na podstawie analizy dopasowania do danych empirycznych oraz bilansu wodnego wskazuje, że wykonany model jest dobrym przybliżeniem badanego systemu wodonośnego i może być wykorzystany do budowy numerycznego modelu transportu masy.

4.2. MODEL TRANSPORTU MASY

4.2.1. Oprogramowanie i przyjęte założenia

Model transportu masy wykonano na podstawie przedstawionego powyżej modelu przepływu. Do obliczeń wykorzystano program MT3D (wersja MT3DMS), który pozwala na obliczenia transportu masy w strumieniu adwekcyjno-dyfuzyjnym w warunkach filtracji ustalonej lub niestalonej. Dodatkowo możliwe jest modelowanie reakcji sorpcyjnych sterowanych równowagowo z wykorzystaniem izoterm Henry’ego, Freundlicha lub Langmuira. Wersja MT3DMS oferuje użytkownikowi kilka schematów obliczeniowych do rozwiązania zagadnienia transportu adwekcyjnego, w stosunku do których można zastosować podział na dwie grupy. Pierwszą stanowią metody, które nie w pełni realizują zasadę zachowania masy: metoda charakterystyk (*Method of Characteristics* – MOC), zmodyfikowana metoda charakterystyk (*Modified Method of Characteristics* – MMOC), mieszana metoda charakterystyk (*Hybrid Method of Characteristics* – HMOC).

Metoda charakterystyk wykorzystuje technikę przenoszenia cząstek, bazując na metodzie Eulera-Lagrange’a. Wielka liczba cząstek jest przenoszona w czasie, a następnie zostaje zachowana wartość stężenia oraz pozycja każdej cząstki. Dyfuzja, sorpcja oraz reakcje chemiczne są liczone metodą różnic skończonych. MOC pozwala zminimalizować wartość dyfuzji numerycznej, ale obliczenia są długotrwałe i wymagają wielkich ilości pamięci operacyjnej komputera. Zmodyfikowana metoda charakterystyk została stworzona w celu poprawy wydajności obliczeniowej MOC. Pozycja każdej przenoszonej cząstki jest przypisywana do punktu centralnego bloku obliczeniowego dla każdego kroku czasowego. W rezultacie pozwala to na znaczne skrócenie czasu obliczeń kosztem powstania zjawiska dyfuzji numerycznej. Mieszana metoda charakterystyk łączy w sobie walory obu opisanych metod. W schemacie tym w strefach ostrych frontów stężeń (*sharp fronts of concentrations*) migrujących zanieczyszczeń obliczenia są wykonywane metodą charakterystyk, zaś poza nimi program bazuje na zmodyfikowanej metodzie charakterystyk.

Druga grupa schematów obliczeniowych wykorzystuje metodę różnic skończonych do oceny przenoszenia adwekcyjnego. Zaliczyć należy tu schematy różnic skończonych – pod prąd (*Upstream Finite Difference*) oraz dostępny w wersjach MT3DMS i MT3D99 schemat centralnych różnic skończonych (*Central Finite Difference*) (C. Zheng, 1990, 1999; C. Zheng, P.P. Wang, 1999). Oba schematy są oparte na zasadzie zachowania masy i w związku z tym charakteryzują się bardzo małymi błędami bilansu masy. Technika *Upstream Finite Difference* może jednak powodować znaczącą dyfuzję numeryczną przy rozwiązywaniu problemów dotyczących ostrych frontów stężeń migrujących zanieczyszczeń. Natomiast technika *Central Finite Difference* jest podatna na nadmierne sztuczne oscylacje przy rozwiązywaniu zagadnienia transportu adwekcyjnego. Ostatecznie do potrzeb tworzonego modelu przyjęto zmodyfikowaną metodę charakterystyk (MMOC).

Przeprowadzone obliczenia transportu masy objęły odwzorowanie migracji jonów chlorkowych oraz magnezowych. Jony chlorkowe potraktowano jako składnik konserwatywny, tzn. założono, że podlegają one przenoszeniu w strumieniu adwekcyjno-dyfuzyjnym, natomiast nie biorą udziału w interakcji roztwór–faza stała. Przyjęcie powyższego założenia pozwoliło na identyfikację wartości dyspersji hydrodynamicznej na podstawie pomiarów empirycznych, określających zmiany stężeń chlorków w czasie i przestrzeni systemu rzeczywistego. Migrację jonów magnezowych modelowano przy zastosowaniu wartości dyspersji hydrodynamicznej, określonej na podstawie modelu migracji jonów chlorkowych oraz na podstawie wyników laboratoryjnych oznaczeń parametrów sorpcyjnych skał uzyskanych metodą dynamiczną.

