## 1.BEVEZETÉS

Dolgozatomban két aktuális problémakör, a környezetvédelem és a számítógépes modellezés területe egy közös metszetének, a transzportmodellezésnek minél sokrétűbb bemutatására törekszem.

A transzportmodellezés a szennyezőanyagok idő- és térbeli terjedésének számításokkal történő követését jelenti. Mindez feltételezi, hogy léteznek a természetben olyan források, amelyekből a szennyezőanyagok a víztartó rétegekbe juthatnak. Ilyen potenciális források lehetnek például a környezetüktől nem megfelelően izolált kommunális és ipari hulladéktemetők, állattartó telepek, intenzív mezőgazdasági művelésbe fogott területek, szennyvíztároló medencék, zagyterek, szénhidrogén tároló és fejtő telepek, üzemanyagtöltő állomások stb.. Tekintettel a források sokféleségére, a természetbe jutó anyagok tulajdonságai változatosak: lehetnek szerves vagy szervetlen vegyületek, a talajvízben jól vagy rosszul oldódó, nedvesítő vagy nem nedvesítő tulajdonságúak. A tulajdonságaik alapján ezen anyagok a víztartó képződményekbe jutva egy vagy többfázisú rendszert alkotnak, híg vizes vagy kolloid oldatként, szuszpenzióként, esetenként durva diszperz rendszert alkotva mozognak. Függően a víztartó anyagi minőségétől a közeg lehet pórózus (agyag, iszap, homok, kavics), vagy repedezett és/vagy kavernás (mészkő, dolomit kristályos kőzetek), esetleg lehet kettős porozitású (homokkő).

Mivel célunk a korábban említett anyagok mozgásának vizsgálata, éppen ezért szükséges elsőként az említett anyagok és a víz mozgásának kapcsolatát elemezni, majd a terjedés szivárgáshidraulikai alapokon nyugvó törvényszerűségeit feltárni. Repedezett és karsztos, valamint kettős porozitású képződmények esetén már a vizek szivárgási törvényszerűségeinek megadása is problémát jelent, hiszen a képződményekben sokszor ismeretlen helyen található, ismeretlen méretű diszkontinuitások (kavernák, üregek, vetőrendszerek) határozzák meg a víz útját és szivárgási sebességét. Éppen ezért repedezett tárolók, mint például a karsztvíztárolók esetén elfogadható eredményeket csak hegység méretű kőzettestek (Bükk, Gerecse, Bakony stb) vizsgálata esetén kapunk. Mindez egyben azt is jelenti, hogy a víz mozgása által befolyásolt, de nem meghatározott szennyezőanyag-terjedést karsztos és repedezett kőzettestekben még kevésbé pontosan lehet szimulálni, ezért ezek tárgyalásától dolgozatomban eltekintettem, vizsgálataimat kizárólagosan porózus rendszerekre korlátozva.

A szennyezőanyag terjedési törvényszerűségei - melynek matematikai megfogalmazása az általános transzport-egyenlet - legpontosabban vizben oldható, úgynevezett konzervatív szennyezőanyagok, azaz egy folyadékfázissal jellemezhető rendszerek esetén határozhatók meg, melyeket a 2. fejezetben részletezek. Nem konzervatív szennyezőanyagok esetén a leírt összefüggések ugyan módosulnak, azonban - mivel a szennnyeződés mozgási sebessége kisebb - gyakran a

biztonság javára való tévedés mellett a konzervatív szennyezőanyagokra vonatkozó összefüggések alkalmazásával is megelégszünk.

Ilyen módon tehát ismeretes a szennyezőforrás helye, a szennyezés intenzitása, a porózus közeg és tulajdonságai, valamint a terjedést meghatározó törvényszerűségek és keressük a koncentráció értékeit a rendszer különböző helyein tetszőlegesen meghatározott időpontokban. Feladatunk tehát a transzport-egyenlet megoldása a hely és az idő függvényében.

A megoldás egyszerű, erősen egyszerűsített és általános esetekben történhet a terjedést leíró differenciálegyenlet közvetlen, analitikus megoldásával. Ilyen esetben valamilyen szimmetrikus esetet kell feltételezni, minden közeg- és anyagtulajdonságra homogén teret tételezve fel. Mivel ez az egyszerűsítés a gyakorlatban sokszor nem engedhető meg, ezért az egyenlet megoldását közelítő numerikus módszerekkel végezzük el. Ilyen numerikus megoldások alkalmazása esetén a vizsgált térrész lehatárolása után tetszőleges számú, általában síkokkal határolt, homogén elemi térrészt különíthetünk el, mellyel a valóságban inhomogén tér változásait közelítő módon követni lehet. A numerikus módszerekkel végső soron a differenciálegyenlet megoldását egy sokismeretlenes egyenletrendszer megoldására vezetjük vissza. A megoldási lehetőségeket röviden a 3. fejezetben ismertetem.

A numerikus modellek kialakításánál a legnagyobb problémát a vizsgált térnek a földtani és vízföldtani viszonyoknak megfelelő, ugyanakkor a numerikus megoldás által is megengedett alakú és számú elemre bontása, majd a kialakított elemi térrészek tulajdonságainak megadása. Mivel az anyagi tulajdonságok többnyire csak néhány pontban (fúrásban, kutatóárokban, tárban, aknában stb.) ismertek, ugyanakkor az említett sokismeretlenes egyenletrendszer megoldásához az összes elemi térrész jellemzésére van szükség a meglévő, sokszor hiányos ismeretrendszer alapján.

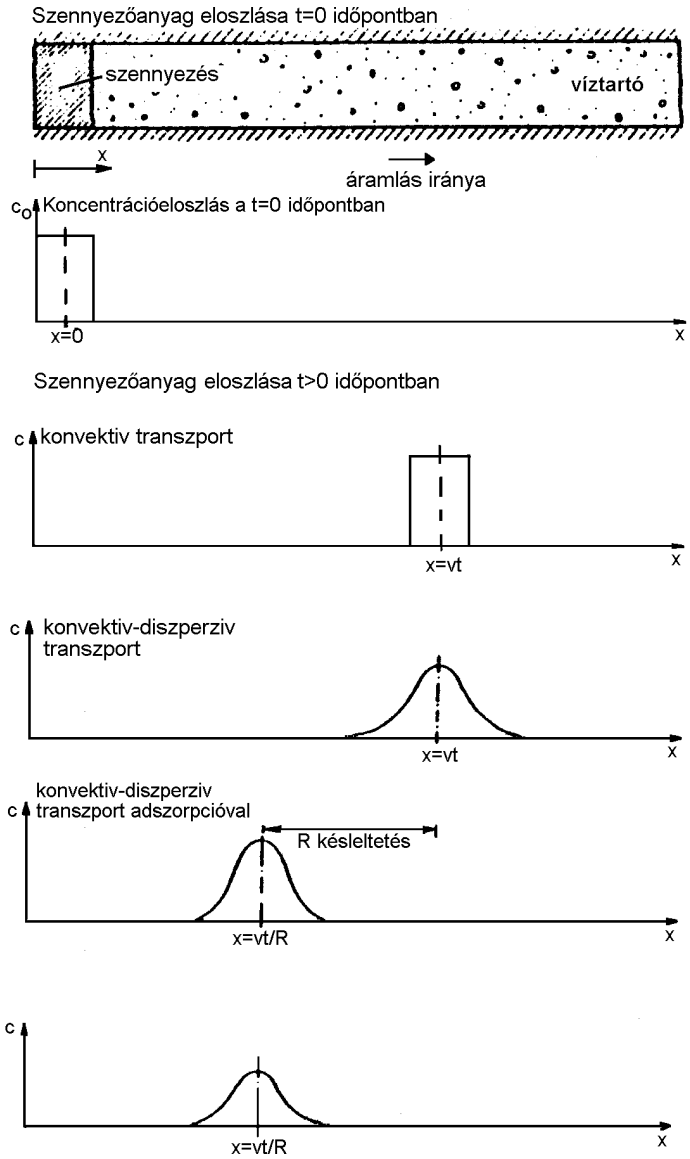
Meghatározva az anyagi tulajdonságokat a szennyezés-terjedési számítások megkezdhetők. Az azonban természetes, hogy a kialakított numerikus modell és a valóság között kisebb nagyobb eltérések vannak, ami a modell hibája. Célunk ezért az említett hiba csökkentése. Mindezt ismert folyamatok követésével tehetjük meg, azaz a számításokkal kapott koncentrációértékek időbeli változását - az egyenletrendszer paramétereinek változtatásával- a valóságban észlelt koncentrációváltozásokhoz közelítjük, amely folyamatot a modell kalibrálásának nevezünk. Nem feledkezhetünk meg arról sem, hogy pusztán matematikai szempontból a megoldandó egyenletrendszer akárcsak egyetlen paraméterének megváltoztatása is egy teljesen új matematikai problémát jelent, ami például olyan következményekkel járhat, hogy a kalibrálás során módosított egyenletrendszernek valós megoldása nem lesz. Éppen ezért szükséges a numerikus megoldások matematikai hibáinak ismerete, elemzése és lehetőség szerinti kiszűrése. Az említett problémákkal, tehát az adatbázis összeállításával, a modellkalibrációval a 4. fejezetben foglalkozom.

Megismerve a transzport-egyenletet, annak megoldási lehetőségeit, valamint a numerikus megoldások segítségével kapható matematikai modellek kialakításának módját, az 5. fejezetben, néhány jellegzetes példán keresztül mutatom be az alkalmazás lehetőségeit, különös tekintettel a környezetvédelem területén történő alkalmazásokra.

Dolgozatom célja a felsorolt modelltípusok közül a szennyezőanyag-terjedési modellek és a hozzájuk kapcsolódó szivárgáshidraulikai modellek elméleti és matematikai vonatkozásainak átfogó bemutatása. Tekintettel arra, hogy a gyakorlati tapasztalatok szerint az említett modellszámítások eredményeit jelentős hibák terhel(het)ik, célom továbbá, hogy a hibák kialakulásának jellemző vonásait részletesen bemutassam, a modell-paraméterek okozta hibákat kritikai elemzésnek vessem alá. Az egész dolgozatban törekszem a nemzetközi és hazai szakirodalomban olvasott tapasztalatok összegzésére, azoknak összevetésére saját tapasztalataimmal és végül saját vizsgálataim eredményeinek összefoglalására. Célom továbbá az említett modellek alkalmazási lehetőségeinek és korlátainak felvázolása néhány esettanulmány bemutatásán keresztül.

## 2. SZENNYEZŐANYAGOK TERJEDÉSÉNEK TÖRVÉNYSZERŰSÉGEI PORÓZUS KÖZEGBEN

A vízben oldható szennyezőanyagok terjedését két alapvető folyamat határozza meg: egyfelől a konvekció (advekció), amely a fizikailag vagy kémiailag oldott anyagok pórusokban való tömeges áramlását; másfelől a diszperzió, amely a szennyezőanyag térbeli szóródását jelenti. A szóródást kémiai illetve fizikai folyamatok okozhatják. Eredete részben a diffúzióra, amely a különböző töménységű, sűrűségű oldatok között a részecskéknek a különbség kiegyenlítődéséig tartó mozgása, részben a szivárgási sebesség lokális eltérései következtében kialakuló mechanikai diszperzióra vezethető vissza. A két alapvető folyamaton kívül további fizikai és kémiai folyamatok az oldat áramlásának késleltetéséhez, valamint a szennyezőanyag lebomlásához, degradációjához vezethetnek.(2.1.ábra)




2.1. ábra: A transzportfolyamatok jellegzetes elemei (Kinzelbach[1], 1986)

### 2.1. A kémiai anyagmérleg

Az oldott anyag transzport-folyamatainak következtében kialakuló szennyezőanyag-koncentráció időbeli változását a konvekció, a diszperzió, az adszorpció és a degradáció (bomlás) mértéke határozza meg.

Tekintsük a porózus közeg egy elemi kockáját x, y, z koordinátarendszerben úgy, hogy annak oldalai merőlegesek a koordináta tengelyekre. Legyenek a térbeli szennyezőanyag-áramot leíró fluxusvektor komponensei $F_x$, $F_y$ és $F_z$. A kémiai anyagmérleget figyelembe véve az elemi kockában tárolt anyagmennyiség időbeli megváltozásának egyenlőnek kell lennie az elemi kockába - időegység alatt - be- és kilépő fluxusok előjeles összegével.

Az elemi térfogatba belépő anyagfluxusok:

$$F_{be} = F_x + F_y + F_z \tag{2.1.1}$$

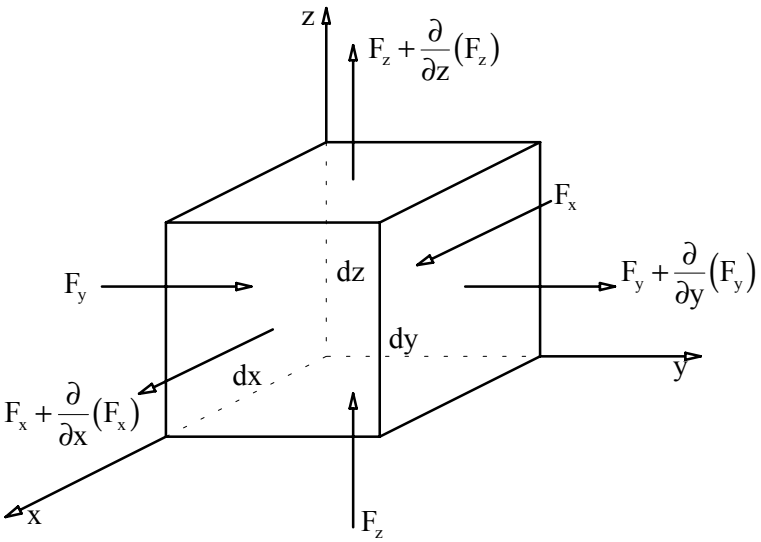
Az elemi térfogatot elhagyó anyagfluxusok:

$$F_{ki} = -\left( F_x + \frac{\partial}{\partial x} F_x + F_y + \frac{\partial}{\partial y} F_y + F_z + \frac{\partial}{\partial z} F_z \right) \tag{2.1.2}$$

Míg az elemi kockában tárolt anyagmennyiség változását a belépő és kilépő fluxusok különbsége határozza meg (2.2.ábra):

$$\frac{dM}{dt} = \left[ F_x - \left( F_x + \frac{\partial}{\partial x} F_x \right) \right] dydz + \left[ F_y - \left( F_y + \frac{\partial}{\partial y} F_y \right) \right] dxdz + \left[ F_z - \left( F_z + \frac{\partial}{\partial z} F_z \right) \right] dxdy \text{, azaz}$$

$$\frac{dM}{dt} = \frac{\partial}{\partial x}(F_x) dydz + \frac{\partial}{\partial y}(F_y) dxdz + \frac{\partial}{\partial z}(F_z) dxdy \tag{2.1.3}$$




2.2. ábra: Az elemi térrész szennyezőanyag-mérlege

## 2.2. A transzportfolyamat elemei

Porózus közegben a kémiai anyagáramlás fő komponensei a konvektív anyagáramok, valamint a diffúzió és a mechanikai diszperzió következtében kialakuló anyagtranszport. Az oldott fázisban maradó anyag mennyiségét ezen felül még további folyamatok, a felületi adszorpció és a kémiai vagy radioaktív bomlás befolyásolja.

A valós anyagmérleget tovább módosíthatják a reverzibilis és irreverzibilis kémiai folyamatok következtében mobilizálódó vagy lekötődő anyagmennyiségek, amelyeket napjaink transzport-modelljei általában figyelmen kívül hagynak, mivel ezeknek a jelenségeknek a számításokkal való követése bonyolult és a hidraulikai eseményekkel közvetlen kapcsolatban sincsenek. A kémiai folyamatok pontos követésére a nemzetközi szakirodalomban csupán néhány próbálkozás található, amelyeket részletesebben a 4.2.4.2. alfejezetben mutatok be.

### *2.2.1. Az advektiv (konvektív) anyagáramok*

Az oldott anyagok vízzel való együttes tömeges áramlását - a hőtanból átvéve kissé helytelenül - konvekciónak, vagy helyesebben advekciónak nevezzük. (Konvekció: hőmérsékleti különbségek hatására létrejövő mozgási folyamat; Advekció: a potenciális (és a hőt kizáró) erőtér által létrejött mozgási folyamat[2]). A konvektív szennyezőanyag-áram tehát a közegbeli v átlagos áramlási sebesség és a C koncentráció szorzata, azaz:

$$F_{x,konv.} = \frac{dM_{x1}}{dydzdt} = v_x C, \quad F_{y,konv.} = \frac{dM_{y1}}{dxdzdt} = v_y C, \quad F_{z,konv..} = \frac{dM_{z1}}{dxdydt} = v_z C, \qquad (2.2.1)$$

ahol M a szennyezőanyag kémiai mennyisége és t az eltelt idő.

### *2.2.2. A diffúzió*

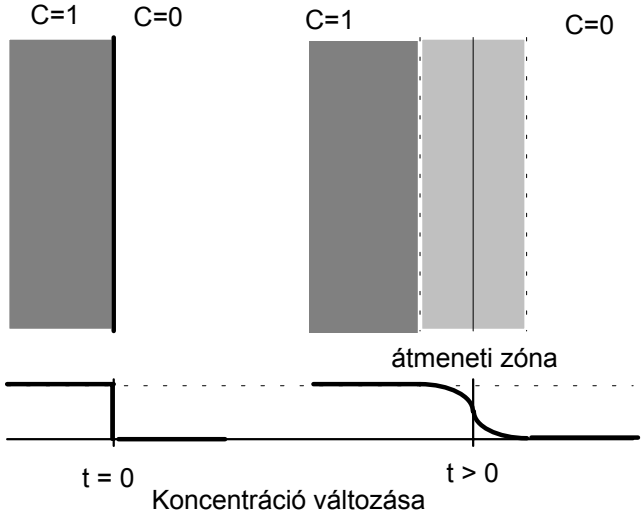
A térbeli kémiai potenciál-különbségek hatására létrejövő tömegáramot, melyet a Fick I. törvénye ír le, diffúziónak nevezzük. A koncentráció-különbségek hatására létrejövő diffúziót közönséges diffúziónak (2.3.ábra), míg az elektromos potenciál- vagy hőmérséklet-különbségek okozta anyagáramokat kényszerdiffúziónak nevezzük.[3]

A Fick I. törvény értelmében a diffúzió által szállított kémiai anyagfluxus három komponense az alábbi formában írható fel:

$$F_{x,diff.} = \frac{dM_{x2}}{dydzdt} = -D_{eff}\frac{\partial C}{\partial x}, \quad F_{y,diff} = \frac{dM_{y2}}{dxdzdt} = -D_{eff}\frac{\partial C}{\partial y}, \quad F_{z,diff} = \frac{dM_{z2}}{dxdydt} = -D_{eff}\frac{\partial C}{\partial z} \qquad (2.2.2)$$

ahol $D_{eff}$ az effektív (vagy látszólagos) diffúzió-állandó, amelynek értéke porózus közegben kisebb, mint a $D_0$ vizes közegben mért diffúzió-állandó.

A vízben mért és a porózus közegbeli diffúzió-állandó közötti kapcsolatra számos empirikus összefüggést határoztak meg, melyeket Shackelford és Daniel[4] nyomán a 2.1.táblázat mutat be.




2.3. ábra: A közönséges diffúzió folyamata (Bear-Verruijt[5], 1987)

Mint azt az említett táblázat mutatja, valamennyi szerző szerint az effektív diffúzió-állandó egyenesen arányos a vizes oldatban mért diffúzió-álladóval és fordítottan a tortuozitással. A tortuozitás értéke porózus közegben általában 1,25 és 5 között változik a szemcseméret-eloszás és a szemcsék érintkezésének módja függvényében. Különböző, elsősorban a hulladéklerakók aljzatszigetelésénél alkalmazott anyagokra laboratóriumban meghatározott tortuozitás-értékekkel rendelkezünk, amelyeket „A transzportszámítások gyakorlati alkalmazásai” című fejezetben mutatunk be. Tömény oldatok, valamint viszkózus anyagok esetén az adszorpció mértékét meghatározó negatív adszorpciós tényező, valamint a viszkozitási faktor tovább csökkenti az effektív diffúzió-állandó értékét.

Minthogy az effektív diszperzió-állandót csak a felsorolt, nagy bizonytalansággal terhelt szorzótényezők ismeretében lehet meghatározni, a transzportmodellek a szennyezőanyagok szóródását általában – a későbbiekben részletesen bemutatásra kerülő – ú.n. transzverzális és longitudinális diszperzivitási értékekből számítják.

A transzportmodellezési gyakorlatban az effektív diszperzió-állandót a legegyszerűbb Gillham-féle formulával szokás meghatározni. Ez a megoldás azonban csak kisméretű – általában laboratóriumi kísérletek követésére használt – modell-számítások esetén elfogadható, ahol a 2.2.3. alfejezetben részletezett mechanikai diszperzió, illetve különösen a makrodiszperzió hatása elhanyagolható.

2.1. táblázat: Az effektív diffúzió-állandó meghatározása néhány szerző szerint:

| **Képlet** | **Szerző** |
|---|---|
| $D_{eff} = D_0 / \tau$ | Gillham et al.(1984)[6], Barone et. al.(1990)[7] |
| $D_{eff} = D_0 \cdot \alpha / \tau$ | Li és Gregory (1974)[8] |
| $D_{eff} = D_0 \Theta / \tau$ | Berner (1971)[9], Drever (1982)[10] |
| $D_{eff} = D_0 \Theta \alpha \gamma / \tau$ | Kemper et al.(1964)[11], Olsen és Kemper (1968)[12], Nye (1979)[13] |
| $D_{eff} = D_0 \gamma / \tau$ | Porter et al.(1960)[14] |
| $D_{eff} = D_0 \Theta \alpha / \tau$ | van Schaik és Kemper (1966)[15] |
| $D_{eff} = D_0 \cdot \frac{1}{\tau(1+K_d)}$ | Filep (1988)[16] Fried és Combarnous (1971)[17] alapján |
| $D_{eff} = D_0 \cdot \frac{\Theta}{\tau^2} = D_0 \cdot \frac{1}{F}$ | A tárolómérnöki gyakorlatban alkalmazott formula, ahol F a formációs ellenállási tényező |

ahol:

$D_0$ a vizes oldatban mért diffúzió-állandó
$\theta$ a víztartalom térfogat %-ban, a fázisos összetétel v jelzőszáma
$\tau$ a tortuozitás (labirintus-faktor, tekervényesség)
$\gamma$ a negatív adszorpciós szorzótényező ($\leq 1$)
$\alpha$ a viszkozitási faktor ($\leq 1$)
$K_d$ a megoszlási együttható

A $D_0$ értékét néhány ion híg vizes oldatára vonatkozóan, 25 °C hőmérsékleten, a 2.2. táblázatban foglaljuk össze, amelyet, Quigley és szerzőtársai[18] Lerman[19] nyomán adtak meg.

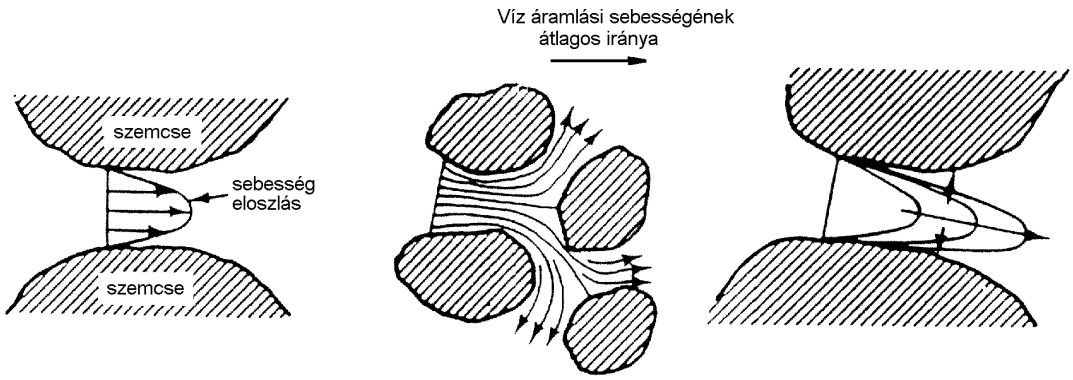
A diffúzió-állandó szigorú értelemben véve nem tekinthető állandónak, mivel értéke kis mértékben függ a koncentrációtól[20], és erősen függ a hőmérséklettől[21], hiszen – mint azt a laboratóriumi vizsgálatok bizonyították – értéke 5°C-on mintegy fele a 25 °C-on mért értékének. Filep[22] szerint az ionok effektív diffúziós együtthatóját befolyásolja továbbá a közeg nedvességtartalma, illetve a közeg szerkezete, pórusméret-eloszlása (illetve az ezektől függő labirintus-hatás).
Amennyiben a diffúzióállandó az adott szennyezőanyagra ismeretlen, akkor Kinzelbach[23] a $10^{-9}$ $m^2/s$ érték felvételét tartja ajánlatosnak.

2.2. táblázat: Néhány ion vizes oldatban mért diffúzió-állandója 25 °C-on

| Kation | $D_0$ (x $10^{-10}$ $m^2/s$) | Anion | $D_0$ (x $10^{-10}$ $m^2/s$) |
|---|---|---|---|
| H | 93,1 | OH | 52,7 |
| Li | 10,3 | Cl | 20,3 |
| Na | 13,3 | HS | 17,3 |
| K | 19,6 | $SO_4$ | 10,7 |
| $NH_4$ | 19,8 | $NO_2$ | 19,1 |
| Mg | 7,05 | $NO_3$ | 19,0 |
| Ca | 7,93 | $HCO_3$ | 11,8 |
| Mn | 6,88 | $CO_3$ | 9,55 |
| Fe | 7,19 | $PO_4$ | 6,12 |
| Cu | 7,33 | $CrO_4$ | 11,2 |
| Zn | 7,15 | | |
| Cd | 7,17 | | |
| Pb | 9,45 | | |

### *2.2.3. A mechanikai diszperzió*

A mechanikai diszperzió - egyes szerzők szerint hidraulikai diszperzió - jelenségét az áramlási sebesség nagyságának és irányának változása okozza a porózus közegen belül (2.4.ábra). A jelenséget valójában a hidromechanikai diszperzió név írja le a leghelyesebben, azonban ez az elnevezés nem honosodott meg a szakirodalomban.




2.4. ábra: A mechanikai diszperziót előidéző jelenségek (Bear-Verruijt[24], 1987)

A mechanikai diszperzió egy speciális esete az úgynevezett makrodiszperzió (2.5. ábra), amikor az egymástól eltérő hidraulikai tulajdonságokkal jellemezhető földtani képződményekben kialakuló egymástól eltérő áramlási sebességek okozzák a szennyezőanyag szóródását, diszperzióját[25]. Gyakorlati tapasztalatok szerint a makrodiszperzió abban az esetben válik dominánssá az egyéb mechanikai diszperziós folyamatok felett, amikor a modellezett területrész horizontális kiterjedése meghaladja a 10÷50 métert[26]. Homogénnek tekinthető képződmények, mint pl. a nyírségi és az alföldi finom- és középszemcsés homokok esetén a nagyobb, 50 m-es érték, a szeszélyesen változó vastagságú, felszínközeli, nyomás alatti vizet tartalmazó homokrétegek esetén (pl. Szarvas[27] és Szeghalom[28] térsége) a 10 m körüli érték jellemző.

A mechanikai diszperzió által létrejött szennyezőanyag-áramok nagyságát az I. Fick törvény általánosításával lehet meghatározni:

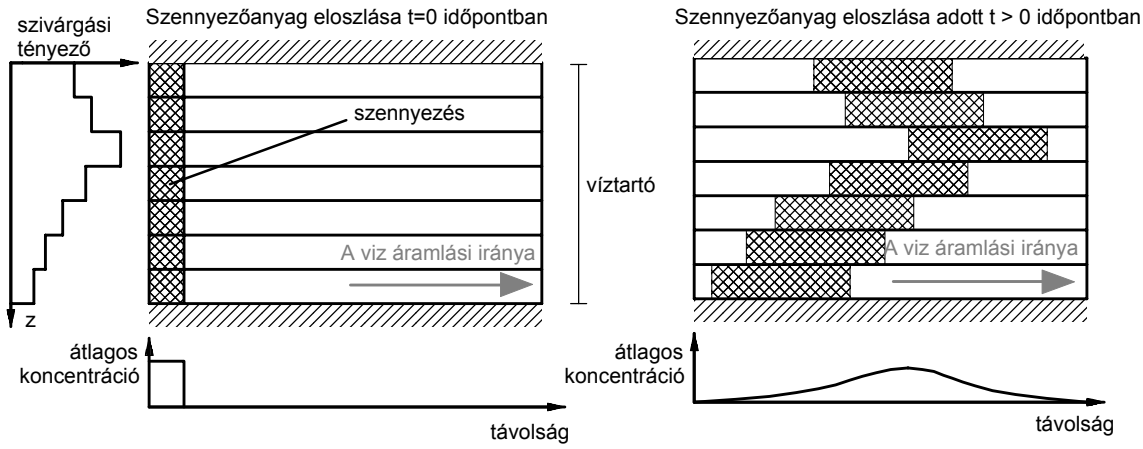
$$F_{x,Mech.diszp.} = \frac{dM_{x3}}{dydzdt} = -D_{xx}\frac{\partial}{\partial x}(\Theta C) - D_{xy}\frac{\partial}{\partial y}(\Theta C) - D_{xz}\frac{\partial}{\partial z}(\Theta C)$$

$$F_{y,Mech.diszp.} = \frac{dM_{y3}}{dxdzdt} = -D_{yx}\frac{\partial}{\partial x}(\Theta C) - D_{yy}\frac{\partial}{\partial y}(\Theta C) - D_{yz}\frac{\partial}{\partial z}(\Theta C) \qquad (2.2.3)$$

$$F_{z,Mech.diszp.} = \frac{dM_{z3}}{dxdydt} = -D_{zx}\frac{\partial}{\partial x}(\Theta C) - D_{zy}\frac{\partial}{\partial y}(\Theta C) - D_{zz}\frac{\partial}{\partial z}(\Theta C)$$

ahol $D_{xx}$, $D_{xy}$ ..., $D_{zz}$ a mechanikai diszperziós tényező, amelynek az értéke - a Darcy-törvényből meghatározott $v_x$, $v_y$ és $v_z$ sebességek felhasználásával - az alábbi pórusbeli áramlási sebességek segítségével adható meg:

$$\bar{v}_x = \frac{v_x}{\Theta}, \qquad \bar{v}_y = \frac{v_y}{\Theta}, \qquad \bar{v}_z = \frac{v_z}{\Theta} \qquad (2.2.4)$$




2.5. ábra: Szennyezőanyag makrodiszperziójának kialakulása (Kinzelbach[29], 1986)

Tekintettel arra, hogy a szennyezőanyag szóródásának mértéke egyenesen arányos víznek a közegbeli szivárgási sebességével, ezért mechanikai diszperziós tényezőt az említett szóródási arányszámok (az $\alpha_L$ longitudinális és $\alpha_T$ transzverzális diszperzivitás) felhasználásával - számíthatjuk[30]:

Egydimenziós esetben :

$$D_{xx} = D_x = \alpha_L \bar{v}_x \qquad (2.2.5)$$

Kétdimenziós esetben:

$$D_{xx} = \frac{\alpha_T \bar{v}_y^2 + \alpha_L \bar{v}_x^2}{\sqrt{\bar{v}_x^2 + \bar{v}_y^2}}, \; D_{yy} = \frac{\alpha_T \bar{v}_x^2 + \alpha_L \bar{v}_y^2}{\sqrt{\bar{v}_x^2 + \bar{v}_y^2}}, \; D_{xy} = D_{yx} = \frac{(\alpha_L - \alpha_T)\bar{v}_x \bar{v}_y}{\sqrt{\bar{v}_x^2 + \bar{v}_y^2}} \qquad (2.2.6)$$

Háromdimenziós esetben:

$$D_{xx} = \frac{\alpha_T(\bar{v}_y^2 + \bar{v}_z^2) + \alpha_L \bar{v}_x^2}{\sqrt{\bar{v}_x^2 + \bar{v}_y^2 + \bar{v}_z^2}} \qquad D_{yy} = \frac{\alpha_T(\bar{v}_x^2 + \bar{v}_z^2) + \alpha_L \bar{v}_y^2}{\sqrt{\bar{v}_x^2 + \bar{v}_y^2 + \bar{v}_z^2}}$$

$$D_{zz} = \frac{\alpha_T(\bar{v}_x^2 + \bar{v}_y^2) + \alpha_L \bar{v}_z^2}{\sqrt{\bar{v}_x^2 + \bar{v}_y^2 + \bar{v}_z^2}} \qquad D_{xy} = D_{yx} = \frac{(\alpha_L - \alpha_T)\bar{v}_x \bar{v}_y}{\sqrt{\bar{v}_x^2 + \bar{v}_y^2 + \bar{v}_z^2}} \qquad (2.2.7)$$

$$D_{xz} = D_{zx} = \frac{(\alpha_L - \alpha_T)\bar{v}_x \bar{v}_z}{\sqrt{\bar{v}_x^2 + \bar{v}_y^2 + \bar{v}_z^2}} \qquad D_{yz} = D_{zy} = \frac{(\alpha_L - \alpha_T)\bar{v}_y \bar{v}_z}{\sqrt{\bar{v}_x^2 + \bar{v}_y^2 + \bar{v}_z^2}}$$

Amennyiben egy vízadóban a víz szivárgása x irányú, a korábban felírt fluxus egyenletek az alábbi formára egyszerűsödnek:

$$F_{x,Mech.diszp.} = \frac{dM_{x3}}{dydzdt} = -D_x \frac{\partial}{\partial x}(\Theta C),\ F_{y,Mech.diszp.} = \frac{dM_{y3}}{dxdzdt} = -D_y \frac{\partial}{\partial y}(\Theta C)$$

$$F_{z,Mech.diszp.} = \frac{dM_{z3}}{dxdydt} = -D_z \frac{\partial}{\partial z}(\Theta C),\ \text{ahol}\ D_x = \alpha_L v_x, D_y = \alpha_T v_x, D_z = \alpha_T v_x \qquad (2.2.8)$$

Ebben az esetben a konvektív-diszperzív transzport egyenlet az alábbi formában írható fel:

$$\frac{dM}{dVdt} = -\frac{\partial}{\partial x}(v_x C) + D_x \frac{\partial^2}{\partial x^2}(\Theta C) + D_y \frac{\partial^2}{\partial y^2}(\Theta C) + D_z \frac{\partial^2}{\partial z^2}(\Theta C) \qquad (2.2.9)$$

Az egyenlet alakja általános irányú áramlást feltételezve:

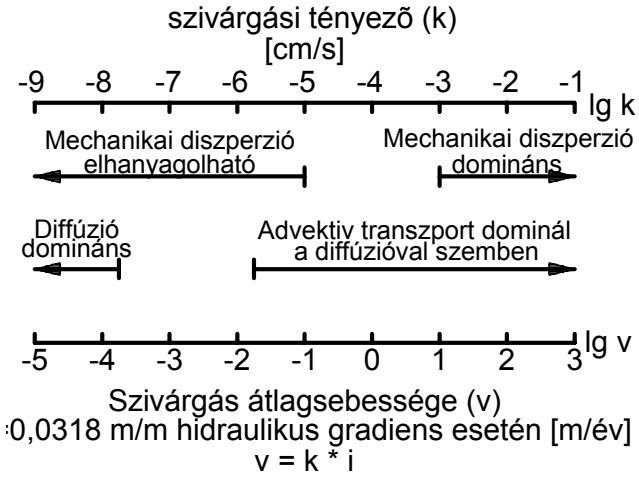
$$\frac{dM}{dVdt} = -\frac{\partial}{\partial x}(v_x C) - \frac{\partial}{\partial y}(v_y C) - \frac{\partial}{\partial z}(v_z C) + D_{xx}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\Theta C) + D_{xy}\frac{\partial^2}{\partial x \partial y}(\Theta C) + D_{xz}\frac{\partial^2}{\partial x \partial z}(\Theta C)$$
$$+ D_{yx}\frac{\partial^2}{\partial y \partial x}(\Theta C) + D_y \frac{\partial^2}{\partial y^2}(\Theta C) + D_{yz}\frac{\partial^2}{\partial y \partial z}(\Theta C) + D_{zx}\frac{\partial^2}{\partial z \partial x}(\Theta C) + D_{zy}\frac{\partial^2}{\partial z \partial y}(\Theta C) + D_z \frac{\partial^2}{\partial z^2}(\Theta C) \qquad (2.2.10)$$

A fenti egyenletek alapján látható, hogy a diszperzív szennyezőanyag-fluxusok számításához szükséges a diszperziós tényező vagy a diszperzivitás értékeinek meghatározása. Miután a szennyezőanyagok szóródási jellemzőinek meghatározása a transzport-modellezés során elkövetett hibák egyik legfontosabb forrása, ezért bármilyen módszerrel történjék is a diszperziós jellemzők meghatározása, célszerű azokat a modell-számítások kalibrálásakor vagy az analitikus számítások folyamán ellenőrizni.

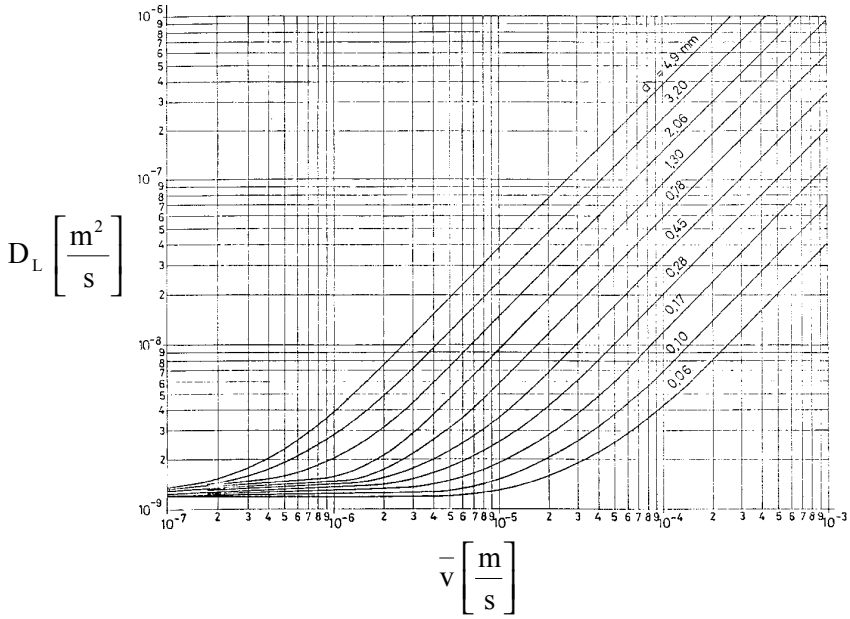
Perkins és Johnston[31] a mechanikai diszperziós tényező laboratóriumi vizsgálatai során a $D_{Mech.diszp.} = 1{,}75 \cdot d \cdot v$ tapasztalati összefüggést állapították meg, ahol d a közegre jellemző mértékadó szemcseátmérő [m], v a szivárgás átlagos sebessége [m/s]. A képlet összhangban van azzal a ténnyel, hogy alacsony szivárgási sebesség esetén a mechanikai diszperzió elhanyagolhatóan kicsi lehet.[32] (2.6. ábra) Saját tapasztalataim szerint az így meghatározott mechanikai diffúziós együttható 50-100 m kiterjedésű szennyezések esetén túlságosan kicsi, csak kis méretű térrészek, úgymint pl. laboratóriumi kisminta-kísérletek vizsgálata esetén vezet megfelelő eredményhez.

A D diszperziós tényezőt a Vízügyi Műszaki Segédlet[33] nomogramok alapján javasolja meghatározni. A feltételezett hidraulikai helyzetben az egy- vagy kétdimenziós áramlási térben az áramlás iránya megegyezik az x koordináta tengellyel, így a szennyezőanyag szóródását csak a $D_L$ longitudinális és $D_T$ transzverzális diszperziós tényező (vagyis a $D_x$ és $D_y$ tényezők) határozzák meg. A logitudinális diszperziós tényezőt a pórusbeli áramlási sebesség és a d mértékadó szemcseátmérő függvényében nomogramról (2.7.ábra) olvashatjuk le, $1{,}8 \cdot 10^{-9}$ $m^2/s$ molekuláris diffúzióállandójú anyagra (híg NaCl oldat). A leolvasáshoz szükséges mértékadó szemcseátmérőt a talaj szemcseeloszlásától függően kell meghatározni:

$$U \leq 5 \quad \Rightarrow \quad d = d_{50}$$
$$5 < U \leq 10 \quad \Rightarrow \quad d = d_{85}$$
$$U > 10 \quad \Rightarrow \quad d = K \cdot d_{50} \qquad U \approx 10 \Rightarrow K = 2, \;\; U \approx 20 \Rightarrow K = 2$$



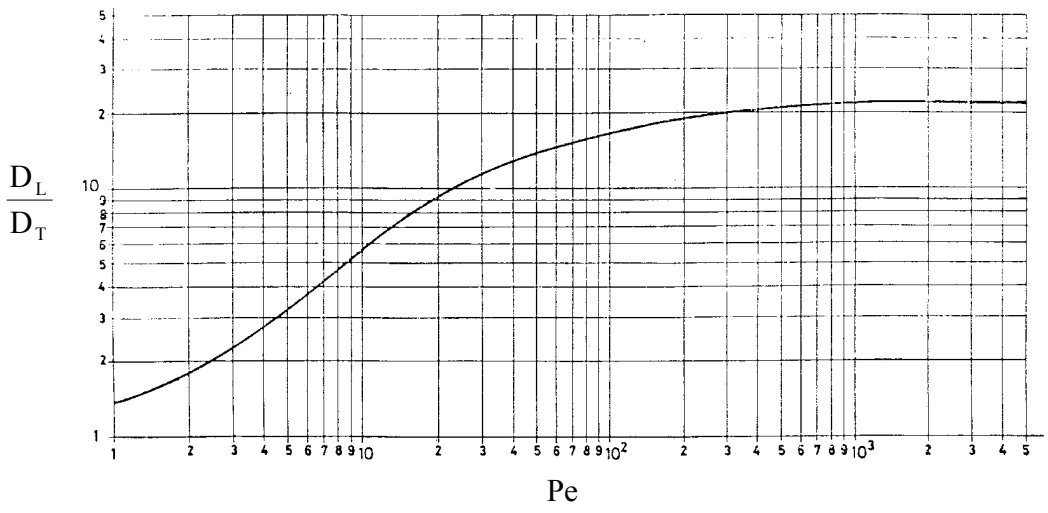

2.6. ábra: A konvektív transzport, a diffúzió és a mechanikai diszperzió okozta anyagáramok összevetése a szivárgási sebesség (szivárgási tényező) függvényében (Rowe, 1987)




2.7.ábra: A longitudinális diszperziós tényező értékei a pórussebesség függvényében (VMS 299-83)

Mivel a longitudinális diszperziós tényező nagysága egyenesen arányos a molekuláris diffúzió állandóval, így a nomogramból leolvasott $D_L$ diszperziós tényező értéke minden további, ismert molekuláris diffúzióállandójú anyagra átszámítható.

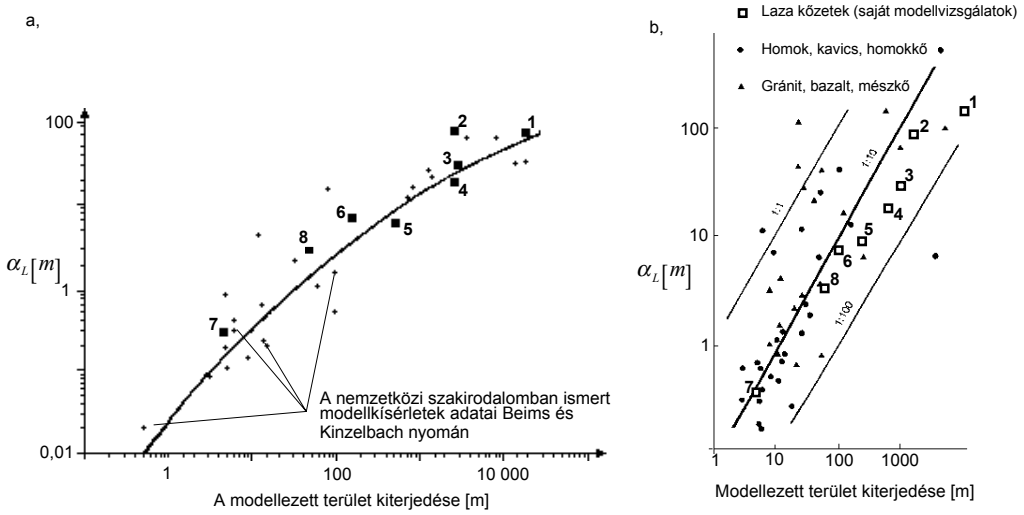
A transzverzális diszperziós tényező meghatározása $D_L$ értéke és a Peclet-szám (Pe) ismeretében történik (2.8.ábra). A Peclet-szám a konvektív és diszperzív-diffúziv tömegáramok arányát jellemzi. Amennyiben Pe értéke kicsi, a konvektív tömegáramok hatása elhanyagolható, a diffúzió és diszperzió okozta szóródás a domináns transzport-folyamat. Nagy Peclet-számok esetén a diffúzív-diszperzív anyagáramok hanyagolhatók el.[34]




2.8. ábra: A longitudinális és a transzverzális diszperziós tényező aránya a Peclet-szám függvényében (VMS 299-83)

Ebben az esetben a Peclet számot a $Pe = \frac{\bar{v} \cdot d_m}{D_M}$ összefüggéssel határozhatjuk meg, ahol $\bar{v}$ a pórusbeli szivárgási sebesség, $d_m$ a mértékadó szemcseátmérő és $D_M$ a molekuláris diffúzió-állandó.