W obliczeniach modelowych założono, że jony chlorkowe oraz magnezowe są wprowadzane do systemu wraz ze strumieniem wód infiltracyjnych (opadowych i powierzchniowych) oraz wraz z dopływem wód podziemnych od strony wyższych tarasów doliny Wisły. W modelu uwzględniono także iniekcję wymienionych jonów do warstwy wodonośnej w wyniku przemycania składowiska odpadów komunalnych. Obliczenia nie uwzględniały natomiast rozpuszczania i wytrącania faz mineralnych. Iniekcję jonów Mg^{2+} i Cl^- do badanej warstwy wodonośnej odwzorowano za pomocą warunków brzegowych.

4.2.2. Warunki brzegowe i początkowe

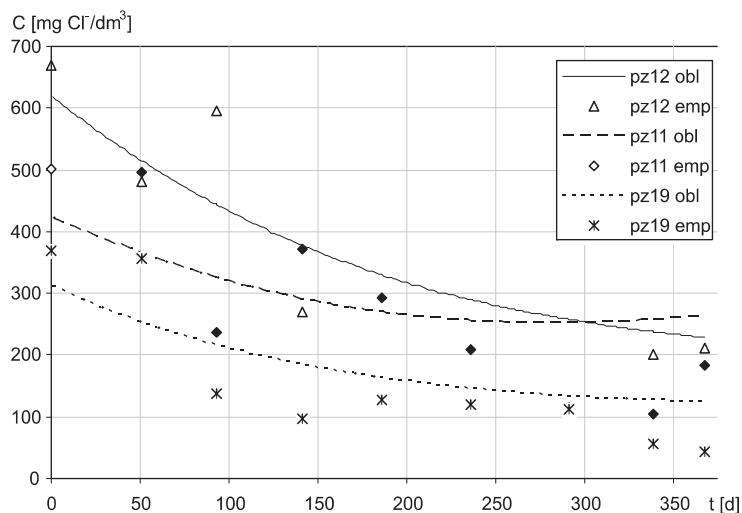
Stężenia modelowanych składników wód podziemnych są efektem procesów zachodzących w obrębie badanej warstwy wodonośnej oraz wymuszeń w strefie brzegowej modelowanego obszaru i w otoczeniu składowiska odpadów komunalnych. Wymuszenia te odwzorowano za pomocą zewnętrznych i wewnętrznych warunków pierwszego rodzaju. Podstawą do wyznaczenia zewnętrznych warunków brzegowych były stężenia jonów chlorkowych i magnezowych obserwowane w wodach Wisły, Świdra, Kanału Bielińskiego i jeziora „Starorzecze” oraz w wodach podziemnych pobranych z piezometrów nr 1 i 4. Wewnętrzne warunki brzegowe zadano w celu odwzorowania stężeń wymienionych jonów w strumieniu wody podziemnej poniżej składowiska. Podstawą do wyznaczenia warunków wewnętrznych były wyniki laboratoryjnych oznaczeń chemicznych wód pobranych z piezometrów nr 2, 6 i 7.

Warunki początkowe modelu wyznaczono wykorzystując mapy rozkładu stężeń jonów chlorkowych i magnezowych z dnia 24 maja 2004 r. Mapy wykonano na podstawie wyników pomiarów stężeń tych jonów w piezometrach ujmujących wody ze strefy przypowierzchniowej. Rozkład stężeń początkowych w profilu pionowym określono natomiast na podstawie wyników analiz próbek wody pobranych z różnych głębokości techniką PowerProbe. Wobec braku głębokich piezometrów w granicach modelowanego obszaru, do wyznaczenia warunków początkowych w niższych podwarstwach wykorzystano archiwalne wyniki analiz laboratoryjnych wykonanych dla studni zaopatrujących sieć wodociągową Otwocka. Studnie te zlokalizowane są kilkaset metrów na wschód od badanego poligonu i ujmują wody z głębszych stref modelowanej warstwy. Ostatecznie w niższych podwarstwach zadano stałą wartość stężenia początkowego jonów chlorkowych i magnezowych dla każdego punktu przestrzeni dyskretnej, wyznaczoną na podstawie średnich wartości stężeń obserwowanych w dwunastu studniach sieci wodociągowej.