Ez a számítási mód - hasonlóan a Perkins és Johnston-féle összefüggéshez - csak laboratóriumi méretű modellek esetén alkalmazható, ugyanis nagyobb térrészek esetén (pl. a földtani képződményekben) a szennyezőanyagok szóródásának domináns oka az eljárás során figyelmen kívül hagyott makrodiszperzió. Kinzelbach[35] - Beims[36] adatai alapján korrelációt mutatott ki a modellezett tér kiterjedése és a jellemző longitudinális diszperzivitás értékei között, amit saját, kalibrált modellszámításaim során alkalmazott diszperzivitás értékek is megerősítenek (2.9/a. ábra).




Saját modellvizsgálatok:

1. Borsodchem Rt. ammónium-szennyezése
2. NaCl szennyezés az Alföldön
3. BVM Budapesti telephelyeinek szennyezései
4. A Sajóládi Vízmű veszélyeztetettségi vizsgálata
5. BVM Garéi telepének klórbenzol-szennyezése
6. A 2.sz. Regionális Hulladékégetőmű szuhogyi lerakójának vizsgálata
7. Peremartoni Vegyipari Vállalat lerakójának ártalmatlanítása átdeponálással
8. A zsanai fúrási iszaptároló környezeti hatásvizsgálata

2.9. ábra: A longitudinális diszperziós tényező és a modellezett terület nagysága közötti összefüggés

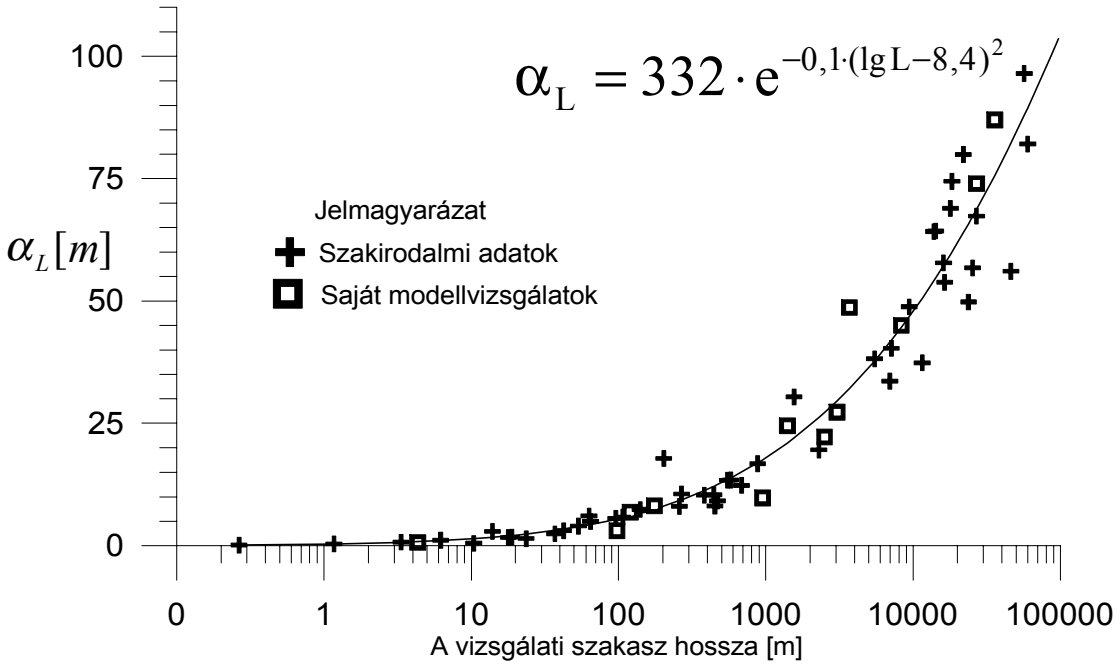
Hasonló eredményre jutott az amerikai Water Science and Technology Board of the National Research Council, amikor az Egyesült Államok Hadserege (US Army) felkérésére a modell-vizsgálatokat elemző, összegző jelentést készített a porózus és repedezett kőzettesteken kialakított számítási modellekről[37]. Vizsgálataik szerint a modellezett terület nagysága és a longitudinális diszperzivitás értéke között 10:1 arány jellemző. Ugyanakkor, mint az az ábráról látható, a korreláció szorossága a kis modellméretek esetén megfelelő, nagyobb modellek esetén egyre kevésbé. Ennek az az oka, hogy a longitudinális diszperzivitás és a modellméret közötti kapcsolat nem lineáris, nagyobb kőzettestek modellezése esetén az arányszám akár 100:1 is lehet. (2.9/b. ábra)

Tekintettel arra, hogy a bemutatott eljárásokkal számított longitudinális és transzverzális diszperzivitás értékek a gyakorlatban alulbecsültnek bizonyultak, így a nemzetközi szakirodalomban ismertetett, sikeres modellszámítások adatai alapján egy olyan empirikus összefüggést határoztam meg, amely már a makrodiszperzió hatását is magába foglalta.

Összesen 51 db a külföldi szakirodalomban található és további 12 saját, véges differencia módszert felhasználó, porózus közegben lejátszódó transzportfolyamatokat leíró transzportmodell diszpezivitási és geometriai jellemzőit gyűjtöttem össze, ahol a vízvezető képződmény homok, kavicsos homok volt. Nevezzük a továbbiakban vizsgálati szakasznak a vizsgált szennyezőanyag-terjedési folyamat által érintett térrésznek azon legnagyobb kiterjedését, amely egydimenziós vizsgálat esetében kitüntetett iránnyal párhuzamos, kétdimenziós vizsgálat esetén a vizsgált síkba eső, háromdimenziós vizsgálat esetén bármely egyenes mentén mérhető. Röviden a vizsgálati szakasz a számítások térdimenzióinak megfelelő legnagyobb kiterjedése a vizsgált folyamatnak. A továbbiakban a vizsgálati szakasz és a számítások során megfelelőnek talált longitudinális diszperzivitás értékek közötti összefüggést kerestük. Az adatgyűjtés kiterjedt az Ogata-Banks féle, néhány méteres oszlop-kísérletektől, a több mint 200-300 ezer km$^2$ nagyságú, amerikai Madison vagy Borden Aquifer-en végzett modellvizsgálatokig. A gyűjtött összesen 63 db, vizsgálati szakasz-longitudinális diszperzivitás értékpárra fektetett legjobban illeszkedő függvényt Gauss-féle közelítés alapján határoztam meg:

$$\alpha_L[m] = 332 \cdot e^{-0,1(\lg L[m]-8,4)^2} \qquad (2.2.11)$$

ahol L a modellezett térrész kiterjedése [m]




2.10. ábra: Empirikus összefüggés a vizsgálati szakasz hossza és a longitudinális diszperzivitás között

Az ábráról látható, hogy a kb. 10 m modell-méretig az $L/\alpha_L$ arány közel 10:1, mint azt a bemutatott amerikai és német szerzők is megállapították, később 100:1 fölé is növekedhet. Az eredmény a korábban bemutatott, Kinzelbach-féle grafikus összefüggésnél (2.9/a.ábra) az L< 5000 m tartományban nagyobb értékeket ad, ami jól egyezik gyakorlati tapasztalattal.

A molekuláris diffúzió és a mechanikai diszperzió jelenségét - egyes szerzők - együttesen hidrodinamikai diszperziónak nevezik.[38]

### *2.2.4. Az adszorpció*

Az adszorpció a szennyezőanyag porózus közeg felületén történő reverzibilis megkötődését jelenti. Ez a folyamat a modellezett tér anyagmérlegében hasonlóan viselkedik, mint egy időben állandóan változó forrás vagy nyelő, függően attól, hogy az adott koncentrációviszonyok között a megkötődés (adszorpció), vagy a szennyező anyag oldatba jutása (deszorpció) az uralkodó felületi kémiai folyamat.

Az adszorbeált és deszorbeált anyagmennyiségek egyensúlyát az alábbi matematikai egyenlőség írja le:

$$\Theta \cdot dV \frac{\partial C}{\partial t} = -\rho_b \cdot dV \frac{\partial \overline{C}}{\partial t} \qquad (2.2.12)$$

ahol C az pórusfolyadék koncentrációja, $\overline{C}$ a szennyezőanyag koncentrációja a talajban, $\rho_b$ a porózus közeg testsűrűsége és $\Theta$ a térfogatszázalékban kifejezett víztartalom (amely telített közegben egyenlő a hézagtérfogattal) és V a teljes vizsgált térfogat.

Ha a kémiai egyensúly kialakult, a megkötött anyag koncentrációja számítható:

$$\overline{C} = K_d C \qquad (2.2.13)$$

ahol $K_d$ az egyensúlyi folyamat megoszlási együtthatója.

A fentiek alapján a szorpciós folyamatok miatt egy adott V térfogatban a koncentrációváltozás miatt bekövetkező kémiai anyagmennyiség megváltozását a következő matematikai alakban írhatjuk le:

$$\frac{\partial M}{\partial t dV} = \frac{\partial (\Theta C)}{\partial t} = -\rho_b K_d \frac{\partial C}{\partial t} \qquad (2.2.14)$$

Ha feltételezzük, hogy az adszorbeált anyag mennyisége és a pórusfolyadék egyensúlyi koncentrációja egyenesen arányos egymással, azaz az adszorpció lineáris (Henry adszorpciós izoterma), akkor a $K_d$ megoszlási együttható (amennyiben eltekintünk a hőmérséklet-változástól) állandónak tekinthető. A gyakorlatban előforduló esetek egy részében (például nehézfémeknek az agyagásványokon való megkötődése esetén), ha az oldott anyag koncentrációja nagy, ezért az áramlás során erősen változik, ez a feltétel nem teljesül, azaz a pórusfolyadék egyensúlyi koncentrációja nem egyenesen arányos a megkötött anyagmennyiséggel. Ilyen esetben a megkötődő anyagok mennyiségét adszorpciós izotermák segítségével jellemezhetjük. A vizsgált komponensnek a pórusfolyadékban, illetve a megkötő felületen való megoszlási viszonyát kvázi-egyensúlyi helyzetben, állandó hőmérsékleten egy előre meghatározott koncentrációintervallumban mérjük. A kapott eredmények adják a szorpciós izoterma tapasztalati pontjait. Ezen pontokra adott matematikai formában felírható görbéket illesztünk, amelyek közül a gyakorlatban leggyakrabban a Freundlich és a Langmuir izotermákkal találkozhatunk. A Freundlich izotermák esetén az emelkedő koncentrációval exponenciálisan növekszik a megkötődő anyagmennyiség, azaz:

$$\overline{C} = A + K \cdot C^N \qquad (2.2.15)$$

ahol K a koncentrációtól függően változó megoszlási együttható, és A és N Freundlich-állandók.

A Langmuir izoterma esetében arra vagyunk tekintettel, hogy a megkötő felület véges és ezen meghatározott mennyiségű szorpcióra alkalmas belépési pont található. Éppen ezért a megkötődő anyagmennyiség egy $\overline{C}_{\max}$ telítési határértékhez közelít. Ebben az esetben a megkötött anyagmennyiség hiperbolikusan közelít ehhez a telítési határértékhez a koncentráció emelkedésével:

$$\overline{C} = \overline{C}_{\max} \cdot \frac{KC}{1+KC} \qquad (2.2.16)$$

ahol K állandó.

A Freundlich-izoterma elsősorban akkor írja le jellemzőbben a szorpciós folyamatokat, amikor uralkodóan egy ionkicserélődési folyamatról van szó, azaz a megkötött felületen nagy számban „A” ionok kötődtek meg, amelyek egy „B” ion koncentrációjának függvényében részben „B” ionokra cserélődnek ki. Ebben az esetben a koncentráció növekedésével fokozatosan nő a megkötött, "A"-ról „B”-re cserélt ionok száma, amit jól leír a Freundlich-izoterma folyamatosan emelkedő és nem határértékhez tartó görbéje. Ebben az esetben a nagymennyiségű ellenion miatt elhanyagoljuk a felületi koncentrációváltozást.

A Langmuir-izoterma inkább „üres” szorpciós helyek feltöltődése esetén alkalmazható vagy ha elhanyagoljuk a deszorbeált anyag koncentrációváltozását. Ekkor adott számú felületi megkötésre alkalmas hely létezik a rendszerben, amelyek a koncentráció növekedésével exponenciálisan fogyni kezdenek, amit jól követ a Langmuir-izoterma határértékhez közelítő jellege. A valóságban mindkét felvázolt folyamat a rendszerekben jelen van, ezért a két folyamat aránya határozza meg azt, hogy vajon melyik izoterma írja le jobban egy adott rendszer viselkedését.[39]

A nem lineáris adszorpció esetén a számítások a 2.2.14 egyenlet szerint történnek, ugyanakkor a $K_d$ megoszlási együttható helyett az adszorpciós izotermák alapján az aktuális koncentrációértéknek megfelelően számított $K_d'$ értéket kell időről időre változóan behelyettesíteni, amely megfelel az izoterma adott koncentráció értéknél vett deriváltjával.

Alkalmazhatjuk a korábban leírtakat egy kétfázisú rendszerre, ahol az anyagmennyiséget kívülről változtatjuk. A megoszlási együttható definíciószerűen $K_d = \frac{dC_{adszorbeált}}{dC_{oldott}} = \frac{dC_a}{dC_f}$, ezért az adszorbens koncentrációjának megváltozása elvileg $dC_a = K_d \cdot dC_f$. Tekintve egy V térrészt, amelyben nV a pórusok térfogata, így a megkötött és a pórusokban található anyagmennyiségek egyensúlya $V \cdot dC_a = -Vn \cdot K_d \cdot dC_f$, amennyiben az adszorbens koncentrációját a teljes térfogatra vetítjük. Feltételezve, hogy dM az a kémiai anyagmennyiség, amely egy adott idő alatt a rendszerbe jut és amelynek egy része megkötődik, egy másik része pedig folyadékfázisban marad, ezért $dM = V \cdot dC_a + nV \cdot dC_f$. Ebből a bevitt kémiai anyagmennyiség és a folyadékfázisra, illetve a teljes térfogatra vetített koncentrációváltozás kapcsolata: $dM = nVK_d^* \cdot dC_f + nV \cdot dC_f$, azaz $dM = nV \cdot dC_f\left(1+K_d^*\right)$ és $dM = V \cdot dC_a + nV \cdot \frac{dC_a}{nK_d^*}$, azaz $dM = V \cdot dC_a\left(1+\frac{1}{K_d^*}\right)$. Mivel a általában a megoszlási együtthatót mól/kg talaj vagy mg/kg talaj adszorbeált anyagmennyiségek mellett mg/dm$^3$ vagy mg/m$^3$ pórusfolyadék koncentrációk mellett adják meg, ugyanakkor a vizsgált rendszerben nem feltétlenül 1 kg adszorbens van jelen literenként vagy köbméterenként, ezért a megoszlási együtthatókat az adott rendszerre átszámítani szükséges. Ennek alapján $K_d^* = K_d \cdot \frac{\rho_n}{n}$ dimenziónélküli szám.

Ezeknek az egyenleteknek a felhasználása a számítások során azért előnyös, mert azt biztosítják, hogy az adszorbeált anyagmennyiség, és ezért a adszorbeált anyag koncentrációja az ad-

szorbensben az izoterma vízszinteshez közelítő szakaszán (Langmuir-izoterma) tovább már nem nő, ugyanakkor az is biztosított, hogy maximálisan akkora kémiai anyagmennyiség adszorbeálódhat, amennyit a folyadékfázis tartalmazott. Ez a később bemutatott numerikus számítások stabilizálásánál válik fontossá.

### *2.2.5. A bomlás*

A bomlási folyamatok a szennyezőanyag mennyiségének időbeli csökkenéséhez, degradációjához vezetnek. Bár a bomlás két alapvető típusa a kémiai bomlás és a radioaktív bomlás jellegében alapvetően különbözik egymástól, a szennyezőanyagok terjedésének modellezésekor mégis azonos formában vehetőek figyelembe, melynek algebrai alakja:

$$\frac{dM_4}{dVdt} = \frac{\partial(\Theta C)}{\partial t} = -\lambda(\Theta C + \rho_b K_d C) \qquad (2.2.18)$$

ahol $\lambda$ a bomlási állandó.

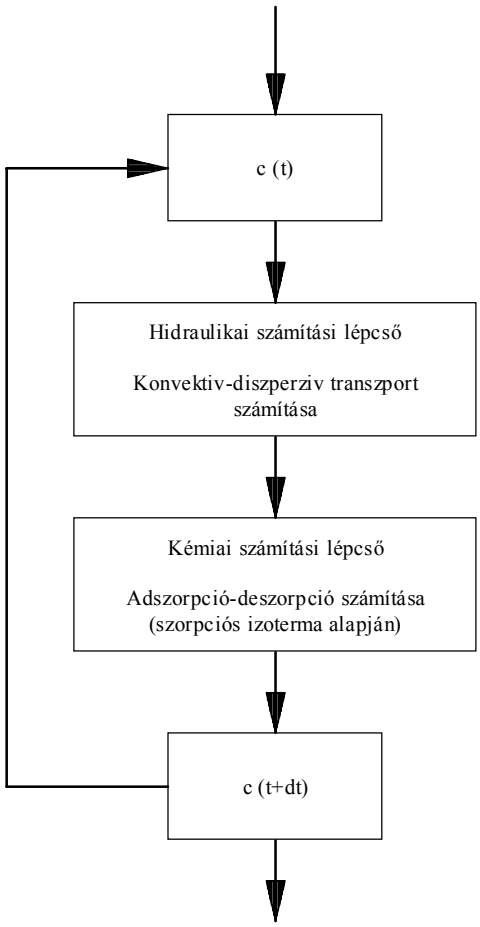
Tekintve, hogy a 2.2.18 összefüggés, mind a pórustérben lévő, mind a felületen megkötött szennyezőanyag esetében $\lambda$ intenzitású bomlást tételez fel, ez az egyenlet elsősorban a radioaktív bomlásra vonatkozóan írható fel. Biodegradáció esetén a bomlás üteme a folyadék, illetve a szilárd fázisban jelentősen eltér. Ebben az esetben általában a megkötött szennyezőanyag bomlására vonatkozóan nem rendelkezünk ismeretekkel, csak azt feltételezhetjük, hogy intenzitása nagyságrenddel kisebb, mint folyadékfázisban. Ilyen esetekben a szilárd fázisban bekövetkezett bomlást a biztonság javára történő elhanyagolással figyelmen kívül hagyhatjuk:

$$\frac{dM_4}{dVdt} = \frac{\partial(\Theta C)}{\partial t} = -\lambda\Theta C \qquad (2.2.19)$$

A fenti összefüggés azonban a kémiai reakciók egy részét, az elsőrendű kinetikájú, reverzibilis reakciókat írja le. Emiatt azokban az esetekben, amikor a bonyolultabb kémiai folyamatokat is követni szükséges, speciális, a hidraulikai számításokkal kompatibilis kémiai modulokat használnak fel, melyek rendkívül erősen megnövelik a feladatmegoldás erőforrásigényét. Éppen ezért ezek a megoldások a hidraulikai gyakorlatban nem terjedtek el.

Problémát jelent a <u>nem-konzervatív, adszorbeálódó szennyezőanyagok</u> mozgásának követése. Ezek az anyagok a gyakorlatban sokszor előfordulnak, ugyanakkor szorpciós tulajdonságaik többnyire ismeretlenek. Ezért a figyelem mindjobban az anyagjellemzők meghatározására irányul, valamint a cél olyan hidraulikai modellek kifejlesztése, amelyekkel a hidraulikai jelenségeken túl, az áramló folyadékban lejátszódó kémiai folyamatok is megfelelően követhetők.

A ma alkalmazott kémiai reakciókat követő számítási modellek – a feladat-megfogalmazás és a számítások bonyolultsága miatt – a modellezett térben lezajló hidraulikai folyamatok követésére egyelőre még nem alkalmasak. Ezért a kémiai és hidraulikai modellelemek kombinációja érdekében a legújabb modellek[40] kétlépcsős számítási módot alkalmaznak, amelynek során hidraulikai és kémiai számítási lépések váltogatják egymást (2.11.ábra). Ez a módszer szükségessé teszi az időben történő sűrű szakaszolást a kémiai folyamatok megfelelő közelítése érdekében. Problémát jelent a szennyezőanyag és az áramlási közeg kompatibilitásának tisztázatlansága, a közeg tulajdonságai – a szennyezés és a közeg között végbemenő fizikai-kémiai folyamatok eredményeként – időben jelentősen megváltozhatnak. Éppen ezért hosszú távú előrejelzések csak a kompatibilitási vizsgálatok megnyugtató lezárása után lehetnek a megkívánt pontosság szintjén elvégezhetők.




2.11.ábra: A denitrifikáció számítására használt kétlépcsős számítási modell (Kinzelbach et. al., 1991)

## 2.3. A porózus közegben mozgó konzervatív szennyezőanyagokra érvényes transzportegyenlet általános alakja

### *2.3.1. A szivárgás iránya párhuzamos az egyik koordináta-tengellyel*

Amennyiben a tömegmegmaradást feltételezve felírjuk az oldott szennyezőanyag áramokat a korábban jelzett elemi térfogatra, figyelembe véve a szorpciós folyamatokat és a bomlást is, feltételezve, hogy az uralkodó áramlási irány párhuzamos x koordináta-tengely irányával, az alábbi összefüggést kapjuk:

$$\frac{dM}{dVdt} = \frac{\partial(\Theta C)}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2}{\partial x^2}(\Theta C) + D_y \frac{\partial^2}{\partial y^2}(\Theta C) + D_z \frac{\partial^2}{\partial z^2}(\Theta C)$$
$$-\frac{\partial}{\partial x}(v_x C) - \frac{\partial}{\partial t}(\rho_b K_d C) - \lambda(\Theta C + \rho_b K_d C) \qquad (2.3.1)$$

ahol az egyenlet baloldali tagja a koncentráció elemi térfogatban való időegység alatti megváltozása.

Feltételezve, hogy a közeg tejesen telített, tehát Θ=n, ekkor:

$$\frac{dM}{ndVdt} = \frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}$$
$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{v_x C}{n}\right) - \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\rho_b K_d C}{n}\right) - \lambda\left(C + \frac{\rho_b K_d C}{n}\right) \qquad (2.3.2)$$

Bevezetve az $R = 1 + \frac{\rho_b K_d}{n}$ késleltetési tényező fogalmát a 2.3.2 egyenlet az alábbi formába irható (x irányú szivárgást feltételezve):

$$R\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{v_x C}{n}\right) - \lambda RC \qquad (2.3.3)$$

### *2.3.2. Általános irányú szivárgás esete*

Hasonlóan az x tengellyel párhuzamos szivárgás esetén leírtakhoz, az elemi térfogatban a szennyezőanyag mennyiségének megváltozását általános irányú vízmozgást feltételezve az alábbiak szerint írhatjuk le:

$$\begin{aligned}\frac{dM}{dVdt} &= D_{xx}\frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial x^2} + D_{xy}\frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial x \partial y} + D_{xz}\frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial x \partial z} + D_{yx}\frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial y \partial x} + D_{yy}\frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial y^2} + D_{yz}\frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial y \partial z} \\ &+ D_{zx}\frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial z \partial x} + D_{zy}\frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial z \partial y} + D_{zz}\frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial x}(v_x C) - \frac{\partial}{\partial y}(v_y C) - \frac{\partial}{\partial z}(v_z C) \\ &- \frac{\partial}{\partial t}(\rho_b K_d C) - \lambda(\Theta C + \rho_b K_d C)\end{aligned} \qquad (2.3.4)$$

Telített közeg esetén:

$$\begin{aligned}\frac{dM}{ndVdt} &= D_{xx}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{xy}\frac{\partial^2 C}{\partial x \partial y} + D_{xz}\frac{\partial^2 C}{\partial x \partial z} + D_{yx}\frac{\partial^2 C}{\partial y \partial x} + D_{yy}\frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_{yz}\frac{\partial^2 C}{\partial y \partial z} \\ &+ D_{zx}\frac{\partial^2 C}{\partial z \partial x} + D_{zy}\frac{\partial^2 C}{\partial z \partial y} + D_{zz}\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{v_x C}{n}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{v_y C}{n}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{v_z C}{n}\right) \\ &- \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\rho_b K_d C}{n}\right) - \lambda\left(C + \frac{\rho_b K_d C}{n}\right)\end{aligned} \qquad (2.3.5)$$

Ismét behelyettesítve az R késleltetési tényezőt:

$$\begin{aligned}R\frac{dM}{ndVdt} &= D_{xx}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{xy}\frac{\partial^2 C}{\partial x \partial y} + D_{xz}\frac{\partial^2 C}{\partial x \partial z} + D_{yx}\frac{\partial^2 C}{\partial y \partial x} + D_{yy}\frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_{yz}\frac{\partial^2 C}{\partial y \partial z} \\ &+ D_{zx}\frac{\partial^2 C}{\partial z \partial x} + D_{zy}\frac{\partial^2 C}{\partial z \partial y} + D_{zz}\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{v_x C}{n}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{v_y C}{n}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{v_z C}{n}\right) - \lambda RC\end{aligned} \qquad (2.3.6)$$

---

[1]W.Kinzelbach: Groundwater Modelling (An Introduction with Sample Programs in BASIC), Elsevier, 1986, p.207.
[2]Márkos G.: A hidrogeokémiai rendszerek diffúziós folyamatai, 1.rész: Alapfogalmak és korszerű diffúzióelmélet, 1987. Hidrológiai Közlöny, 67. 5-6. pp.255-271.
[3]Filep Gy. : Talajkémia, 1988, Akadémiai Kiadó, Budapest,pp.48-49.
[4]C.D. Shackelford - D.E. Daniel: Diffusion in Saturated Soil I.: Background, 1991, J. of Geotechnical Engineering, Vol.117. pp.467-484.
[5]J. Bear - A.Verruijt: Modelling Groundwater Flow and Pollution, D.Reidel Publ.Co., 1987, p. 156.
[6]R.W. Gillham - M.J.L. Robin - N.D.J. Dytynyshy - H.M. Johnston: Diffusion of Nonreactive and Reactive Solutes through Fine Grained Barrier-Materials, 1984, Canadian Geotechnical J. Vol.21(3). pp.541-550.
[7]F.S. Barone - R.K. Rowe - R.M. Quigley: Laboratory Determination of Chloride Diffusion Coefficient in Intact Shale, 1990, Canadian Geotechnical J. Vol.27. pp.175-184
[8]Y-H. Li - S. Gregory: Diffusion of Ions in Sea Water and Deep Sea Sediments, 1974, Acta Geochimica and Cosmochimica Vol.38(5), pp.703-714.
[9]R.A. Berner: Principles of Chemical Sedimentology, 1971, Mc-Graw - Hill Publ. Co., New York
[10]J.I. Drever: The Geochemistry of Natural Waters, 1982, Prentice-Halls, Englewood Cliff
[11]W.D. Kemper - D.E.L.Maasland - L.K.Porter: Mobility of Water Adjacent to Mineral Surfaces, 1964. Proc. of Soil Sciences Society of America Vol. 28(2), pp.164-167.

[12]S.R. Olsen - W.D. Kemper: Movement of Nutrients to Plant Root, 1968, Advances in Agronomy, Vol. 20, pp. 91-151.
[13] P.H. Nye: Diffusion of Ions and Uncharged Solutes in Soils and Soil Clays, 1979, Advances in Agronomy, Vol. 31, pp.225-272.
[14]L.K. Porter - W.D. Kemper - R.D. Jackson - B.A. Stewart: Chloride Diffusion in Soils as Influenced by Moisture Content, 1960, Proc. of Soil Sciences Society of America Vol. 24(6), pp.400-403.
[15]J.C. van Schaik - W.D. Kemper: Chloride Diffusion in Clay-Water Systems, 1966, Proc. of Soil Sciences Society of America Vol. 30(1), pp.22-25.
[16]Filep Gy. : Talajkémia, 1988, Akadémiai Kiadó, Budapest, pp.119.
[17] J.J. Fried - M.A. Combarnous: Dispersion in Porous Media, 1971, Adv. Hydrosci. 7. p.169-182. in: Filep Gy. : Talajkémia, 1988, Akadémiai Kiadó, Budapest, pp.119.
[18]R. M. Quigley - E.K. Yanful - F. Fernandez: Ion Transfer by Diffusion through Clayey Barriers, 1987, Proc., Geotechnical Practice for Waste Disposal, American Society of Civil Engineers, Geotechnical Special Publications 13. pp. 137-158,
[19]A. Lerman: Geochemical Processes - Water and Sediment Environments, 1979, Wiley and Sons, New York
[20]D.J.Shaw: Bevezetés a kolloid és felületi kémiába, 1986, Műszaki Könyvkiadó Bp. pp.29.
[21]J. Istok: Groundwater Modeling by the Finite Element Method, American Geophysical Union, Water Resources Monograph Vol.13. pp. 471
[22]Filep Gy. : Talajkémia, 1988, Akadémiai Kiadó, Budapest, pp.118-120.
[23]W.Kinzelbach: Groundwater Modelling (An Introduction with Sample Programs in BASIC), Elsevier, 1986, p.202.
[24]J. Bear - A.Verruijt: Modelling Groundwater Flow and Pollution, D.Reidel Publ.Co., 1987, p. 158.
[25]W.Kinzelbach: Groundwater Modelling (An Introduction with Sample Programs in BASIC), Elsevier, 1986, pp.193.
[26] Szabó I. - Kovács B.: Hulladékelhelyezés IV. A szennyezőanyagok terjedése, A modellezés elmélete és gyakorlata, 1995, Ipar a Környezetért Alapítvány, p. 270.
[27] Kovács B.: Kárelhárítási elvi engedélyezési terv a MOL Rt. szeghalmi üzemanyag lefejtő- és tárolótelepe okozta szénhidrogén szennyezéshez, 1994, Szakvélemény, Kézirat
[28] Kovács B.: Kiegészítő hidraulikai szakvélemény a MOL Rt. szarvasi telepe okozta szénhidrogénszennyezés mentesítési tervéhez, 1994, Szakvélemény, Kézirat
[29]W.Kinzelbach: Groundwater Modelling (An Introduction with Sample Programs in BASIC), Elsevier, 1986, p.195.
[30]A.E. Scheidegger: On the Theory of Flow of Miscible Phases in Porous Media, 1957, J. of Geophysical Resources Vol. 66(10), pp. 3273-3278.
[31]T.K. Perkins - D.C. Johnston: Review of Diffusion and Dispersion in Porous Media,1963, Society of Petroleum Engineering J. Vol.3. pp. 70-84.
[32]R.K. Rowe: Pollutant Transport Through Barriers, 1987, Proc. ASCE Conf. on Geotechnical Practice for Waste Disposal, pp. 159-181.
[33]Vízben oldódó szennyezõanyagok terjedése talajvízben, Vízügy Műszaki Segédlet, VMS-299-83, Országos Vízügy Hivatal, 1984. május
[34]Szücs E.: Hasonlóság és Modell, Műszaki Könyvkiadó, 1972, p. 299.
[35]W.Kinzelbach: Groundwater Modelling (An Introduction with Sample Programs in BASIC), Elsevier, 1986, p.201.
[36]U. Beims: Planung, Durchführung und Auswertung von Gütepumpversuchen, 1983, Zeitschrift für Angewandte Geologie, 29(10) p. 482-490.
[37]Water Science and Technology Board of the National Research Council: Ground Water Models, Scientific and Regulatory Applications, 1990, National Academy Press, Washington D.C. p.303.
[38]J. Bear - A.Verruijt: Modelling Groundwater Flow and Pollution, D.Reidel Publ.Co., 1987, pp. 153-154.
[39] Czinkota I: Talajok forró vizes extrakciója, egyetemi doktori disszertáció, 1994, GATE Talajtani és Agrokémiai Tanszék

[40]W. Kinzelbach - W. Schäfer - J. Herzer: Numerical Modeling of Natural and Enhanced Denitrification Processes in Aquifers, 1991, Water Resources Research, Vol. 27. No.6. pp. 1123-1135.

## 3. A TRANSZPORT-EGYENLET NÉHÁNY ISMERT MEGOLDÁSI MÓDJA

A 2.3.5 és 2.3.6 egyenletek a konzervatív szennyezőanyagok porózus közegbeli transzportját leíró egyenlet (transzport-egyenlet) legáltalánosabb alakjai, amelyeknek analitikus, szemianalitikus és numerikus megoldási lehetőségei léteznek.

### 3.1. Analitikus megoldások

Az analitikus megoldások során a szerzők arra törekedtek, hogy az egyenletet - a változók (pl. geometria, szivárgási sebesség, anyagi és szennyezőanyag-szóródási tulajdonságok) egy részének állandóként való feltételezésével - úgy egyszerűsítsék, hogy az egyenlet integrálással megoldható lehessen, azaz a koncentrációknak a tér- és időbeli függése explicit formában kifejezhetővé váljék.

Az egydimenziós megoldások közül a legismertebb a pillanatnyi, M tömegű szennyezőanyagot a vízadóba jutató, a vizsgált rendszerre illesztett koordinátatengely origójában található forrás esete homogén, v sebességgel szivárgó talajvízben. Ebben az esetben a megoldás a jól ismert Gauss-görbe, amelyik a késleltetésnek megfelelően $v_x / R$ sebességgel mozog az időben x tengely pozitív irányában, a szórása $\sqrt{2\alpha_L v_x t / R}$. A függvény amplitúdója az időben csökken.:

$$C(x,t) = \frac{M}{2wmn_0 R\sqrt{\frac{\pi\alpha_L v_x t}{R}}} \exp\left(-\frac{\left(x-\frac{v_x t}{R}\right)^2}{\frac{4\alpha_L v_x t}{R}}\right)\exp(-\lambda t) \qquad (3.1.1)$$

Kétdimenziós esetre - amennyiben a víz szivárgása x tengellyel megegyező irányú - a megoldást Csanády[1] adta meg:

$$C(x,y,t) = \frac{M}{4\pi mn_0 v_x t\sqrt{\alpha_L\alpha_T}} \exp\left(-\frac{\left(x-\frac{v_x t}{R}\right)^2}{\frac{4\alpha_L v_x t}{R}} - \frac{y^2}{\frac{4\alpha_T v_x t}{R}}\right)\exp(-\lambda t) \qquad (3.1.2)$$

A 2.4.2. egyenlet az alapja a nyomjelzéses vizsgálatokat követő számításoknak két megfigyelő kút esetén.

Másik ismert probléma a laboratóriumi oszlopkísérletek követése, ekkor a peremfeltételek:

$$C(0,t) = \begin{cases} 0, & \text{ha } t < 0 \\ C_0, & \text{ha } t \geq 0 \end{cases} \quad \text{és} \quad \begin{matrix} C(\infty,t) = 0, & \text{minden t - re} \\ C(x,0) = 0, & \text{ha } x > 0 \end{matrix} .$$

A megoldást Ogata[2], Ogata és Banks[3] valamint Gupta és Pandey[4] adta meg egymástól alig eltérő formában:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2}\exp\left(\frac{x}{2\alpha_L}\right)\left(\exp\left(\frac{-\gamma x}{2\alpha_L}\right) erfc\left(\frac{\frac{x-vt\gamma}{R}}{2\sqrt{\frac{\alpha_L vt}{R}}}\right) + \exp\left(\frac{\gamma x}{2\alpha_L}\right) erfc\left(\frac{\frac{x+vt\gamma}{R}}{2\sqrt{\frac{\alpha_L vt}{R}}}\right)\right) \qquad (2.4.2)$$

Nagy Peclet számok esetén, amikor $Pe = \frac{x}{\alpha_L} > 10$ a bemutatott eset jól közelíthető az alábbi formulával:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2}\exp\left(\frac{x}{2\alpha_L}(1-\gamma)\right) erfc\left(\frac{\frac{x - vt\gamma}{R}}{2\sqrt{\frac{\alpha_L vt}{R}}}\right) \qquad (3.1.3)$$

Amennyiben pedig a nem bomló szennyezőanyag az áramlási közeg felületén nem adszorbeálódik (R=1 és λ=0), az 2.4.3 összefüggés tovább egyszerűsödik:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} erfc\left(\frac{x - vt}{2\sqrt{\alpha_L vt}}\right) \qquad (3.1.4)$$

A transzportegyenlet egyéb kezdeti és peremfeltételek mellett történő analitikus megoldásának még számos esete ismert, ezeket az ismert szakkönyvek tartalmazzák[5]

## 3.2. Néhány numerikus megoldás

### *3.2.1. A véges differencia módszer*

A véges differencia módszer alkalmazása során a modellezett teret tetszőleges számú síkban tetszőleges darabszámú, de azonos eloszlású, egymással érintkező téglatest alakú elemekre bontjuk, egyenletes vagy változó osztású egyenesekből álló rácsháló segítségével. Ezután a transzport-egyenletnek a differenciaegyenletté alakított formája alapján a meghatározzuk az egyes hasábelemek és az azokkal közvetlenül érintkező elemek közötti konvektív, diszperzív szennyezőanyag fluxusokat, az adszorbeált anyagmennyiséget és az esetlegesen kémiai vagy radioaktív bomlás útján degradálódott szennyezőanyag mennyiségeket. Figyelembe véve a szennyezőanyag-nyelők és források hatását, valamint alkalmazva a kezdeti és peremfeltételeket, felírjuk az egyes elemek szennyezőanyag-mérlegét egy a kezdeti $t_0$ időpontra és az azt követő Δt időpontra. Ezt követően az egyes elemek anyagmérlege alapján felállítjuk a modellezett tér szennyezőanyag forgalmát - az adott időlépcsőben - leíró lineáris egyenletrendszert, majd numerikus iteratív eljárásokkal megoldjuk azt, így számítva a koncentrációk értékét az egyes elemekben. Nem permanens esetben az utóbbi lépéseket tetszőleges számú időlépcsőre megismételjük.

A módszer előnye, hogy a megoldás során a differenciáloperátort differenciaoperátorral helyettesítjük és így a megoldás során megmaradnak az eredeti összefüggések, ezért az egyes anyagáramok nagysága és a további paraméterek hatása mind az időben, mind a térben jól követhető. A módszer hátránya, hogy a téglatest alakú elemekkel az egymástól eltérő hidraulikai vagy szennyezés-terjedési tulajdonságokkal rendelkező és ezért a modellben egymástól elhatárolandó térbeli testek csak nehezen követhetőek. További hátrány, hogy a rendelkezésre álló földtani, vízföldtani információk többnyire pontszerűek (fúrási helyek, magminták vizsgálati eredményei), azonban a modellben az egyes elemekre jellemző értékek szerepelnek. Minthogy a háló nem követheti a fúrási hálózatot, gyakran előfordulnak olyan elemek, melyekre vonatkozóan csak közvetett információkkal rendelkezünk. A kapott eredmények az egyes elemekre jellemző átlagértékek lesznek, ezért csak megfelelően nagy sűrűségű háló esetén lehetnek az eredmények megfelelően reprezentatívak. A háló lokálisan nem, vagy csak speciális technika alkalmazásával sűríthető, ami a modellalkotás és feldolgozás során számos kellemetlen következményhez vezethet.

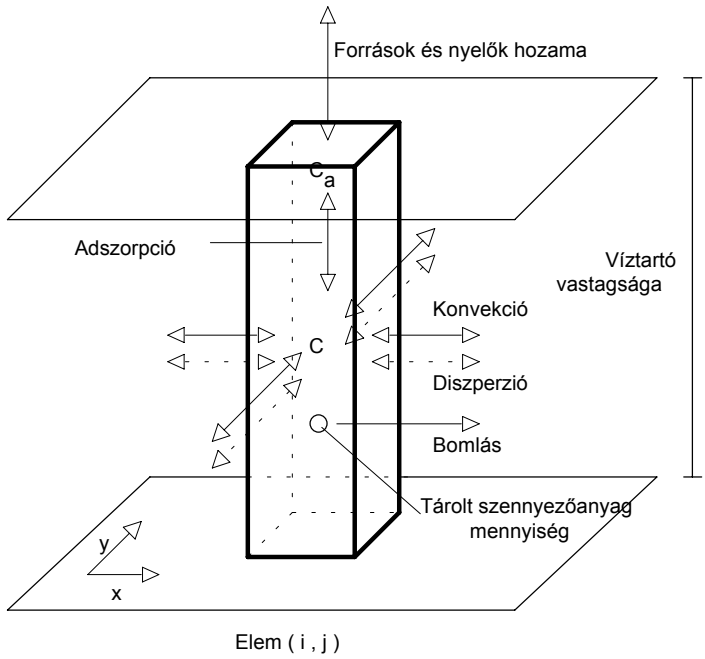
#### *3.2.1.1. A szennyezőanyag-mérleg elemei*

Az egyszerűség kedvéért tekintsünk egy síkmodellt, amelyben a rácsháló osztása x és y irányban is egyenletes, Δx, illetve Δy. Legyenek a rácsháló elemeinek koordinátái x irányban 1,2,..., i-1,i,i+1,...n, míg y irányban 1,2,...,j-1,j,j+1,...n. így egy általános helyzetű elemre a koncentráció értéke $C_{i,j}$, az elem magassága $m_{i,j}$ és így tovább. (3.1.ábra)

Ha a pórusokban az áramlási sebesség komponensei ($v_x$,$v_y$), akkor az oldott szennyezőanyagokat tartalmazó víztömeg áramlása következtében az egyes elemekbe be- illetve kilépő konvektív(advektív) szennyezőanyag hozamokat az alábbi egyenlet írja le:

$$\begin{aligned} J_k = \Big\{ & v_{x,i-1,j} \cdot \left[\alpha \cdot C_{i-1,j} + (1-\alpha) \cdot C_{i,j}\right] \Delta y \cdot \left(m_{i-1,j} + m_{i,j}\right) - \\ & - v_{x,i,j} \cdot \left[\beta \cdot C_{i,j} + (1-\beta) \cdot C_{i+1,j}\right] \Delta y \cdot \left(m_{i,j} + m_{i+1,j}\right) + \\ & + v_{y,i,j-1} \cdot \left[\gamma \cdot C_{i,j-1} + (1-\gamma) \cdot C_{i,j}\right] \Delta x \cdot \left(m_{i,j-1} + m_{i,j}\right) - \\ & - v_{y,i,j} \cdot \left[\delta \cdot C_{i,j} + (1-\delta) \cdot C_{i,j+1}\right] \Delta x \cdot \left(m_{i,j} + m_{i,j+1}\right) \Big\} / 2n_0 \end{aligned} \qquad (3.2.1)$$

ahol $v_{x,i,j}$, $v_{y,i,j}$ az áramlási pórussebesség komponensei, $C_{i,j}$ a koncentráció az i,j hasábban és $n_0$ a szabad hézagtérfogat.