4.2.3. Wyznaczenie stałych dyspersji dla przyjętego schematu dyskretyzacji

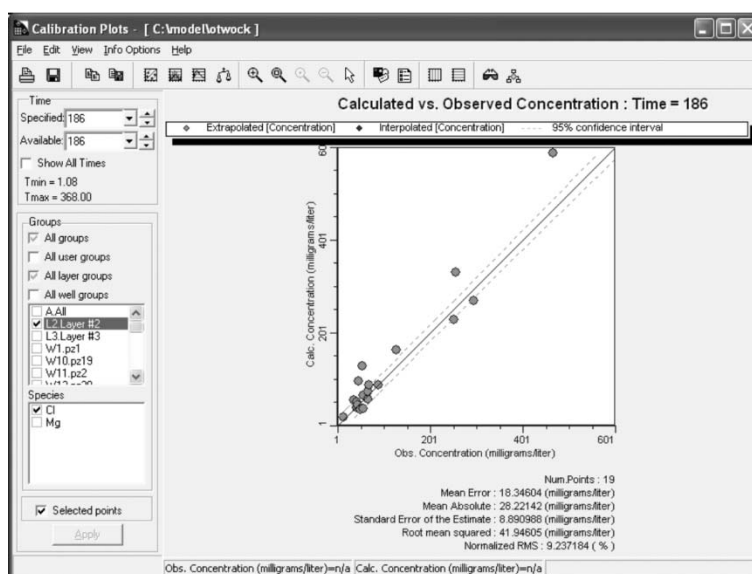
Pierwszym etapem przeprowadzonych prac modelowych było numeryczne odwzorowanie migracji jonów chlorkowych w strumieniu adwekcyjno-dyfuzyjnym w celu identyfikacji wartości stałych dyspersji. Metoda identyfikacji i weryfikacji powyższego parametru polegała na porównaniu pomierzonych i obliczonych wartości stężeń jonów chlorkowych w piezometrach zlokalizowanych w strefie oddziaływania na wody podziemne składowiska odpadów komunalnych. Wartości stężeń zmierzone w piezometrach zlokalizowanych poza tą strefą posłużyły do kalibracji zawartości chlorków w wodach infiltracyjnych. Na potrzeby obliczeń założono, że wartość ta jest stała dla całego modelowanego obszaru. Następnie metodą prób i błędów badano wartość stałych dyspersji, poszukując najlepszego numerycznego przybliżenia krzywych przejścia zarejestrowanych w piezometrach zlokalizowanych poniżej składowiska (ryc. 4.10). Przy doborze wartości stałych dyspersji dążono do minimalizacji wartości błędów modelowania. Błędy te liczone były w podobny sposób jak dla modelu przepływu (patrz rozdz. 4.1.5). W tym przypadku głównym kryterium do oszacowania wielkości ME, MAE, RMS i nRMS była różnica między obliczonymi a pomierzonymi wartościami stężeń jonów chlorkowych. W programie Visual Modflow wartości błędów liczone są automatycznie osobno dla każdego z okresów wymuszeń. Podobnie jednak jak w przypadku obliczeń przepływu niezbędne jest wcześniejsze wprowadzenie danych empirycznych w bloku *Conc. Observation Wells*. Oceny dopasowania wartości obliczonych do danych empirycznych możliwe jest w module *Output* (pakiet *Graphs*). W module tym użytkownik ma możliwość sporządzenia wykresu dopasowania wraz z oszacowaniami błędów (ryc. 4.11).

Ostatecznie dla przyjętego schematu dyskretyzacji przestrzeni określono wartość stałej dyspersji podłużnej α_L na 0,95 m, a stałej dyspersji poprzecznej α_T na 0,095 m. Badania prowadzone przez M. Xu i Y. Ecksteina (1995) wskazują statystyczną zależność stałej dyspersji i drogi filtracji i pozwalają na oszacowanie wartości stałej dyspersji podłużnej zgodnie z równaniem:



Ryc. 4.10. Porównanie reakcji systemu i modelu na przykładzie piezometrów 11, 12 i 19