3.1.ábra: Szennyezőanyag-mérleg elemei egy kiválasztott elemi hasáb környezetében (Kinzelbach[6], 1986)

Függően attól, hogy milyen módon képezzük a differenciákat α, β, γ és δ értéke az alábbiak szerint alakul:

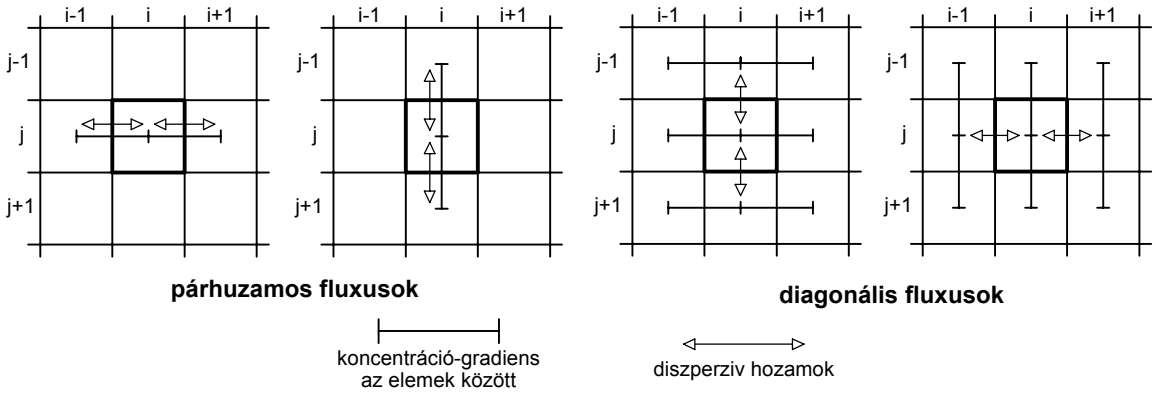
- központi differenciák alkalmazása esetén: $\alpha = \beta = \gamma = \delta = 0{,}5$ .

- előrelépéses differenciák esetén: $\alpha = \left[1 + \mathrm{sgn}\left(v_{x,i-1,j}\right)\right]/2$ , $\beta = \left[1 + \mathrm{sgn}\left(v_{x,i,j}\right)\right]/2$ $\gamma = \left[1 + \mathrm{sgn}\left(v_{y,i,j-1}\right)\right]/2$ és $\delta = \left[1 + \mathrm{sgn}\left(v_{y,i,j}\right)\right]/2$ .- hátralépéses differenciák esetén: $\alpha = \left[1 - \mathrm{sgn}\left(v_{x,i-1,j}\right)\right]/2$ , $\beta = \left[1 - \mathrm{sgn}\left(v_{x,i,j}\right)\right]/2$ , $\gamma = \left[1 - \mathrm{sgn}\left(v_{y,i,j-1}\right)\right]/2$ , $\delta = \left[1 - \mathrm{sgn}\left(v_{y,i,j}\right)\right]/2$ .

A három differenciaképzési eljárás közül, amennyiben a konvektív transzport domináns az előrelépéses, amennyiben a diszperzív transzport a jellemző, a központi differenciákat felhasználó algoritmust javasolják használni.[7]

A szennyezőanyag hidrodinamikai diszperziója, illetve a molekuláris diffúzió következtében a kiválasztott hasábelem és a környezetében lévő elemek között áramló szennyezőanyag fluxus párhuzamos és diagonális diszperzív fluxusokból tevődik össze. Amennyiben az áramlás iránya megegyezik valamelyik (pl. x) tengellyel, akkor a diszperzív szennyezőanyag áramlásnak csak az elem falára merőleges illetve azzal párhuzamos (tehát a másik két oldalára merőleges) komponense van (párhuzamos fluxusok, 3.2.ábra):

$$J_d^{(1)} = D_{xx,i-1,j} \cdot \left(C_{i-1,j} - C_{i,j}\right)\left(\frac{\Delta y}{\Delta x}\right) \cdot \left(m_{i-1,j} + m_{i,j}\right)\frac{n_0}{2} - D_{xx,i,j} \cdot \left(C_{i,j} - C_{i+1,j}\right)\left(\frac{\Delta y}{\Delta x}\right) \cdot \left(m_{i,j} + m_{i+1,j}\right)\frac{n_0}{2} +$$
$$+ D_{yy,i,j-1} \cdot \left(C_{i,j-1} - C_{i,j}\right)\left(\frac{\Delta y}{\Delta x}\right)\left(m_{i,j-1} + m_{i,j}\right)\frac{n_0}{2} - D_{yy,i,j}\left(C_{i,j} - C_{i,j+1}\right)\left(\frac{\Delta y}{\Delta x}\right)\left(m_{i,j} + m_{i,j+1}\right)\frac{n_0}{2} \qquad (3.2.2.)$$




3.2.ábra: A diszperzív hozamok számítási módja

Amennyiben az áramlási irány nem párhuzamos a koordináta tengelyekkel, a diszperzív hozamok számításánál az úgynevezett diagonális irányú diszperzív hozamokat (3.2.ábra) is tekintetbe kell venni, amelyek a következő módon számíthatók:

- Diagonális diszperzív hozam x irányból:

$$J_d^{(2x)} = D_{xy,i,j}\left(C_{i,j+1} - C_{i,j-1} + C_{i+1,j+1} - C_{i+1,j-1}\right) \cdot \left(m_{i,j} + m_{i+1,j}\right)\frac{n_0}{8} -$$
$$- D_{xy,i-1,j}\left(C_{i-1,j+1} - C_{i-1,j-1} + C_{i,j+1} - C_{i,j-1}\right) \cdot \left(m_{i-1,j} + m_{i,j}\right)\frac{n_0}{8} \qquad (3.2.3)$$

- Diagonális diszperzív hozam y irányból:

$$J_d^{(2y)} = D_{yx,i,j}\left(C_{i+1,j} - C_{i-1,j} + C_{i+1,j+1} - C_{i-1,j+1}\right) \cdot \left(m_{i,j} + m_{i,j+1}\right)\frac{n_0}{8} -$$
$$- D_{yx,i,j-1}\left(C_{i+1,j-1} - C_{i-1,j-1} + C_{i+1,j} - C_{i-1,j}\right) \cdot \left(m_{i,j-1} + m_{i,j}\right)\frac{n_0}{8} \qquad (3.2.4)$$

ahol $D_{xx}$, $D_{yy}$, $D_{xy}$ és $D_{yx}$ a diszperziós tenzor elemei, amelyeket az alábbi képletekkel számíthatunk[8]:

$$D_{xx,i,j} = \frac{\alpha_L \cdot V_x^2 + \alpha_T \cdot V_y^2}{V} \quad \text{és} \quad D_{xy,i,j} = \frac{\left(\alpha_L - \alpha_T\right) \cdot V_x \cdot V_y}{V}$$

ahol $\alpha_L$ és $\alpha_T$ a longitudinális és transzverzális diszperzivitás, $V_x = v_{x,i,j}$, $V_y = \frac{v_{y,i,j} + v_{y,i+1,j} + v_{y,i,j-1} + v_{y,i+1,j-1}}{4}$ és $V = \sqrt{V_x^2 + V_y^2}$.

Hasonlóképpen:

$$D_{yy,i,j} = \frac{\alpha_T \cdot V_x^2 + \alpha_L \cdot V_y^2}{V} \quad \text{és} \quad D_{yx,i,j} = \frac{\left(\alpha_L - \alpha_T\right) \cdot V_x \cdot V_y}{V},$$

ahol $\alpha_L$ és $\alpha_T$ a longitudinális és transzverzális diszperzivitás, és $V_x = \frac{v_{x,i-1,j} + v_{x,i,j} + v_{x,y,i-1,j+1} + v_{x,i,j+1}}{4}$, $V_y = v_{y,i,j}$ és $V = \sqrt{V_x^2 + V_y^2}$.

A fentiek alapján tehát a diszperzív hozamok fluxusa $J_d = J_d^{(1)}$, ha az uralkodó áramlási sebesség iránya párhuzamos bármelyik koordináta tengellyel és $J_d = J_d^{(1)} + J_d^{(2x)} + J_d^{(2y)}$ általános irányú sebességvektor esetén.

Az egyes elemek szennyezőanyag mérlegét az elemen belüli szennyezőanyag források és nyelők (pl. termelő kutak) hozamai módosíthatják, amelyeknek két alapvető típusa van: a koncentrált és a területi források. A vízkitermeléshez illetve vízbetápláláshoz kötött koncentrált források és nyelők fluxusa $J_q^{(1)} = q_{i,j} \cdot \Delta x \Delta y \cdot C_{kut,i.j}$, ahol $C_{kut,i,j}$ a kúttal kitermelt vagy a kútba injektált víz koncentrációja, $q_{i,j}$ a betáplálás/kivétel hozama az elem egységnyi felületére vetítve. A területen megoszló - ú.n. belső - szennyezőanyag források (pl. depóniák) esetében a fluxus $J_q^{(2)} = S_{belső,i,j} \cdot \Delta x \Delta y$, ahol $S_{belső,i,j}$ [mg/s/m²] a belső forrás (depónia) aktivitásának az értéke a hasábelem egységnyi területére vonatkoztatva.

A szennyezőanyagok egy része biológiai, kémiai vagy radioaktív úton lebomlik. A degradáció során a rendszerből távozó anyagmennyiség fluxusa $J_{degr} = -\lambda \cdot n_0 \cdot \Delta x \Delta y \cdot m_{i,j} \cdot C_{i.j}$, ahol $\lambda$ a bomlási együttható, $C_{i,j}$ a koncentráció az elemben az időlépcső kezdetén.

A lineáris adszorpció figyelembevételére a be- és kifolyó hozamokat az R késleltetési tényezővel osztjuk el. Amennyiben az adszorpciót nem kívánjuk figyelembe venni, akkor R=1.

A korábban felsorolt szennyezőanyag-hozamok hatására az adott időlépcső alatt a vizsgált elemben a koncentráció, tehát a tárolt szennyezőanyagok $M_t = n_0 \cdot \Delta x \Delta y \cdot m_{i,j} \cdot \left[C_{i,j}(t+\Delta t) - C_{i,j}(t)\right]$ mennyisége megváltozik:

Alkalmazva a korábban felírt összefüggéseket, a szennyezőanyag-mérleg kétdimenziós áramlás (síkszivárgás) esetén az alábbi módon fogalmazható meg:

$$\frac{J_k + J_d + J_q^{(1)} + J_q^{(2)} + J_{degr}}{R} \cdot \Delta t = M_t \qquad (3.2.5)$$

Ez az egyenlet minden egyes hasábelemre felírható, így a probléma megoldását egy sokismeretlenes egyenletrendszer megoldására vezettük vissza.

A szennyezőanyag-mérleg valódi háromdimenziós esetben kissé módosul, mert ekkor a kiválasztott elem nemcsak a korábban figyelembe vett szomszédos négy elemmel, hanem az alatta és felette elhelyezkedő elemekkel is kapcsolatban áll. Ebben az esetben a konvektív hozamokat a függőleges áramlási sebességet is figyelembe véve újabb tagokkal bővíteni kell. A diszperzív hozamokat a diszperziós tenzor 3x3 méretű mátrixának segítségével kell felírni, további normális és diagonális tagokkal bővítve a korábban alkalmazott összefüggést. A források és nyelők hozamai, a degradáció okozta koncentráció-csökkenés, valamint az adszorpció figyelembevétele nem változik.

### *3.2.1.2. A kezdeti és peremfeltétlek megadása*

A modell tér- és időbeli határain a szennyezőanyag-mérleg néhány eleme meghatározatlan, ezek meghatározására perem- és kezdeti feltételeket szükséges alkalmazni.

Ahhoz, hogy az első időlépcső során a szennyezőanyag hozamok meghatározhatók legyenek, kezdeti feltételként a $t_0$ időponthoz tartozó koncentráció-értékeket használjuk fel. Ezek után már minden $t_i=t_{i-1}+\Delta t$ időlépcsőre felírható az egyenletrendszer, ahol i az időlépcső sorszáma.

A modellezett térrész határain a szennyezőanyag-mérleg hiányzó elemeinek pótlásra, vagy ezen összetevők számításának lehetővé tételére Dirichlet-típusú, Neumann-típusú vagy összetett peremfeltételeket alkalmazhatunk. Dirichlet-típusú peremfeltétel esetén az adott szélső hasábelemben (függetlenül az abban lejátszódó szennyezőanyag-áramlási folyamatoktól) a koncentrációt időlépcsőről időlépcsőre állandónak tekintjük. Leggyakrabban a szennyezőforrástól meg-

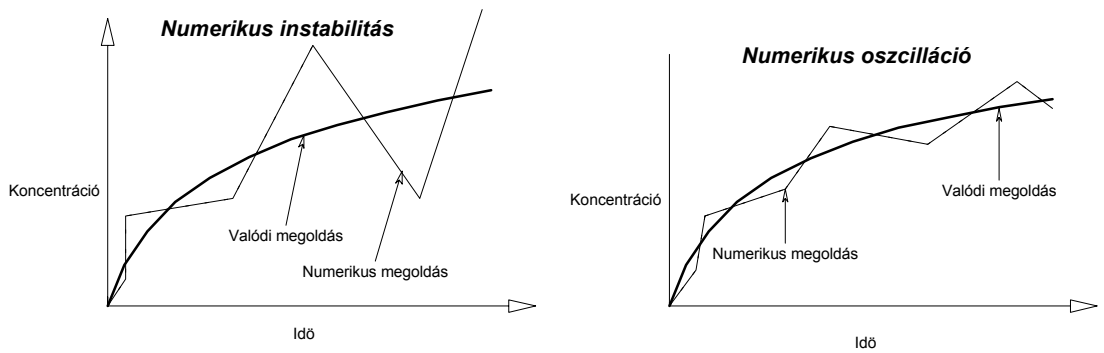
felelően távol lévő határelemekben alkalmazzuk, oly módon, hogy az állandó koncentráció értékét zérusnak, vagy a háttérterhelésnek megfelelő értékűnek választjuk. Neumann típusú határ esetén a beáramló szennyezőanyag-fluxus értékét tekintjük állandónak, azaz a peremi helyzetű elembe a modellezett téren kívülről beáramló szennyezőanyag konvektív és diszperzív fluxusait, egy adott, meghatározott értékű fluxussal helyettesítjük. Speciális esete, amikor a beáramló hozam zérus. Összetett peremfeltételek alkalmazása esetén a határelemeken beáramló fluxust valamilyen másik változó (például piezometrikus nyomásszint, áramlási sebesség stb.) függvényében adják meg.

### *3.2.1.3. A megoldás során fellépő hibák*

**A megoldás instabilitása**

A megoldás instabilitásán azt értjük, hogy a közelítő megoldás a valódi megoldáshoz nem konvergál (3.3.ábra). Az instabilitás jelensége elsősorban explicit megoldási módok esetén jelentkezik, azonban az elemszám növekedésével, elsősorban háromdimenziós numerikus modellek és/vagy implicit megoldó rutinok használata esetén is előfordul. Az instabilitás egyik speciális esete a numerikus oszcilláció, amikor a számítások eredményei nem képesek a hibahatáron belül közelíteni a valós megoldást. A stabilitás biztosítása érdekében a Courant, a Neumann és a forrás-nyelő stabilitási kritériumoknak kell teljesülniük.

A Courant kritérium azt fejezi ki, hogy konvektív úton az adott Δt időlépcső alatt nem léphet ki több szennyezőanyag az elemből, mint amennyi az időlépcső kezdetén az elemben tárolt anyagmennyiség. Ennek a feltételnek a modellezett tér minden elemére, minden időlépcső során teljesülnie kell. A Courant kritériumot $Co_x = \left|\frac{\Delta t \cdot v_x}{\Delta x}\right| \le 1,\quad Co_y = \left|\frac{\Delta t \cdot v_y}{\Delta y}\right| \le 1$ matematikai alakban szokás felírni, azonban előrelépéses differenciák alkalmazása esetén a $Co_x + Co_y \le 1$ feltételnek is teljesülnie kell, ahol Co az úgynevezett Courant-szám, $v_x$ és $v_y$ az áramlási sebességvektor komponensei, Δx és Δy a vizsgált elem hossza, illetve szélessége.




3.3.ábra: A numerikus instabilitás és a numerikus oszcilláció jelensége

Háromdimenziós modellek esetén a Courant kritérium a $Co = \left|\frac{\Delta t \cdot v(x,y,z)}{\Delta l}\right| \le 1$ formában irható fel, ahol Δl az adott elemen belüli áramvonalak sebességirányban mért maximális hossza[9].

A Neumann kritérium azt biztosítja, hogy kizárólag a konvektív-diszperzív szennyezőanyag-hozamok hatására a koncentráció-gradiens iránya ne változhasson meg. Matematikai formában[10]: $\frac{D_{xx}\Delta t}{(\Delta x)^2} + \frac{D_{yy}\Delta t}{(\Delta y)^2} \le 0{,}5$ , ahol $D_{xx}$ és $D_{yy}$ a diszperziós tenzor főelemei.

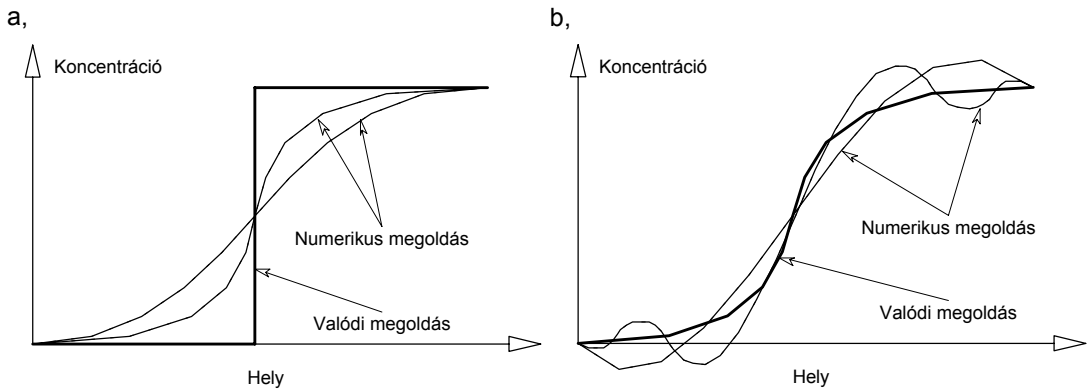
A forrás- és nyelőelemek stabilitási kritériuma biztosítja, hogy a nyelők hatására bekövetkező szennyezőanyag-mennyiség csökkenése ne legyen nagyobb, mint az időlépcső elején az adott elemben tárolt szennyezőanyag-mennyiség, azaz $\Delta t \leq \frac{n_0 m_{i,j}}{q_{i,j}}$, ahol $q_{i,j}$ a pontszerű nyelők és források összegzett hozama az elem egységnyi felületére vetítve, $m_{i,j}$ az elem magassága, $n_0$ a szabad hézagtérfogat.

**A numerikus diszperzió**

Numerikus diszperzió alatt a szennyezőanyag pusztán konvektív transzportja során kialakuló éles frontjának - az iteratív számítási ciklusok sorozatának végrehajtása közben fellépő pontatlanságok hatására bekövetkező - elmosódását értjük. (3.4/a.ábra)

A jelenség kialakulásának oka, hogy a szennyezési front számított haladási sebessége kissé eltér a konvekciós áramlási sebességtől. Mivel a numerikus módszerek alkalmazásakor az anyagmérleg mindig pontosan teljesül, ezért a sebességbeli eltérés a rendszerben egy relatív koncentráció-csökkenéssel kompenzálódik, így az oldat és a kiszoruló víz közötti éles határvonal elmosódik és egy átmeneti zóna alakul ki[11]. Minthogy a hibajelenség eredménye a szennyezőanyag szóródása, ezért numerikus diszperziónak nevezik. Az említett hiba bizonyíthatóan fellép konvektív-diszperzív transzportszámításoknál is, amelynek eredményeként látszólagosan megnövekednek a diszperziós tenzor elemei. Magát a hibát a differenciálhányadosok differenciahányadossal való közelítésének pontatlansága okozza, ami a második deriváltak (diszperzív hozamok) esetén sokkal nagyobb jelentőségű.

A numerikus (longitudinális és transzverzális) diszperzió jelenségének kiszűrésére több megoldás létezik. Magyarországon a pusztán konvektív COMAD transzportmodell esetén Székely F.[12] alkalmazta sikeresen az úgynevezett osztott blokkos (Method of divided blocks) eljárást. Az eljárás lényege, hogy az adott elem mentén a kémiai anyagáramokat két részre osztjuk: egyfelől az egyik blokkba, a kiáramlási cellába összegezzük a kiáramló hozamokat, melynek $C_{ki}$ koncentrációja határozza meg az adott elemből elszivárgó oldat koncentrációját. Másfelől egy ú.n. beáramlási cellába gyűjtjük a laterális, keresztirányú és külső beszivárgásból eredő V víztérfogatokat és az azokhoz kapcsolódó W kémiai anyagmennyiséget. Amikor a V víztérfogat eléri az adott elem adszorpcióval korrigált effektív pórustérfogatát, akkor a kiáramlási cella $C_{ki}$ értéke felveszi W kémiai anyagmennyiségből és az effektív pórustérfogatból számított új koncentrációértéket, miközben a V és W regiszterek nullázódnak és a folyamat kezdődik elölről.




3.4.ábra: A numerikus diszperzió és az "Undershoot-Overshoot" jelenség

**Az "Undershoot-Overshoot" jelenség**

Az "Undershoot-Overshoot" jelenség hasonlít a numerikus oszcillációhoz, ekkor a két különböző koncentrációjú hely között a koncentráció érték nem fokozatosan, hanem az alacsony és a magas koncentrációértékekhez oszcillálva közelít (3.4/b.ábra). A jelenség elsősorban a központi differenciák alkalmazásakor fordul elő, így az előrelépéses differenciákra való áttéréssel megkerülhető. Ez utóbbi esetben azonban a numerikus diszperzió erősebb, mert az ilyen módon képzett differenciahányados nagyobb hibával közelíti a differenciálhányadost, mint a központi differenciák esetén.

A numerikus diszperzió és az "Undershoot-Overshoot" jelenség elkerülhető ha a korábban tárgyalt Courant-kritérium a modellezett tér teljes egészére, mindkét (mindhárom) koordinátatengely irányában teljesül és ha a hálóra értelmezett Peclet szám kisebb mint 2[13] ( $Pe_x = \frac{v_x \Delta x}{D_{xx}} \leq 2$ és $Pe_y = \frac{v_y \Delta y}{D_{yy}} \leq 2$ ), ahol Pe a Peclet-szám.

Sajnos a feltételek teljesülés egyszerűen csak magas elemszám esetében biztosítható, azonban ennek korlátot szab a rendelkezésre álló memória. **Kinzelbach**[14] arra hívja fel a figyelmet, hogy az említett numerikus hibák még a fenti feltételek teljesülése esetén is bekövetkezhetnek, ha $\frac{\alpha_L}{\alpha_T} >\approx 10$, ahol $\alpha_L$ és $\alpha_T$ a longitudinális és transzverzális diszperzivitás.

### *3.2.2. Végeselem módszer*[15]

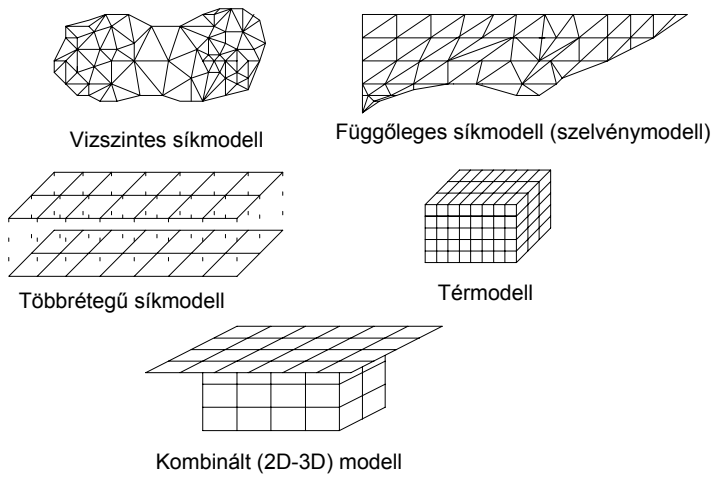
A transzportegyenlet végeselem módszerrel történő megoldása is megköveteli a modellezett térnek a tetszőleges számú csomópont és az azokat összekötő vonalak által határolt elemekre történő felosztását. Míg azonban a véges differencia módszer rácshálót alkalmaz, addig a végeselem módszer lehetővé teszi a tartomány elvileg tetszőleges elemekre való felbontását. Mindez egyben azt is jelenti, hogy az elemkiosztást a rendelkezésre álló információkhoz sokkal inkább hozzá lehet igazítani, mint azt a véges differencia módszernél láttuk. A továbbiakban a végeselem módszer GALJORKIN-féle változatát részletesebben mutatom be.

#### *3.2.2.1. A módszer alapgondolata*

A végeselem módszer alapgondolata a lokális approximáció elve, ami azt jelenti, hogy a szivárgási sebesség- vagy koncentrációmezőt előre felvett paramétereket tartalmazó függvényekkel közelítjük. A lokálisan felvett approximációs függvényeket azután a szomszédos elemek közös határai mentén valamilyen hibaelv alapján illesztjük, így végső soron a teljes vizsgált tartományra állítunk elő egy megfelelő rendben folytonos approximációs mezőt. A hibaelv alkalmazása - konkrét matematikai átalakításokon keresztül egy lineáris vagy - nem lineáris peremfeladat esetén - egy növekményes formátumú egyenletrendszerhez vezet, amelynek megoldása a korábban említett paramétereket szolgáltatja.

#### *3.2.2.2. A hálókiosztás elvei*

A végeselem háló egy- két- és háromdimenziós elemekből épülhet fel a megoldandó feladattól függően. Leggyakrabban az egydimenziós vonal, a kétdimenziós három- illetve négyszög elemeket alkalmazzák. Térbeli feladatok megoldása esetén tetraéder, háromszög alapú oszlop vagy téglatest alakú elemek kialakítása a szokásos. Az elemek csomópontjaikon keresztül kapcsolódnak egymáshoz. Az egyes elemek alakja, nagysága még azonos rendszeren belül is tetszőleges lehet, egyazon modellen belül többfajta elemet is alkalmazhatunk. (3.5. ábra)




3.5. ábra: A végeselem-hálók alak szerinti osztályozása (König[16], 1993 nyomán)

A módszer koncentráció vagy víznyomásszint eredményt az elemek illeszkedési pontjaira, a csomópontokra ad, ezért a csomópontokat egyfelől a vízkivételek és betáplálások helyén, a modellezett tér határain és minden olyan pontban célszerű elhelyezni, ahová a későbbiek során számítási eredményeket kívánunk kapni. Azokon a területeken, ahol nagyobbak a koncentráció, illetve a hidraulikus gradiens változásai, célszerű az elemeket sűríteni. Mivel az anyagi tulajdonságok egy-egy elemen belül állandóak, azonban elemenként különbözőek, ezért célszerű az elemeket úgy felvenni, hogy határaik egybeessenek a különböző képződmények határvonalával. Az elemek nem lehetnek egymással átfedésben és a teljes modellezett teret ki kell tölteniük. Lehetőség szerint kerülni kell az erősen anizometrikus elemek alkalmazását, különösen nempermanens változások szimulációja esetén. Célszerű a finomabb osztásból a laza háló felé való fokozatos átmenetet kialakítani. Egy adott probléma esetleges szimmetriáját jól megválasztott peremfeltételekkel célszerű kihasználni, így az elemek száma csökkenthető.

### *3.2.2.3. A transzportegyenlet végeselemes megoldása GALJORKIN-módszerrel*

A transzportegyenlet legyen az alábbi alakú (háromdimenziós eset, x irányú áramlás):

$$\frac{\partial(\Theta C)}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2}{\partial x^2}(\Theta C) + D_y \frac{\partial^2}{\partial y^2}(\Theta C) + D_z \frac{\partial^2}{\partial z^2}(\Theta C) - \frac{\partial}{\partial x}(v_x C) - \frac{\partial}{\partial t}(\rho_b K_d C) - \lambda(\Theta C + \rho_b K_d C) \tag{3.2.6}$$

ahol $\Theta$ a közegben (talajban) lévő víz térfogataránya ($cm^3/cm^3$ közeg), C a koncentráció az oldatban, $D_x$, $D_y$ és $D_z$ a diszperziós koefficiens értékei x, y és z irányokban, azaz a diszperziós tenzor főelemei, $v_x$ az uralkodó x irányú áramlás sebessége, $\rho_b$ a porózus közeg testtürüsége, $K_d$ és $\lambda$ a megoszlási, illetve a bomlási együttható.

Az egyenlet kiértékelése során feltételezünk egy $\hat{C}^{(e)}(x,y,z) = \sum_{i=1}^{n} N_i^{(e)} \cdot C_i$ közelítő megoldást,

ahol $\hat{C}^{(e)}$ a koncentráció közelítő értéke az elemen belül, $N_i^{(e)}$ az interpolációs függvény az összes csomópontra az adott elemen belül, $C_i$ az ismeretlen koncentráció értéke az elemen belüli i rácspontban. Mivel ez csak egy közelítő megoldás, ezért a továbbiakban a 3.2.6. egyenlet nem teljesül, így létezik az az R(x,y,z) maradék (3.2.7), amelyet az a hiba okoz, amit azzal követtünk el, hogy a valós megoldást a közelítő függvénnyel helyettesítettük. A továbbiakban arra törekszünk, hogy ezt az R maradékot az eljárás folyamán minimalizáljuk, azaz, hogy az R hibák súlyozott átlagát nullára csökkentsük:

$$R_i^{(e)} = -\iiint_{V^{(e)}} W_i^{(e)}(x,y,z)\cdot\left[D_x\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\Theta\hat{C}^{(e)}) + D_y\frac{\partial^2}{\partial y^2}(\Theta\hat{C}^{(e)}) + D_z\frac{\partial^2}{\partial z^2}(\Theta\hat{C}^{(e)}) - \frac{\partial}{\partial x}(v_x\hat{C}^{(e)}) - \right.$$

$$\left. -\frac{\partial}{\partial t}(\rho_b K_d\hat{C}^{(e)}) - \lambda(\Theta\hat{C}^{(e)} + \rho_b K_d\hat{C}^{(e)}) - \frac{\partial}{\partial t}(\Theta\hat{C}^{(e)})\right]\cdot dxdydz$$

(3.2.7)

Tekintettel arra, hogy a Galjorkin-módszer alkalmazása esetén a súlyozott átlagszámításhoz használt $W_i^{(e)}$ súlyfüggvény identikusan azonos az $N_i^{(e)}$ interpolációs függvénnyel, valamint, hogy az áramlás $v_x$ sebessége a teljes elemen belül állandó a 3.2.7 egyenlet az alábbi általános formát nyeri:

$$R_i^{(e)} = -\iiint_{V^{(e)}} N_i^{(e)}(x,y,z)\cdot\left[D_x^{(e)}\Theta^{(e)}\frac{\partial^2\hat{C}^{(e)}}{\partial x^2} + D_y^{(e)}\Theta^{(e)}\frac{\partial^2\hat{C}^{(e)}}{\partial y^2} + D_z^{(e)}\Theta^{(e)}\frac{\partial^2\hat{C}^{(e)}}{\partial z^2} - v_x^{(e)}\frac{\partial\hat{C}^{(e)}}{\partial x} - \right.$$

$$\left. -\rho_b^{(e)}K_d^{(e)}\frac{\partial\hat{C}^{(e)}}{\partial t} - \lambda(\Theta^{(e)}\hat{C}^{(e)} + \rho_b^{(e)}K_d^{(e)}\hat{C}^{(e)}) - \frac{\partial\hat{C}^{(e)}}{\partial t}\Theta^{(e)}\right]\cdot dxdydz$$

(3.2.8)

ahol $x^{(e)}$ x jellemző adott elemen belüli értékét jelenti. λ értéke állandó, mivel a bomlási együttható a szennyezőanyag, és nem a közeg jellemzője. Mivel $v_x^{(e)}$, illetve $\Theta^{(e)}$ időben változhat, ezért tekintsük a továbbiakban a nem permanens, telítetlen közeg esetét, amely az összes változót tartalmazza.

Ha tehát $v_x$, $v_y$ és $v_z$, illetve Θ értéke az időben változik, akkor $v_x = v_x(t)$, $v_y = v_y(t)$, $v_z = v_z(t)$, $\Theta = \Theta(t)$. A diszperziós tényező az áramlási sebesség függvénye, ezért $D_x = D_x(t)$, $D_y = D_y(t)$, $D_z = D_z(t)$, illetve általános esetben: $[D] = \begin{bmatrix} D_{xx}(t) & D_{xy}(t) & D_{xz}(t) \\ D_{yx}(t) & D_{yy}(t) & D_{yz}(t) \\ D_{zx}(t) & D_{zy}(t) & D_{zz}(t) \end{bmatrix}$. Ekkor a 3.2.8 egyenlet alakja:

$$R_i^{(e)} = -\iiint_{V^{(e)}} N_i^{(e)}\left[D_x^{(e)}(t)\Theta^{(e)}(t)\frac{\partial^2\hat{C}^{(e)}}{\partial x^2} + D_y^{(e)}(t)\Theta^{(e)}(t)\frac{\partial^2\hat{C}^{(e)}}{\partial y^2} + D_z^{(e)}(t)\Theta^{(e)}(t)\frac{\partial^2\hat{C}^{(e)}}{\partial z^2}\right]dxdydz$$

$$+\iiint_{V^{(e)}} N_i^{(e)}\left[v_x^{(e)}(t)\frac{\partial\hat{C}^{(e)}}{\partial x}\right]dxdydz + \iiint_{V^{(e)}} N_i^{(e)}\left[\rho_b^{(e)}K_d^{(e)}\frac{\partial\hat{C}^{(e)}}{\partial t}\right]dxdydz \quad ,$$

$$+\iiint_{V^{(e)}} N_i^{(e)}\left[\lambda(\Theta^{(e)}(t)\hat{C}^{(e)} + \rho^{(e)}K_d^{(e)}\hat{C}^{(e)})\right]dxdydz + \iiint_{V^{(e)}} N_i^{(e)}\left[\frac{\partial\hat{C}^{(e)}}{\partial t}\Theta^{(e)}(t)\right]dxdydz$$

(3.2.9)

amely egyenlet mátrixműveleteket használva az alábbi formára hozható:

$$\begin{Bmatrix} R_1^{(e)} \\ \vdots \\ R_n^{(e)} \end{Bmatrix} = \left[D^{(e)}(t)\right]\begin{Bmatrix} C_1 \\ \vdots \\ C_n \end{Bmatrix} + \left[A^{(e)}(t)\right]\begin{Bmatrix} \frac{\partial C_1}{\partial t} \\ \vdots \\ \frac{\partial C_n}{\partial t} \end{Bmatrix} \qquad (3.2.10.)$$

ahol $[D^{(e)}]$-t konvekciós(advekciós)-diszperziós mátrixnak, $[A^{(e)}]$-t szorpciós mátrixnak nevezzük. A két mátrix felépítését a következőképpen definiálhatjuk.

$$\left[D^{(e)}\right]=\iiint\limits_{V^{(e)}}\left\{\begin{bmatrix}\frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial y} & \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial z}\\ \vdots & \vdots & \vdots\\ \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x} & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial y} & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial z}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}D_x^{(e)}(t)\Theta^{(e)}(t) & 0 & 0\\ 0 & D_y^{(e)}(t)\Theta^{(e)}(t) & 0\\ 0 & 0 & D_z^{(e)}(t)\Theta^{(e)}(t)\end{bmatrix}\right.$$

$$\left.\begin{bmatrix}\frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \cdots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x}\\ \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial y} & \cdots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial y}\\ \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial z} & \cdots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial z}\end{bmatrix}\right\}dxdydz+\iiint\limits_{V^{(e)}}\begin{bmatrix}N_1^{(e)}\\ \vdots\\ N_n^{(e)}\end{bmatrix}\cdot v_x^{(e)}(t)\cdot\begin{bmatrix}\frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \cdots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x}\end{bmatrix}dxdydz$$

$$+\iiint\limits_{V^{(e)}}\begin{bmatrix}N_1^{(e)}\\ \vdots\\ N_n^{(e)}\end{bmatrix}\cdot\left[\lambda(\Theta^{(e)}(t)+\rho_b^{(e)}K_d^{(e)})\right]\cdot\left[N_1^{(e)} \quad \cdots \quad N_n^{(e)}\right]dxdydz$$

illetve általános esetben

$$\left[D^{(e)}\right]=$$

$$\iiint\limits_{V^{(e)}}\left\{\begin{bmatrix}\frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial y} & \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial z}\\ \vdots & \vdots & \vdots\\ \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x} & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial y} & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial z}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}D_{xx}^{(e)}(t)\Theta^{(e)}(t) & D_{xy}^{(e)}(t)\Theta^{(e)}(t) & D_{xz}^{(e)}(t)\Theta^{(e)}(t)\\ D_{yx}^{(e)}(t)\Theta^{(e)}(t) & D_{yy}^{(e)}(t)\Theta^{(e)}(t) & D_{yz}^{(e)}(t)\Theta^{(e)}(t)\\ D_{zx}^{(e)}(t)\Theta^{(e)}(t) & D_{zy}^{(e)}(t)\Theta^{(e)}(t) & D_{zz}^{(e)}(t)\Theta^{(e)}(t)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \cdots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x}\\ \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial y} & \cdots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial y}\\ \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial z} & \cdots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial z}\end{bmatrix}\right\}dxdydz$$

$$+\iiint\limits_{V^{(e)}}\begin{bmatrix}N_1^{(e)} & N_1^{(e)} & N_1^{(e)}\\ \vdots & \vdots & \vdots\\ N_n^{(e)} & N_n^{(e)} & N_n^{(e)}\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}v_x^{(e)}(t) & 0 & 0\\ 0 & v_y^{(e)}(t) & 0\\ 0 & 0 & v_z^{(e)}(t)\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}\frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \cdots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x}\\ \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \cdots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x}\\ \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \cdots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x}\end{bmatrix}dxdydz$$

$$+\iiint\limits_{V^{(e)}}\begin{bmatrix}N_1^{(e)}\\ \vdots\\ N_n^{(e)}\end{bmatrix}\cdot\left[\lambda(\Theta^{(e)}(t)+\rho_b^{(e)}K_d^{(e)})\right]\cdot\left[N_1^{(e)} \quad \cdots \quad N_n^{(e)}\right]dxdydz$$

a szorpciós mátrix pedig:

$$\left[A^{(e)}\right]=\left(\Theta^{(e)}(t)+\rho_b^{(e)}K_d^{(e)}\right)\cdot\frac{V^{(e)}}{n}\begin{bmatrix}1 & & 0\\ & \ddots & \\ 0 & & 1\end{bmatrix} \text{ vagy}$$

$$\left[A^{(e)}\right]=\iiint\limits_{V^{(e)}}\begin{bmatrix}N_1^{(e)}\\ \vdots\\ N_n^{(e)}\end{bmatrix}\left[\rho_b^{(e)}K_d^{(e)}+\Theta^{(e)}(t)\right]\left[N_1^{(e)} \quad \cdots \quad N_n^{(e)}\right]\cdot dxdydz$$

ahol n az e elemen belüli csomópontok száma, $V^{(e)}$ pedig az elem térfogata.

Minthogy a $[D^{(e)}]$ konvekciós-diszperziós mátrix és a $[A^{(e)}]$ szorpciós mátrix elemei a $v_x$, $v_y$ és $v_z$ áramlási sebességek, a $\Theta$ térfogati vízhányad és a diszperziós tényezők függvényei, így maguk a mátrixelemek is változhatnak az időben.

A konvektív-diszperzív és a szorpciós, egyes elemekre felírt elemi mátrixokból a modellezett tér összes elemére globális mátrixok írhatók fel úgy, hogy az addig az elemen belüli csomópontok n számának megfelelően nxn méretű mátrixokat az összes csomópont p számának megfelelő pxp méretű mátrixokká bővítjük, miközben a korábbi elemi mátrixokat a csomópontok sorszámainak megfelelően helyezzük el bennük, azaz

$$\left[D^{(gl)}\right]=\sum_{e=1}^{m}\left[D^{(e)}\right] \text{ és } \left[A^{(gl)}\right]=\sum_{e=1}^{m}\left[A^{(e)}\right] \qquad (3.2.11)$$

ahol $[D^{(gl)}]$ a globális konvekciós-diszperziós, $[A^{(gl)}]$ a globális szorpciós mátrix, és m az elemek száma az adott modellben.

Ekkor a súlyozott maradékok minimalizálásával a transzport-egyenlet a következő egyszerű formát nyeri:

$$\left[D^{(gl)}(t)\right]\{C\}+\left[A^{(gl)}(t)\right]\left\{\dot{C}\right\}=\left\{F^{(gl)}\right\} \qquad (3.2.12)$$

ahol $\{F^{(gl)}\}$ az egyes csomópontokban peremfeltételként megadott szennyezőanyag-áram, fluxus vektor.

A 3.2.12 egyenlet tartalmazza a koncentrációk idő szerinti első deriváltját. A kapott differenciálegyenlet megoldására a véges differencia módszert alkalmazzák, így a háló minden egyes rácspontjában a koncentráció értékeket, illetve azok időbeli változását kapjuk meg.

Legyen a koncentráció időbeli változásának függvénye C(t), a koncentráció t+Δt időpillanatban C(t+Δt). Tekintsünk egy ε időpontot a (t)-(t+Δt) időintervallumon belül. A függvény érintőjének iránya az ε pontban $\frac{\partial C}{\partial t}(\varepsilon)\cong\frac{C(t+\Delta t)-C(t)}{\Delta t}$ és a koncentráció az ε pontban $C(\varepsilon)=C(t)+(\varepsilon-t)\frac{\partial C}{\partial t}(\varepsilon)$. Bevezetve ω változót $\omega=\frac{\varepsilon-t}{\Delta t}$ alakban, a 3.2.12 egyenlet a $C(\varepsilon)=(1-\omega)C(t)+\omega C(t+\Delta t)$ formát nyeri. Ezt az összefüggést kiterjesztve az ismeretlen koncentráció-vektorra, valamint analóg módon a szennyezőanyagáram-vektorra (fluxusvektorra) az alábbi összefüggéseket kapjuk:

$$\{C\}=(1-\omega)\{C(t)\}+\omega\{C(t+\Delta t)\} \text{ és } \{F\}=(1-\omega)\{F(t)\}+\omega\{F(t+\Delta t)\} \qquad (3.2.13)$$

Behelyettesítve 3.2.13 egyenleteket a 3.2.12-be:

$$\begin{aligned}&\left(\left[A^{gl}(t)\right]+\omega\Delta t\left[D^{gl}(t)\right]\right)\{C(t+\Delta t)\}=\\&\left(\left[A^{gl}(t)\right]-(1-\omega)\Delta t\left[D^{gl}(t)\right]\right)\{C(t)\}+\Delta t\left((1-\omega)\{F(t)\}+\omega\{F(t+\Delta t)\}\right)\end{aligned} \qquad (3.2.14)$$

A megoldás a kezdeti feltételként ismert $C_0=C(x,y,z,t_0)$ értékek behelyettesítésével indul, majd a kapott egyenletrendszer megoldását keressük a $t=t_0+\Delta t$ időpontra. Ezután a számított $C_t$ koncentrációértékek felhasználásával újabb és újabb t+Δt időpillanatokban számítható a koncentráció a modellezett tér csomópontjaiban.

Előrelépéses differenciák módszere esetén ω = 0, ezért

$$\left[A^{gl}\right]\{C(t+\Delta t)\}=\left(\left[A^{gl}\right]-\Delta t\left[D^{gl}\right]\right)\{C(t)\}+\Delta t\{F(t)\},$$

a Cranck-Nicholson módszer esetén ω = 1/2, így

$$\left(\left[A^{gl}\right]+\frac{\Delta t}{2}\left[D^{gl}\right]\right)\{C(t+\Delta t)\}=\left(\left[A^{gl}\right]-\frac{\Delta t}{2}\left[D^{gl}\right]\right)\{C(t)\}+\frac{\Delta t}{2}\left(\{F(t)\}+\omega\{F(t+\Delta t)\}\right)$$

és végül a hátralépéses differenciák módszere esetén

$$\left(\left[A^{gl}\right]+\Delta t\left[D^{gl}\right]\right)\left\{C(t+\Delta t)\right\}=\left[A^{gl}\right]\left\{C(t)\right\}+\Delta t\left\{F(t+\Delta t)\right\}.$$

A megoldás az ismert $C_0=C(x,y,z,t_0)$ értékek behelyettesítésével indul, majd a kapott egyenletrendszer megoldását keressük $t=t_0+\Delta t$ időpontra. Ezután a számított $C_t$ koncentráció értékek felhasználásával további $t+\Delta t$ időpillanatokban számítjuk a koncentráció értékeit a modellezett tér csomópontjaiban.