obl – stężenia obliczone, emp – stężenia obserwowane

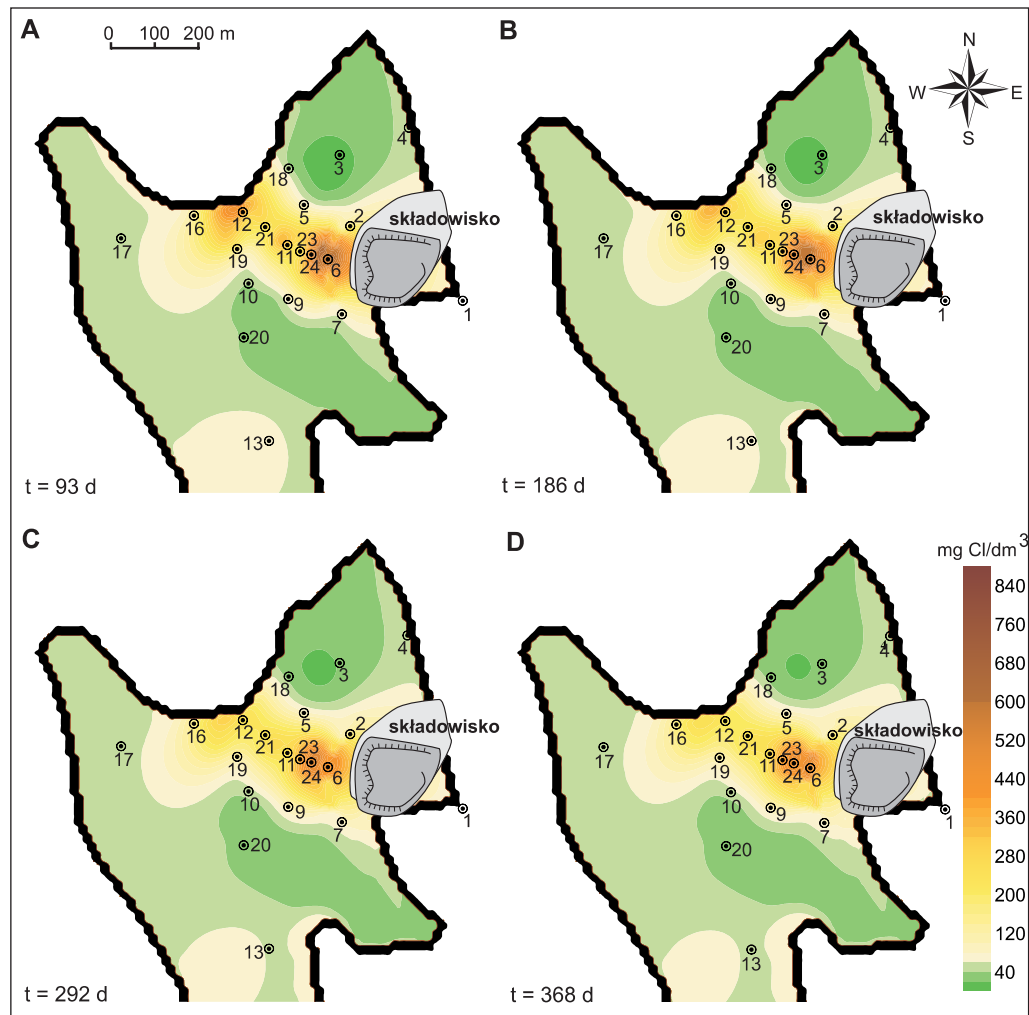


Ryc. 4.11. Porównanie empirycznych i obliczonych wartości stężeń jonów chlorkowych (okno programu Visual Modflow)

$$\alpha_L = 0,83(\log L)^{2,414} \quad [4.13]$$

Dla przyjętego kroku dyskretyzacji przestrzeni stała dyspersji podłużnej obliczona na podstawie tego równania przyjmuje wartość 0,83 m i jest zbliżona do wielkości uzyskanej podczas kalibracji modelu.

Wynikiem modelowych obliczeń migracji jonów chlorkowych jest rozkład stężeń uzyskany dla wszystkich dyskretnych punktów przestrzeni w poszczególnych krokach czasowych. Wykonane na tej podstawie mapy rozkładu (ryc. 4.12) pozwalają na prześledzenie kierunku i tempa migracji tego składnika. Zanieczyszczenia przenikające do wód podziemnych ze składowiska odpadów komunalnych migrują od krawędzi składowiska w kierunku koryta Świdra, tworząc wyraźną plamę. Kierunek migracji kształtowany jest stanem hydrodynamicznym warstwy wodonośnej. Dobra wodoprzepuszczalność ośrodka decyduje o stosunkowo szybkim tempie przemieszczania chlorków, wynoszącym około 70 m/rok. Zmienne w czasie natężenie iniekcji zanieczyszczeń ze składowiska spowodowało powstanie w obrębie plamy lokalnych maksimów stężeń jonów chlorkowych. Powstanie tych maksimów wiązać należy ze wzmocnionym przemywaniem odpadów przez wody podziemne przy wysokich stanach wód gruntowych. Mechanizm ten został odwzorowany w modelu za pomocą wewnętrznego warunku brzegowego zadanego na linii piezometrów 2, 6 i 7. Średnie wartości stężeń chlorków w tych punktach wyniosły odpowiednio 84,7; 668,8 i 73,8 mg/dm³. Obserwowane stężenia były zmienne w czasie. W piezometrze nr 6, zlokalizowanym centralnie przed frontem składowiska, stężenia chlorków mieściły się w przedziale 345,3–880,8 mg/dm³. Zarejestrowana zmienność stężeń została uwzględniona w obliczeniach za pomocą warunku brzegowego, co pozwoliło na odwzorowanie procesu powstawania maksimów lokalnych. Wielkość i przestrzenne usytuowanie tych maksimów są zmienne w czasie, co jest efektem transportu masy w strumieniu adwekcyjno-dyfuzyjnym. Przenoszenie adwekcyjne



Ryc. 4.12. Obliczony rozkład stężeń jonów chlorkowych w wybranych punktach czasowych (warstwa 2, zgodnie z ryc. 4.4)

proceeds to the stepwise migration of chloride ions towards Świdra. The subsequent phenomenon of hydrodynamic dispersion is responsible for the decrease in the initial concentration gradients observed in the plume. Particularly interesting are changes in chloride ion concentrations in the near-stream zone of Świdra. Initially observed local maxima undergo a stepwise disappearance. The modeled drainage character of Świdra causes that pollutants are transported from the modeled system through the river. The Świdra channel thus closes the path for further migration of pollutants from the landfill into the groundwater environment. In effect, the plume stabilizes between the landfill and the river channel, and the observed variability in chloride ion concentrations over time is an effect of the varying intensity of injection of this component into the groundwater.

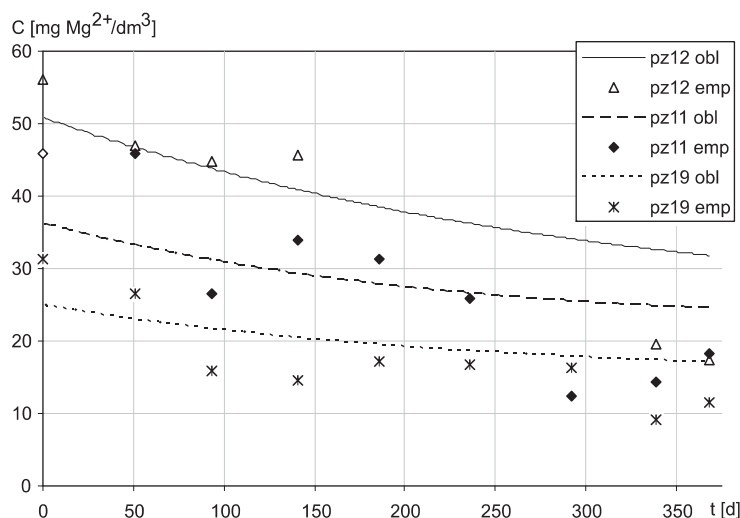
4.2.4. Odwzorowanie adsorpcji jonu magnezowego

Numerycznego odwzorowania migracji jonów magnezowych dokonano na podstawie parametrów izotermy Langmuira, uzyskanych zmodyfikowaną metodą dynamiczną. Podstawą obliczeń transportu jonów magnezowych w strefie pełnego nasycenia był stan hydrodynamiczny warstwy uzyskany za pomocą numerycznego modelu przepływu. Określenie średniej rzeczywistej prędkości przepływu wymagało uwzględnienia w obliczeniach wartości porowatości efektywnej. Dla każdego punktu analizowanej przestrzeni dyskretnej przyjęto stałą wartość porowatości efektywnej ($n_e = 0,3$), odpowiadającą średniej arytmetycznej z wyników laboratoryjnych oznaczeń tego parametru. Obliczenia wymagały również uwzględnienia parametrów dyspersyjnych badanego ośrodka porowatego. Stałe dyspersji uzyskane na podstawie numerycznego opisu migracji jonów chlorkowych są, jak przedstawiono powyżej, dobrym przybliżeniem rzeczywistych parametrów dyspersyjnych ośrodka skalnego. Zatem do odwzorowania transportu jonów magnezowych przyjęto analogiczne wartości stałych dyspersji podłużnej i poprzecznej. Jony magnezu, migrując w środowisku wód podziemnych, podlegają zjawisku sorpcji. Procesy sorpcyjne w modelu odwzorowano na podstawie współczynników liczbowych nieliniowej izotermy Langmuira. Parametry te są wykorzystywane w obliczeniach do wyznaczenia wartości współczynnika opóźnienia R .

Do zdefiniowania przestrzennego rozkładu gęstości objętościowej wykorzystano wyniki laboratoryjnych oznaczeń tego parametru oraz znajomość budowy geologicznej modelowanego obszaru. Na obszarze poligonu badawczego występują głównie piaski średnioziarniste. Stąd też dla większości punktów przestrzeni dyskretnej przyjęto uśrednioną wartość gęstości objętościowej, określoną laboratoryjnie dla osadów tej frakcji ($1,8 \text{ kg/dm}^3$). Natomiast dla przestrzeni dyskretnej, reprezentującej osady o niższej frakcji, przyjęto wartość gęstości objętościowej oznaczoną laboratoryjnie dla piasków gliniastych ($2,1 \text{ kg/dm}^3$). Podobną zasadą kierowano się przy wprowadzaniu do modelu współczynników liczbowych równania Langmuira. Uśrednione a_{\max} i b (wzór 1.35), uzyskane zmodyfikowaną metodą dynamiczną dla piasków średnioziarnistych, wprowadzono do przeważającej części przestrzeni modelu. Natomiast wartości tych parametrów uzyskane dla skał drobnoziarnistych przypisano do przestrzeni modelu reprezentującej te osady.