### *3.2.2.4. Peremfeltételek megadása*

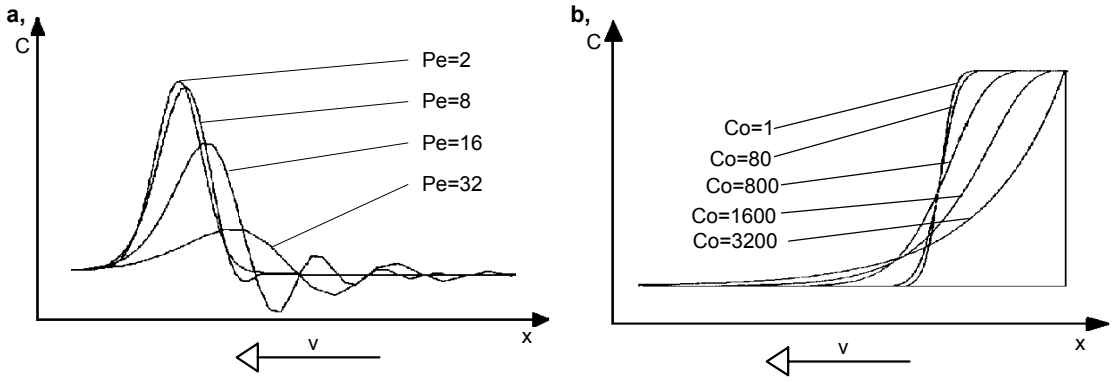
A végeselem módszer esetén is Dirichlet- és Neumann típusú peremfeltételeket adhatunk meg. Dirichlet-típusú peremfeltételeket akkor alkalmazunk, ha a koncentrációk értéke valamely rácspontokban ismertek (Dirichlet rácspontok). Ekkor az egyenletrendszert a megoldás előtt - az ismert koncentrációértékek behelyettesítésével - egyszerűsíteni kell, így az egyenletrendszer egyenleteinek darabszáma az ismert Dirichlet-pontok számával csökkenni fog, sőt a korábban homogén egyenletek inhomogénné válhatnak. A Neumann-típusú peremfeltételek ismert nagyságú szennyezőanyag hozamok peremfeltételként való alkalmazását jelentik. Ekkor a globális fluxusvektor néhány eleme nem zérus értékű, amit a számítások során tekintetbe kell venni.

A rácspontokon keresztül vehetjük figyelembe a szennyezőanyag nyelők és források hatását: a pontszerű hozamokat (pl. kúttal kitermelt vagy a tárolóközegbe visszainjektált oldott anyag hozamok) közvetlenül a rácspontra felírt egyenletekbe helyettesítjük, a felületi hozamok (pl. egy nagyobb területről beszivárgó szennyezések vagy a háttérterhelés elemei) esetén a beáramló hozamokat az érintett rácspontokra arányosan szétosztva vesszük figyelembe, ügyelve arra, hogy bármilyen megoszlást is alkalmazunk, a globális mátrixban összegzett fluxus egyezzen meg a valós értékekkel.

### *3.2.2.5. Az időintegrálásos eljárás stabilitási problémái*

A végeselemek alkalmazásával szerkesztett lineáris egyenletrendszer numerikus megoldása során - hasonlóan a véges differencia módszer numerikus hibáihoz - két jellegzetes hiba fordulhat elő: az instabilitás és az oszcilláció. Instabil megoldás esetén a valós és a numerikus megoldás közötti különbség növekedni kezd. A hiba elsősorban az időlépcső helytelen megválasztására vezethető vissza. Mellőzve a bizonyítást, a megoldás stabillá válik ha $\omega \geq 1/2$ értéket veszünk fel a 3.2.14 egyenletben.[17] A numerikus oszcilláció esetén a numerikus megoldás oszcillál a valós megoldás körül, tehát a numerikus megoldás lépésenként váltakozva egyszer a valós megoldásnál kisebb, másszor annál nagyobb értéket ad anélkül, hogy a két megoldás közötti különbség csökkenne. Ismét mellőzve a bizonyítást, az oszcilláció megszűnik, amennyiben $\Delta t$ és $\omega$ változókra a $\Delta t < \frac{\alpha}{1-\omega}$ egyenlőtlenség teljesül[18], ahol $\alpha$ az a legkisebb szám, amelyet az alábbi egyenletbe behelyettesítve és a determinánst kifejtve a $\left|\left[A^{(e)}\right]-\alpha\left[D^{(e)}\right]\right|=0$ egyenlőség bármely elemre teljesül.

König[19] megállapította a SICK100 végeselemes, szuperszámítógépes, szivárgáshidraulikai és transzport-modell számításokra kifejlesztett programrendszer stabilitás-vizsgálata során, hogy a numerikus oszcilláció annál nagyobb mértékű, minél nagyobb a konvektív (advektiv) transzportfolyamat jelentősége a diszperzív transzporthoz viszonyítva. Az erősebb oszcillációt a koncentrációcsúcsok elmosódása kíséri. Különböző $Pe=\frac{v\Delta l}{D}$, Peclet számok mellett elvégezve azt a modellkísérletet, amikor a konstans sebességgel jellemezhető áramlási térben egy haranggörbe alakú koncentráció-impulzus terjed tova, jól látható volt, hogy a Peclet szám növekedése mellett egyre nagyobb negatív koncentráció-értékeket kaptak a numerikus oszcilláció következtében, ami természetesen a valós rendszerben irreális (3.6/a.ábra).

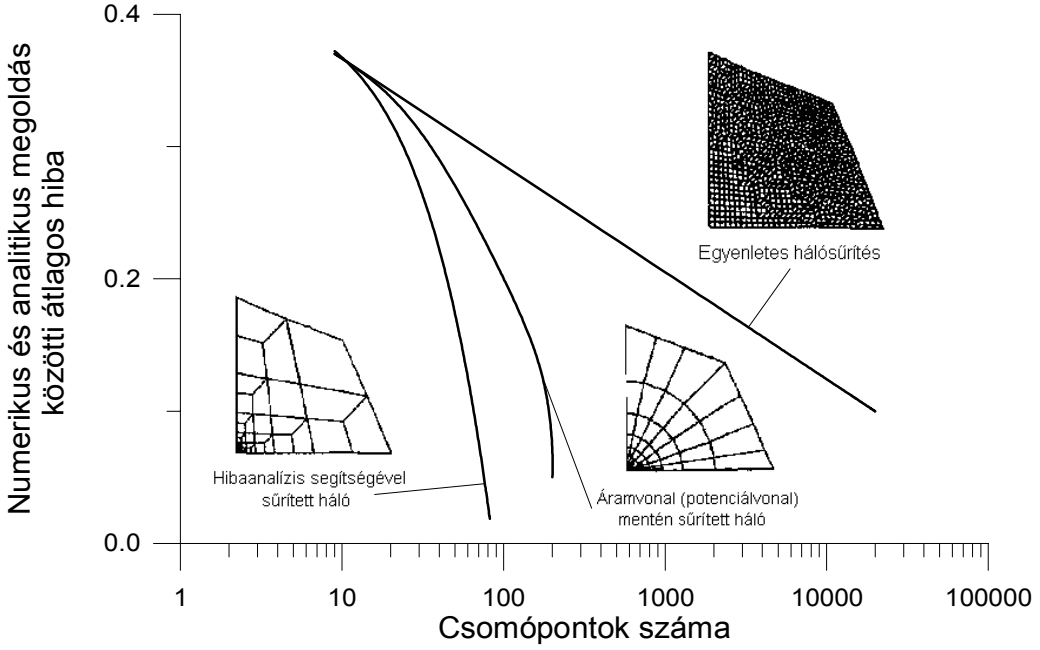



3.6.ábra: A végeselem módszer numerikus hibái a SICK100 programrendszeren: a koncentráció-eloszlás t=1000 s elteltével, harang alakú kiindulási koncentráció-impulzus, állandó szivárgási sebesség esetén (a, különböző Peclet-számok , b, különböző Courant-számok esetén) (König[55], 1993)

Tekintve egy v szivárgási sebességű homogén teret, ahol az egyes elemekre eső áramvonal maximális $\Delta l$ hossza konstans (azonos elemekre való bontás) a $\Delta t$ időlépcső változtatása egyben a Courant számok változtatását is jelenti. Mint az a 3.6/b.ábráról látszik, növekvő Courant számok esetén a valóságban éles határvonal egyre erősebben elmosódik.

Teljesen általánosan tehát megállapítható, hogy a végeselem módszerrel végzett számítások numerikus hibáinak csökkentése érdekében a térbeli diszkretizálás szintjét növelni kell, azaz az elemek számát növelni és ezáltal a hálót sűríteni kell. Ekkor azonban a számítás időigénye exponenciálisan növekszik, ezért ki kell választani azt az optimális hálósűrítési eljárást, amellyel az előforduló hibák a leghatékonyabban csökkenthetőek. A számítások időigényének csökkentése gyors egyenlet-megoldó algoritmusok segítségével lehetséges, azonos probléma megoldásához - az alkalmazott egyenlet-megoldó algoritmustól függően - akár egy-két nagyságrenddel kisebb idő is elegendő lehet.

3.7. ábra: A numerikus modell átlagos hibájának nagysága a hálósűrítési módszer függvényében




König (1993) szerint

Egy kútszektor vizsgálata során bebizonyosodott, hogy az egyenletes, az áramvonal mentén történő, valamint a hibaanalízis alapján történő hálósűrítés hatékonysága eltérő Az egyenletes sűrítés a numerikus és az analitikus megoldás közötti különbségként értelmezett hiba lassú csökkenését okozza, irreálisan magas elemszámok kialakítása mellett. Amennyiben az áramvonalak mentén mért távolságok, tehát közvetve az áramlási sebesség lépték szerinti növekedése képezik

a sűrítés alapját, akkor az elemszám növekedése kisebb és a hiba csökkenése gyorsabb. Legmegfelelőbbnek a hibaanalízis alapján történő hálósűrítés bizonyult, mikoris egy, az egyes elemek határvonalára számított hibafüggvény alapján csak a legnagyobb hibával jellemzett elemeket bontották további elemekre. (3.7. ábra)

## 3.3. Részecskeszemléletű szimulációs eljárások

### *3.3.1. Karakterisztika módszere*[20]

A karakterisztika módszere azon alapul, hogy a transzport egyenletet nem helyhez, hanem a mozgó vízrészecskékhez kötött koordinátarendszerrel írja le, így a transzport egyenletet ordinális differenciálegyenletté alakul. Másképpen megfogalmazva a módszer a koncentrációk változását nem álló helyzetből, hanem az áramló folyadékkal mintegy együtt mozogva szemléli. Tekintettel a transzportegyenlet ordinális differenciálegyenletté fajulására a karakterisztika módszere (többnyire együttesen a véges differencia módszerrel alkalmazva) kiküszöböli numerikus hibák nagy részét. Kiindulási alapként szükséges az áramlási sebességtér jellemzőit, azaz a sebességvektor irányának és nagyságának térbeli és időbeli változását ismerni, ezt többnyire véges differencia módszerrel határozzuk meg. Ezt követően olyan pontokat (részecskéket) helyezünk el az áramlási térben, amelyek az áramló vízzel együtt mozognak az áramvonal (karakterisztikus vonal) mentén és amelyeknek a helyzetét egy fix rácshálóhoz, praktikusan egy véges differencia hálóhoz viszonyítjuk A módszer folyamán az egyes részecskék megadott, de az időben változó szennyezőanyag-tömegeket jelképeznek. A számítás lépései a következők[21]:

A fix hálózathoz viszonyítva azonos módon elhelyezünk egy vagy több részecskét, majd minden részecskéhez hozzárendeljük a kezdeti koncentrációkból számított szennyezőanyag-tömegeket. Ezután hagyjuk a részecskéket az áramvonal mentén mozogni, az áramlási sebességvektornak megfelelően az időlépcső végéig. Egy tetszőleges P jelű részecske koordinátája számítható:

$$x_p(t+\Delta t) = x_p(t) + \Delta t \cdot v_x(x_p(t), y_p(t)), \quad y_p(t+\Delta t) = y_p(t) + \Delta t \cdot v_y(x_p(t), y_p(t))$$

Az időlépcső végén egy $C'_{i,j}$ átlagkoncentrációt számítunk a véges differencia módszer által kijelölt elemekre az oda érkezett részecskék és az általuk reprezentált szennyezőanyag-tömeg alapján, majd hozzárendeljük az elemekhez a $C'_{i,j}$ átlagkoncentráció és a kezdeti $C_{i,j}$ koncentráció átlagát: $C^*_{i,j} = \dfrac{C'_{i,j} + C_{i,j}}{2}$.

Ezután számítjuk a diszperzív hozamok miatt bekövetkező koncentrációváltozást az elemekben:

$$\Delta C^{(1)}_{i,j}(t) = \frac{D_{xx,i+1,j}(C^*_{i+1,j} - C^*_{i,j}) - D_{xx,i-1,j}(C^*_{i,j} - C^*_{i-1,j})}{(\Delta x)^2}\Delta t +$$
$$+ \frac{D_{xy,i+1,j}(C^*_{i,j+1} + C^*_{i+1,j+1} - C^*_{i,j-1} - C^*_{i+1,j-1}) - D_{xy,i-1,j}(C^*_{i-1,j+1} + C^*_{i,j+1} - C^*_{i-1,j-1} - C^*_{i,j-1})}{4\Delta x \Delta y}\Delta t +$$
$$+ \frac{D_{yx,i,j+1}(C^*_{i,j+1} - C^*_{i,j}) - D_{yy,i,j-1}(C^*_{i,j} - C^*_{i,j-1})}{(\Delta y)^2}\Delta t +$$
$$+ \frac{D_{xy,i,j+1}(C^*_{i+1,j} + C^*_{i+1,j+1} - C^*_{i-1,j} - C^*_{i-1,j+1}) - D_{yx,i,j-1}(C^*_{i+1,j-1} + C^*_{i+1,j} - C^*_{i-1,j-1} - C^*_{i-1,j})}{4\Delta x \Delta y}\Delta t$$

(a jelölések megegyeznek a véges differencia módszernél leírtakkal)

és a nyelők, források, és a bomlás miatti koncentrációváltozásokat:

$$\Delta C_{i,j}^{(2)}(t) = \frac{\Delta t q_{i,j}}{n_0 m_{i,j}}(C_{kut,i,j}(t) - C_{i,j}^{*}) - \lambda C_{i,j}^{*}\Delta t + \frac{S_{belső,i,j}}{n_0 m_{i,j}}\Delta t$$

Így megkapjuk a teljes koncentrációváltozást az egyes rácselemekben:

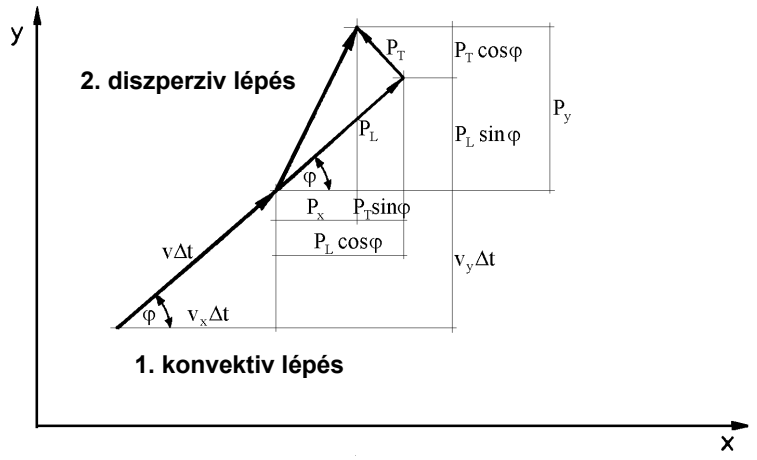
$$C_{i,j}(t+\Delta t) = C_{i,j}(t) + \Delta C_{i,j}^{(1)}(t) + \Delta C_{i,j}^{(2)}(t)$$

A kapott koncentrációk alapján újra elvégezhetjük a részecskék kijelölését és újabb időlépcsőre elvégezhető a számítás. A megoldás során a véges differencia módszerrel számított "koncentráció-növekmény" negatív mennyiség is lehet, és hogy ennek értéke ne haladja meg a részecske által reprezentált koncentrációt, a véges differencia módszer explicit megoldásánál leírt kritériumoknak teljesülniük kell. A számítások pontosságát növeli az alkalmazott rácsháló finomítása. Tovább növelhető a pontosság, amennyiben rácselemenként több részecskét is felhasználunk a szimuláció folyamán.

Bár az itt említett példa síkszivárgást tételezett fel, azonban a módszer többrétegű esetre is alkalmazható. Halász[22] (1987) a hazai pliocén-pleisztocén korú, váltakozóan agyag és homok rétegekből álló (kvázi háromdimenziós eset) sokszintes tárolók esetére mutatja be az áramvonalak meghatározásának módját , majd a módszerrel egy vízbázis külső hidrogeológiai védőidomát határozza meg. A módszer alapvetően a gyenge oldatok szivárgásának vizsgálatára kifejlesztett konvektív transzport modell, de a szerző kiterjeszti azt a szennyezőanyagok degradációjának és adszorpciójának számítására is.

### *3.3.2. A véletlen bolyongás módszere*

A véletlen bolyongás módszerének alapötlete az, hogy a szennyezőanyag porózus közegbeli szóródása, diszperziója, legyen az a mechanikai diszperzió, vagy a molekuláris diffúzió hatására bekövetkező szóródás, véletlen jellegű (stochasztikus) folyamat. Más szóval: bontsuk a teljes szennyezőanyag tömeget kisebb és megfelelően nagy számú egységekre, és ezzel a nagyszámú részecskével egyenként szimuláljuk az áramlási sebességvektor iránya és nagysága által egyértelműen meghatározott konvektív áramlásból eredő elmozdulásokat, majd erre szuperponáljuk a stochasztikus diszperzív transzport-jelenségeket. (3.8.ábra)




3.8.ábra: A részecske mozgását konvektív és diszperzív lépések szuperpozíciója határozza meg

A módszer előnyei[23], hogy:

- Nincs az egyenletnek megoldandó diszperziós tagja, az ezt helyettesítő rész mindössze mintegy 10 programsor, ezért a számításokhoz szükséges gépidő kicsi.
- Csak egyetlen koordinátarendszert és a konvektív áramlások számításához felhasznált véges differencia hálórendszert kell alkalmazni.

- A koncentrációk eloszlását csak azokban az időpillanatokban kell számítani, amikor azok érdekesek.
- A részecskéket csak a szennyezett területen lehet felvenni, a szennyezéstől távol eső területeken kisebb ismeretesség és ennek következtében pontatlanabb adatrendszer is megengedhető.
- A megoldások egymásra szuperponálhatók, így tetszés szerinti számú részecskével végezhető el a szimuláció anélkül, hogy memóriaproblémák lépnének fel.
- A tradicionális numerikus hibák (Undershoot-Overshoot jelenség, numerikus diszperzió) nem lépnek fel.

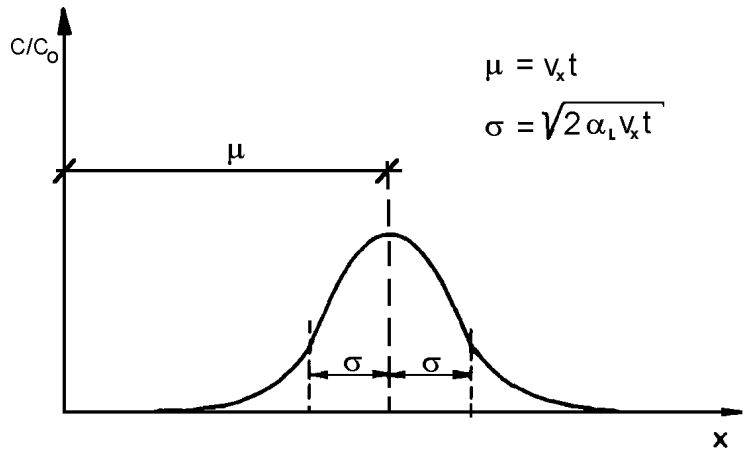
A módszer hátrányai:

- Durva tér- és időbeli felosztás esetén nagyobb koncentráció-változások fordulhatnak elő, mint a kezdeti koncentráció érték, tehát "negatív koncentráció-értékek" számítását a módszer elve nem zárja ki.
- A koncentráció-eloszlás képe alacsony számú részecske felhasználásakor nem esztétikus és nem is reális
- A módszer megkívánhatja speciális esetekben igen nagy számú részecskék használatát. (A részecskék száma a gyakorlatban általában nem haladja meg a 10 000 darabot.)

### *3.3.2.1. A véletlen bolyongás egydimenziós esetben*

Példaképpen jusson M tömegű szennyezőanyag egy vízadóba, ahol az áramlás iránya megegyezik az x koordináta tengellyel és sebessége $v_x$. Ekkor a koncentráció távolság és az idő függvényében[24] $C(x,t)=\frac{C_0}{\sqrt{4\pi\alpha_L v_x t}}\exp\left(-\frac{(x-v_x t)^2}{4\alpha_L v_x t}\right)$, ahol $C_0=\frac{M}{n_0 wm}$ és ahol $n_0$ a szabad hézagtérfogat, m a víztartó réteg telített vastagsága és w a víztartó szélessége. Összevetve az egyenletet a Gauss-féle normáleloszlás függvénnyel (pl. Steiner[25], 1990) látható, hogy a két egyenlet identikus, amennyiben $T=v_x t$, és $\sigma=2\alpha_L v_x t$. Az ennek a függvénynek megfelelő részecske-eloszlás véletlenszerűen generálható, ha felosztjuk az M szennyezőanyag tömeget n részre a t=0 időpontban és az x=0 helyen. Az egyes részecskék helyzetét ezek után számíthatjuk: $x=v_x t+Z\sqrt{2\alpha_L v_x t}$, ahol Z egy normális eloszlású véletlen szám, amelyeknek az átlaga 0, és a szórása 1. Az eredményül kapott áramlási utak hossza pedig x, amelynek átlaga $v_x t$, szórása $\sqrt{2\alpha_L v_x t}$. (3.9. ábra)

Véges számú részecske esetén a koncentráció egyszerűen számítható: a teret felosztjuk Δx·m·w nagyságú elemekre és megszámoljuk, hogy az egyes elemekbe az adott időlépcső elteltével hány részecske jutott. Mivel az egyes részecskék egy meghatározott szennyezőanyag tömeget jelképeznek, ezek száma és a hézagtérfogat ismeretében a koncentráció meghatározható.




3.9.ábra: A koncentráció tapasztalati eloszlása, az analógia alapja

Amennyiben az áramlási sebesség a térben változik, a megtett út hosszát az alábbi módon lehet meghatározni:

$$x_p(0)=0,\quad x_p(t+\Delta t)=x_p(t)+v_x(x_p(t),t)\Delta t+Z\sqrt{2\alpha_L\left|v_x(x_p(t),t)\right|\Delta t}$$

Mint arra Ito[26] (1951) már rámutatott, a kapott egyenletek csak közelítőek. Annak érdekében, hogy a véletlen bolyongás módszerével számított koncentráció-eloszlás pontosan megfeleljen a transzportegyenletnek, a korábban felírt koncentráció-eloszlásfüggvény egyenletében a konvektív áramlást jelentő tagot egy kiegészítő taggal módosítani kell:

$$x_p(0)=x_0,\quad x_p(t+\Delta t)=x_p(t)+v_x^{'}(x_p(t),t)\Delta t+Z\sqrt{2D_L(x_p,t)\Delta t}$$

A változtatás elhanyagolható, ha $D_L$ longitudinális diszperziós tényező változása a térben ( illetve esetünkben az x tengely mentén) elhanyagolhatóan kicsiny.