Ponadto, obliczenia wymagały określenia stężenia magnezu w wodach infiltracyjnych. Podstawą do obliczeń było średnie roczne stężenie jonu magnezu w wodach opadowych, zarejestrowane na stacji Warszawa Okęcie. W efekcie parowania terenowego wartość ta w wodach infiltracyjnych jest zdecydowanie wyższa niż w wodzie opadowej, co musiało zostać uwzględnione w obliczeniach. Stężenie jonu Mg^{2+} w wodach infiltracyjnych oszacowano na podstawie sum opadów atmosferycznych przypadających na każdy okres wymuszenia oraz wielkości ewapotranspiracji w tych okresach. Zestawienie powyższych danych pozwoliło na wyznaczenie wartości mnożników opisujących stopień zateżenia roztworu. Na ich podstawie oszacowano stężenia jonu magnezowego.

Uzyskane w ten sposób wartości stężeń nie uwzględniają wpływu procesów zachodzących w strefie niepełnego nasycenia na zawartość jonu Mg^{2+} w wodach infiltracyjnych; dotyczy to zwłaszcza reakcji rozpuszczania faz mineralnych. Dlatego stężenia te były traktowane jako wielkości o charakterze szacunkowym i wstępnym. Ostatecznego określenia stężenia magnezu w wodach infiltracyjnych dokonano na etapie kalibracji modelu, osobno dla każdego kroku czasowego. Procedura kalibracji sprowadzała się do poszukiwania metodą prób i błędów ilości magnezu wprowadzanego do systemu wraz z infiltracją efektywną na podstawie porównania pomierzonych i obliczonych wartości stężeń w piezometrach zlokalizowanych poza strefą oddziaływania składowiska. Po kalibracji modelu przeprowadzono obliczenia transportu jonów magnezowych

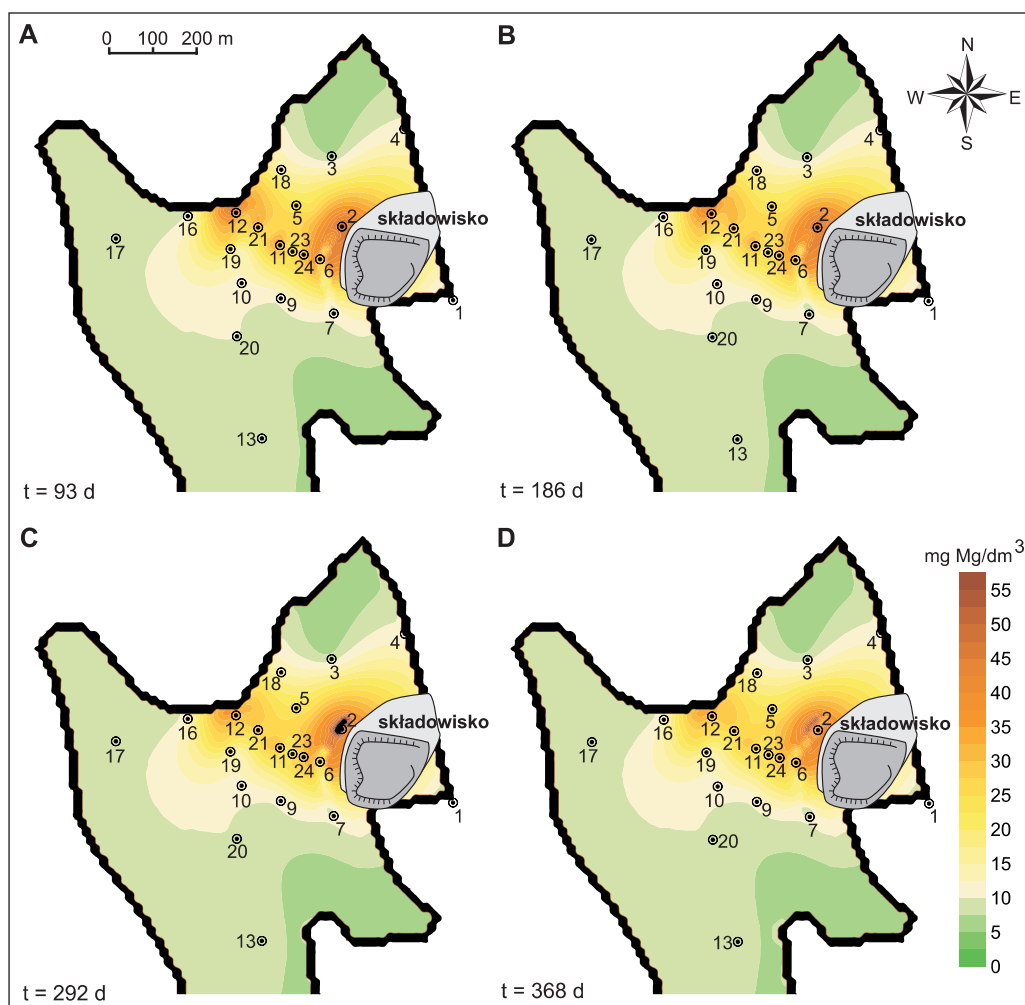


Ryc. 4.13. Porównanie obserwowanych i obliczonych zmian stężeń jonu Mg^{2+} w czasie na przykładzie piezometrów 11, 12, 19

obl – wartości obliczone, emp – wartości obserwowane

w wodach podziemnych w strefie oddziaływania składowiska odpadów. Rezultaty tych obliczeń porównano następnie z danymi empirycznymi (ryc. 4.13).

Podobnie jak w przypadku jonów chlorkowych, wynikiem modelowych obliczeń migracji jonów magnezowych jest rozkład stężeń uzyskany dla wszystkich dyskretnych punktów przestrzeni w poszczególnych krokach czasowych. Wykonane na tej podstawie mapy rozkładu (ryc. 4.14) charakteryzują migrację tego składnika w badanym systemie na przestrzeni analizowanego przedziału czasowego (368 dni). Rozkład stężeń początkowych uzyskany na podstawie opróbowania przeprowadzonego 24 maja 2004 roku wykazał wyraźny wzrost stężeń jonu Mg^{2+} w płytkich wodach podziemnych między składowiskiem a korytem Świdra. W obrębie plamy obecne były liczne lokalne maksima stężeń. Obecność tych maksimów podobnie jak w przypadku chlorków zinterpretowano jako efekt zmiennego w czasie natężenia iniekcji jonu Mg^{2+} ze składowiska, co odwzorowano w modelu za pomocą wewnętrznego warunku brzegowego. Obliczenia modelowe dały podstawę do oceny zmiany pola stężeń jonu Mg^{2+} w wodach podziemnych w czasie. W przypadku tego składnika obliczone tempo migracji od składowiska w kierunku Świdra jest prawie trzykrotnie niższe niż w przypadku jonów chlorkowych. Odpowiada to wartościom współczynnika opóźnienia uzyskanym na podstawie laboratoryjnych oznaczeń metodą dynamiczną. Retardacja magnezu jest spowodowana pozornym opóźnieniem migracji w wyniku oddziaływań sorpcyjnych. Także zmiany początkowych gradientów stężeń Mg^{2+} w obrębie plamy powodowane są zjawiskiem sorpcji, modyfikującym przebieg transportu masy w strumieniu adwekcyjno-dyspersyjnym. Część jonów migrujących ze składowiska odpadów zatrzymywana jest w kompleksie sorpcyjnym fazy stałej. Pozostała część migruje wraz z wodami podziemnymi w kierunku koryta Świdra, gdzie dochodzi do ich wyprowadzania poza modelowany system. Drenujący charakter Świdra zamyka drogę dla dalszej migracji jonów magnezowych w środowisku wód podziemnych.



Ryc. 4.14. Obliczony rozkład stężeń jonów magnezowych w wybranych punktach czasowych (warstwa 2, zgodnie z ryc. 4.4)

Zmiany stężeń jonów magnezu w czasie i przestrzeni warstwy, określone na podstawie obliczeń modelowych, mają podobny przebieg do zmienności uzyskanej empirycznie. Niemniej przy ich interpretacji należy brać pod uwagę potencjalne błędy, jakie mogą towarzyszyć numerycznym obliczeniom transportu masy. Szczególne znaczenie mają tu błędy związane z dyspersją numeryczną oraz sztucznymi oscylacjami. Zastosowana do obliczeń zmodyfikowana metoda charakterystyk pozwala zminimalizować te błędy, lecz nie w pełni realizuje zasadę zachowania masy (C. Zheng, P.P. Wang, 1999). Innym problemem jest sposób odwzorowania w obliczeniach oddziaływań sorpcyjnych. Zastosowanie w tym celu izotermy sorpcji zakłada jednokierunkowy przebieg procesu i nie pozwala na uwzględnienie w obliczeniach reakcji jonowymiennych.

Założenie takie jest uzasadnione dla frontu migrującej chmury. Jednak poza tą strefą wzrasta znaczenie dwukierunkowego przebiegu reakcji (sorpcja–desorpcja) w efekcie wymiany jonowej. Należy także zaznaczyć, że obliczenia dotyczyły okresu 368 dni. Średnia rzeczywista prędkość przepływu wód w rozpatrywanym systemie wskazuje, że zanieczyszczenia przenoszone w strumieniu adwekcyjnym mogą w tym czasie pokonać dystans około 70 metrów. W przypadku jonów Mg^{2+} należy dodatkowo uwzględnić opóźnienie wynikające z oddziaływań sorpcyjnych, co skracając dystans możliwy do pokonania w ciągu 1 roku do około 26 m. Przeprowadzone obliczenia nie pozwoliły zatem na pełne prześledzenie migracji strumienia masy od krawędzi składowiska do koryta Świdra (między warunkami brzegowymi). W związku z tym migracja jonów magnezowych została odwzorowana głównie na podstawie warunków początkowych. Powyższe problemy oraz niepewność danych wejściowych do modelu (rozkład stężeń początkowych Mg^{2+} w wodach podziemnych określono na podstawie dyskretnej znajomości systemu) każą traktować wyniki obliczeń z dużą ostrożnością. Niemniej w analizowanym przypadku obliczone stężenia jonu Mg^{2+} wykazują dobrą korelację z wartościami pomierzonymi w terenie.

Przeprowadzone badania modelowe pozwoliły na uszczegółowienie opisu wpływu składowiska odpadów komunalnych w Otwocku na wody podziemne. Sposób posadowienia składowiska oraz całkowity brak izolacji odpadów od podłoża powodują przenikanie zanieczyszczeń do wód podziemnych. Dobra wodoprzepuszczalność badanego ośrodka sprawia, że stanowi on środowisko dla łatwej migracji substancji rozpuszczonych w wodach podziemnych. Strefa zanieczyszczeń ma niewielki zasięg, o czym decydują warunki hydrodynamiczne. Jak wynika z obliczeń modelowych, warunki te kształtowane są głównie przez dynamikę stanów wód Wisły i Świdra. Rzeki te przez przeważającą część roku stanowią bazę drenażu dla lokalnego i regionalnego przepływu wód podziemnych. W konsekwencji zanieczyszczenia migrują wraz z wodami podziemnymi od składowiska do koryta Świdra. Drenujący charakter tej rzeki sprawia, że stanowi ona barierę dla dalszego rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w wodach podziemnych. Potwierdzają to wyniki opróbowania wykonane w profilu pionowym techniką PowerProbe. Badania prowadzone na odcinku między krawędzią składowiska a Świdrem (punkty GP 24 i GP 11) wykazały obecność substancji zanieczyszczających w całym przedziale głębokościowym opróbowania (3,0–14,0 m p.p.t.). Tymczasem w punkcie zlokalizowanym przy korycie Świdra (GP 12) występowanie wód zanieczyszczonych stwierdzono tylko do głębokości 12 m p.p.t., a parametry fizykochemiczne próbki wody pobranej z głębokości 14 m p.p.t. nie odbiegały od parametrów wód podziemnych spoza strefy oddziaływania składowiska. Wskazuje to na całkowity drenaż wód zanieczyszczonych przez rzekę Świder. Analogiczny przebieg drogi migracji uzyskano na podstawie obliczeń modelowych. Chmura zanieczyszczeń w badanej warstwie stabilizuje się obecnie między składowiskiem a korytem Świdra. W obrębie plamy rejestrowane są zmiany stężeń poszczególnych składników w czasie. W trakcie wyżówek zwierciadło wznosi się powyżej stopy składowiska, co prowadzi do czasowego wzrostu stężeń substancji rozpuszczonych w wodach podziemnych. Odwzorowanie tego procesu było możliwe dzięki zastosowaniu wewnętrznego warunku brzegowego wzdłuż krawędzi składowiska.

W przedstawionym przykładzie obliczeń transportu masy zaprezentowano podstawowe problemy związane z tworzeniem modeli numerycznych. Schematy postępowania dotyczące opisu adwekcji, dyspersji hydrodynamicznej oraz oddziaływań sorpcyjnych wynikały ze stanu rozpoznania systemu. Znajomość przestrzennego rozkładu parametrów charakteryzujących przebieg tych procesów jedynie w dyskretnych punktach warstwy wymagała przyjęcia szeregu założeń dotyczących niejednorodności systemu oraz opisujących relacje między modelowanym obszarem a jego otoczeniem. W konsekwencji, tworząc model konceptualny, dokonano schematyzacji procesu transportu masy w badanym systemie. Opracowany model stanowi zatem uproszczenie rze-

czywistego przebiegu badanego procesu, a uzyskane rozwiązanie należy uważać za jego numeryczne przybliżenie. Wskaźnikiem jakości tego przybliżenia są małe różnice między wynikami obliczeń a danymi empirycznymi.

Opisane procedury wyznaczania warunków brzegowych i początkowych modelu oraz sposoby specyfikacji niejednorodności systemu mogą stanowić wzorzec postępowania przy tworzeniu numerycznych modeli transportu masy. Należy jednak zaznaczyć, że przedstawione rozwiązania mają charakter przykładowy, a zakres procedur możliwych do zastosowania jest znacznie szerszy. W praktyce dobór odpowiednich procedur numerycznych powinien być uwarunkowany stopniem rozpoznania systemu oraz wynikać z przyjętego modelu conceptualnego. Prawidłowo wykonany i wykalibrowany model stanowi narzędzie pomocne do zrozumienia przebiegu procesu transportu masy w czasie i przestrzeni, a po weryfikacji może posłużyć także do wykonania prognoz.