### *3.3.2.2. A véletlen bolyongás módszerének kiterjesztése síkfeladatokra*

Az egydimenziós módszer analógiája alapján a véletlen bolyongás módszere kiterjeszthető síkfeladatokra is. Amennyiben az áramlás iránya megegyezik az abszcisszával, akkor[27]:

$$x_p(0)=x_0,\quad x_p(t+\Delta t)=x_p(t)+v_x^{'}(x_p(t),y_p(t),t)\Delta t+Z\sqrt{2\alpha_L\left|v_x(x_p(t),y_p(t),t)\right|\Delta t}$$

$$y_p(0)=y_0,\quad y_p(t+\Delta t)=y_p(t)+v_y^{'}(x_p(t),y_p(t),t)\Delta t+Z^{`}\sqrt{2\alpha_T\left|v_x(x_p(t),y_p(t),t)\right|\Delta t}$$

ahol $v_x^{'}=v_x+\dfrac{\partial D_L}{\partial x}$, $v_y^{'}=\dfrac{\partial D_T}{\partial y}$ és ahol Z és Z` két normáleloszlású véletlen szám.

Amennyiben az áramlás általános irányú, a diszperziós tényező tenzoriális mennyiséggé válik, ekkor:

$$x_p(0)=x_0,\quad x_p(t+\Delta t)=x_p(t)+v_x^{'}(x_p(t),y_p(t),t)\Delta t+P_x$$

$$y_p(0)=y_0,\quad y_p(t+\Delta t)=y_p(t)+v_x^{'}(x_p(t),y_p(t),t)\Delta t+P_y$$

ahol $v_x' = v_x + \frac{\partial D_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial D_{xy}}{\partial y}$, $v_y' = v_y + \frac{\partial D_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial D_{yy}}{\partial y}$, $P_x = \frac{v_x}{v} P_L - \frac{v_y}{v} P_T$,

$P_y = \frac{v_y}{v} P_L + \frac{v_x}{v} P_T$, $P_L = Z\sqrt{2\alpha_L v \Delta t}$, $P_T = Z'\sqrt{2\alpha_T v \Delta t}$ és $v_x = v_x(x_p(t), y_p(t), t).$,

$v_y = v_y(x_p(t), y_p(t), t)$, $v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$ .

A részecskék pillanatnyi helyzetének ismeretében az egyes elemek koncentrációját a $C_{i,j}(t) = \frac{Mn_{i,j}(t)}{Nn_0 m_{i,j} \Delta x \Delta y}$ képlettel számíthatjuk, ahol M N részre osztott, teljes szennyezőanyag tömege, $n_{i,j}$ az i,j hasábelembe jutott részecskék száma t időpontban, $m_{i,j}$ az elemben a vízzel telített réteg vastagsága, $n_0$ a szabad hézagtérfogat, Δx és Δy a véges differencia háló osztásköze.

A módszerrel nem csak egyszeri (pillanatnyi, instantán) szennyezőforrásokat, hanem állandó forrásokat is lehet modellezni. Ebben az esetben a szennyezőforrás helyén minden egyes időlépcsőben - a forrás aktivitásától függő darabszámú - újabb részecskékkel kezdjük el a véletlen bolyongást. A lineáris adszorpció figyelembevételére az áramlási sebességeket R késleltetési tényezővel osztjuk el, mivel a késleltetési tényezőt, mint a valós áramlási sebesség és az 50%-os koncentrációhoz tartozó front mozgási sebességének hányadosát definiáltuk.

Kémiai és radioaktív bomlás figyelembevétele kétféleképpen lehetséges. Egyfelől a bomlás ütemének megfelelően lehet az egyes részecskék által reprezentált $M_p(t)$ szennyezőanyag-tömeg mennyiségét időlépcsőnként csökkenteni : $M_p(t) = M_p(0) \cdot e^{-\lambda t}$

Másfelől lehet a degradáció ütemének megfelelően - kellően nagy számú részecske esetén - a bolyongó részecskék számát - a bomlás intenzitásával arányosan - redukálni.

### *3.3.2.3. A véletlen bolyongás módszerének hibái*

A koncentrációk számításához felhasznált háló osztását optimálni kell. A túl sűrű osztás esetén az egyes elemekbe jutó részecskék száma alacsony lesz, ezért durva eredményeket kapunk. Ritka hálóosztás esetén az egyes elemekbe jutó részecskeszám megfelelően nagy lehet, azonban az összes elemek száma annyira lecsökkenhet, hogy emiatt a kapott eredmények túlságosan nagy területre adnak átlag-értékeket és esztétikailag sem megfelelők. Kinzelbach[28] (1986) a hasábelemenkénti minimum 20 db részecskét tartja optimálisnak.

Prickett[29] és szerzőtársai azt állapították meg, hogy a megfelelő szennyezőanyag-felhő kialakulása érdekében az időlépcsőt úgy kell módosítani, hogy a konvektív lépés hossza sosem haladja meg a legkisebb rácsméret ötödét. Ezzel egyben biztosítja azt is, hogy a részecske ne legyen képes átugrani bármely nyelő felett anélkül, hogy azt észlelte volna. Hibalehetőség rejlik az áramlási sebesség hirtelen megváltozásakor. Ekkor előfordulhat, hogy a nagy áramlási sebességgel jellemezhető térrészből a részecske mélyen beugrik a stagnáló tartományba, ahol szinte csapdázódik. Ezt a problémát csak az időlépcső radikális csökkentésével lehet megoldani.

---

[1]Csanády, G.T.: Turbulent Diffusion in the Environment, 1973, D.Reidel Publ. Co. Dordrecht, Boston, 248.p.

[22]A. Ogata: Theory of Dispersion in Granular Medium, 1970, US Geological Survey Professional Paper, 411-I., US. Government Printing Office, Washington

[3]A. Ogata - R.B. Banks: A Solution of Differential Equation of Longitudinal Dispersion in Porous Media,1961, US Geological Survey Professional Paper, 411-A., US. Government Printing Office, Washington

[4] S.K. Gupta - R.N. Pandey: The Leaching Efficiency Criterion and its Evaluation during Reclamation of Saline Soils, 1980, Proc. of Int'l. Symp. on Salt Affected Soils, Karnal (India) pp.300-306.

[5] W.Kinzelbach: Groundwater Modelling (An Introduction with Sample Programs in BASIC), Elsevier, 1986, pp.201.

J. Bear - A.Verruijt: Modelling Groundwater Flow and Pollution, D.Reidel Publ.Co., 1987, p. 156.
Szabó I. - Kovács B.: Hulladékelhelyezés IV. A szennyezőanyagok terjedése, A modellezés elmélete és gyakorlata, 1995, Ipar a Környezetért Alapítvány, p. 270.

[6]W. Kinzelbach: Groundwater Modelling (An Introduction with Sample Programs in BASIC), Elsevier, 1986, pp.258.

[7]W. Kinzelbach: Groundwater Modelling (An Introduction with Sample Programs in BASIC), Elsevier, 1986, pp.259.

[8] A.E. Scheidegger: General Theory of Dispersion in Porous Media, 1961, Journal of Geophysical Res. 66(10), pp.3273-3278.

[9]C. König: Numerische Modellierung von Grundwasserströmungs und Stofftransportvorgängen am Niederrhein, 1993, in. Proc. of Theorie und Praxis, Numerischer Modelle in der Bodenmechanik, Sonthofen

[10]D.L. Reddel-D.K. Sunada: Numerical Simulation of Dispersion in Groundwater Aquifers, 1970, Colorado State University Hydrology Paper 41, p 79.

[11]Halász B.: Gyenge oldatok advektiv transzportjának számítása sokszintes felszín alatti tárolókban, 1987. Hidrológiai Közlöny, 67.évf. 5-6. pp.283-287.

[12]Székely F: Felszín alatti vizek konvektiv kémiai tömegtranszportjának numerikus modellezése, 1986, Hidrológiai Közlöny, 66.évf.4-5. pp.255-259.

[13]E.O.Frind: The Principal Direction Technique: A New Approach to Groundwater Contaminant Transport Modelling.1982, Proc. of 4th Intl. Conf. on Finite Elements in Water Resources, Hannover, Springer Verlag, pp.13/25-13/42

[14]W. Kinzelbach: Numerische Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser, 1985, Oldenburg Verlag, München

[15] J. Bear-A.Verruijt: Modelling Groundwater Flow and Pollution, D.Reidel Publ.Co., 1987, pp. 247-284.
Bojtár I. - Molnár Gy. - Nagy T.: A végeselem módszer alkalmazása síkbeli feladatokra, Műszaki Könyvkiadó, 1988, pp.97-129
P.S. Huyakorn-G.F. Pinder: Computational Methods in Subsurface Flow, Academic Press, 1983., pp.25-98., 181-228.
J. Istok: Groundwater Modeling by the Finite Element Method, American Geophysical Union, Water Resources Monograph Vol.13. pp.12-226.
W.Kinzelbach: Groundwater Modelling (An Introduction with Sample Programs in BASIC), Elsevier, 1986, pp.91-143., pp. 275-292.
Kurutzné Kovács M. - Scharle P.: A végeselem módszer egyszerű elemei és elemcsaládjai, Műszaki Könyvkiadó, 1985, pp.24-109.
Páczelt I. - Scharle P.: A végeselem módszer a kontinuummechanikában, Műszaki Könyvkiadó, 1987, pp.89-107.

[16]C. König: Numerische Modellierung von Grundwasserströmungs und Stofftransportvorgängen am Niederrhein, 1993, in. Mitteilungen Inst. für Bodenmechanik und Grundbau, TU Graz, Mitteilungsheft 10, Hrsg.: Prof. Dr. S. Semprich, pp. 178-192.

[17] L.Lapidus-G.F. Pinder: Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering, 1982, John Wiley and sons, New York, p.166.

[18] I. Fried: Foundations of Soil Mechanics, 1979, Academic Press, New York

[19]C. König: Numerische Modellierung von Grundwasserströmungs und Stofftransportvorgängen am Niederrhein, 1993, in. Mitteilungen Inst. für Bodenmechanik und Grundbau, TU Graz, Mitteilungsheft 10, Hrsg.: Prof. Dr. S. Semprich, p. 178.-192.

[20]W.Kinzelbach: Groundwater Modelling ( an Introduction with Sample Programs in BASIC ), 1986, Elsevier, pp. 293-297.
J.W. Mercer - Ch.R. Faust: Ground-Water Modeling: 1981, National Water Well Association pp.30-37.

[21]L.F.Konikow - J.D.Bredehoeft: Computer Model of Two-Dimensional Solute Transport and Dispersion in Groundwater,1978, Techniques of Water-Resources Investigations of the US Geological Survey, Chapter C2, US Government Printing Office, Washington p.90

[22] Halász B: Gyenge oldatok advektiv transzportjának számítása sokszintes felszín alatti tárolókban, 1987. Hidrológiai Közlöny, 67.évf. 5-6. pp.283-287.

[23]T.A. Prickett - T.G.Naymik - C.G.Lonnquist: A "Random-Walk" Solute Transport Model for Selected Groundwater Quality Evaluations, 1981, Illinois State Water Survey Bulletin, No.65. p. 103.

[24]J. Bear: Dinamics of Fluids in Porous Media, 1972, American Elsevier, New York, pp.764
W. Kinzelbach: Groundwater Modelling (An Introduction with Sample Programs in BASIC), Elsevier, 1986, pp.298-306.

[25]Steiner F.: A geostatisztika alapjai, 1990, Tankönyvkiadó, Bp. pp.21-22.

[26]K. Ito: On Stochastic Differential Equations, 1951. American Mathematical Society, New York

[27]W. Kinzelbach: Simulation of Pollutant Transport with the Random-Walk Method, 1990, Groundwater Monitoring and Management (Proc. of Dresden Symposium, March 1987) IASH Publication No.173. 1990, pp.265-279.

[28]W.Kinzelbach: Groundwater Modelling (An Introduction with Sample Programs in BASIC), Elsevier, 1986, pp.298-306.

[29] T.A. Prickett - T.G.Naymik - C.G.Lonnquist: A "Random-Walk" Solute Transport Model for Selected Groundwater Quality Evaluations, 1981, Illinois State Water Survey Bulletin, No.65. p. 103.

# 4. SZENNYEZÉS-TERJEDÉSI SZÁMÍTÁSOK FOLYAMATA, A SZÁMÍTÁSI ALAPADATOK FELVÉTELE, A MODELLEK KALIBRÁCIÓJA

A szennyezés-terjedési számítások eredményeinek reprezentativitását döntően befolyásolja a kiindulási adatok pontossága, ezért a továbbiakban a számítások folyamatának bemutatása után az egyes felhasznált paramétereknek az eredményekre való hatását ismertetem vázlatosan.

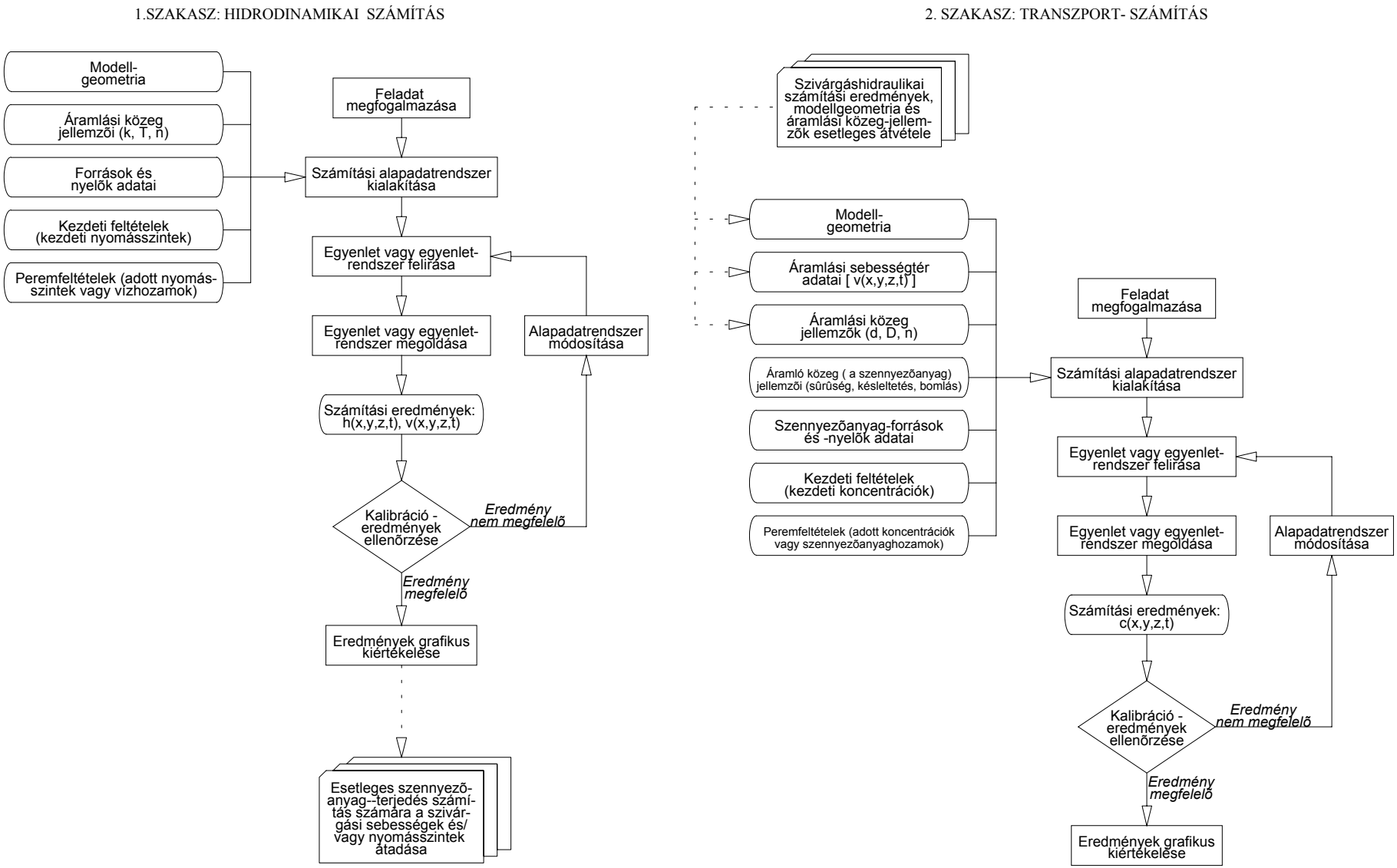
## 4.1. A szennyezés-terjedés modellezésének szakaszai

A szennyezés terjedés tágabb értelemben vett számításának folyamata általában két szakaszra bontható. Az első szakaszban a cél az áramló közeg sebességének és áramlási irányának meghatározása a modellezett térben. Ezt követi a számított szivárgási sebességeknek és a transzportegyenletnek felhasználásával - a meghatározott terjedési és anyagi tulajdonságokkal rendelkező - szennyezőanyag mozgásnak számítása (a modellezés második szakasza) (4.1.ábra). Az áramlási sebességek irányának és nagyságának, valamint annak időbeli változásának ismeretében az első szivárgáshidraulikai számítási lépcső elhagyható, és a transzportfolyamat szimulációja közvetlenül megkezdhető.

### *4.1.1. A modellezés lépései*

Mind a hidrodinamikai, mind a transzportmodellezési szakasz több lépésből áll (4.2.ábra):

**1.lépés: Az előkészítés:**
Az előkészítő munkafázis célja a feladat megfogalmazása (a modellszámítástól elvárható eredmények számbavétele), az adott feladat szempontjából megengedhető egyszerűsítések megfogalmazása, a modellezett tér lehatárolása, a célszerű matematikai számítási eljárás kiválasztása, amelynek segítségével az előzetesen felmért mennyiségű és minőségű adatállományból a körvonalazott feladat a megkívánt szinten megoldható.
**2. lépés A földtani és vízföldtani adatgyűjtés**
A munkafázis célja egy, a feladat megoldásához megfelelő szintű, ellentmondásmentes földtani és vízföldtani képnek a kialakítása. [A modellezett tér és tágabb környezete geológiájának és vízföldtanának megismerése és ennek alapján a megoldáshoz szükséges adatrendszer (a helyszíni és laboratóriumi mérések eredményei, földtani és vízföldtani térképek, hidrológiai, hidrometeorológiai adatok, stb.) összegyűjtése. A hidrodinamikai számítási szakasz elhagyása esetén a vízadó szivárgási viszonyaira vonatkozó adatrendszer kialakítása, esetleg korábbi hidraulikai számítások eredményeinek átvétele, a lehetséges szennyezőforrások feltárása és azok intenzitásának meghatározása, a szennyezett talaj és talajvíz térbeli lehatárolása analitikai adatok alapján. A szennyezés időbeli lehatárolása. A rendelkezésre álló adatrendszer kritikai értékelése, az esetleges ellentmondások kiszűrése.]
**3. lépés: Első számítási lépcső**
Az első számítási lépcső során elvégezzük az első próbaszámításokat, feltárjuk az adathiányokat és pótoljuk azokat. Az első számítások egyben biztosítják a kalibráció alapadatait. [A kiválasztott módszernek megfelelően a matematikai egyenlet (analitikus megoldás esetén) vagy egyenletrendszer (numerikus megoldás esetén) felírása a kezdeti és peremfeltételek felhasználásával. Az első eredmények számítása.]
**4. A modell kalibrálása és paraméterérzékenységi vizsgálat**:
A kalibráció során ismert valós folyamatokat szimulálunk, miközben a számítási eredményeket a valós eredményekhez közelítjük az alapadatrendszer szisztematikus változtatásával. A paraméterérzékenységi vizsgálatok során a már jól működő modellben az egyes felvett paraméterek racionális szélsőértékei mellett vizsgáljuk a modell válaszait, ezen keresztül az egész szimulált rendszer viselkedését ismerjük meg.




4.1. ábra: A modellszámítás szakasza

**5. Második számítási lépcső**
A második számítási lépcsőben elvégezzük azokat a szimulációkat, amelyeket az első szakaszban feltett kérdésekre a választ megadják. Ekkor elkészítjük az adott rendszer viselkedésére vonatkozó előrejelzéseket, a legkedvezőbb és a legkedvezőtlenebb eseteket szimulálva. Egy hidraulikai létesítmény esetén tervezett variánsok közül kiválasztjuk a leghatékonyabbat, esetleg az ismeretlen felépítésű képződményeket stochasztikus modellezéssel vizsgáljuk.

**6. Eredmények kiértékelése**
A kiértékelés folyamán összegezzük és ábrázoljuk az eredményeket, ezeknek alapján megadjuk feltett kérdésekre a szabatos választ. A további, mások által végzett munkafázisok részére megfelelő adaptációkat végzünk (pl. környezeti hatástanulmányhoz, létesítési vagy megvalósítási tervhez stb.).

### *4.1.2. A modellszámítás első szakaszának (a hidrodinamikai szakasz) adatigénye*

Mivel a számítás során az áramlási sebességek meghatározása a célunk, ezért a modellezett térben a hidraulikus potenciál, azaz a nyomásszint értékek meghatározására törekszünk. Ennek ismeretében az áramlás sebessége a Darcy-törvény segítségével - feltételezve, hogy a szivárgási tényező értéke ismert - meghatározható.

A transzport-számításokkal analóg módon (a kémiai anyagmérleg helyett) a vízmérleg elemeit határozzuk meg. Amennyiben a vizsgált közeg meghatározott térrészeibe a kialakuló hidraulikus gradiens következtében be- illetve kiáramló vízhozamok eredője nem zérus, akkor a térrészben tárolt víz nyomásszintje megváltozik, ami nyílt tükrű víztartó esetén egyben a víz szintjének emelkedését is jelenti.

A vízmérleg elemeinek számításához az alábbi paramétereknek az adott modell határain belüli térbeli és időbeli változásait szükséges ismerni:

- a vízadó és vízzáró képződmények geometriája,
- az áramlási közeg hidraulikus vezetőképességét leíró közegjellemzők: szivárgási tényező vagy transzmisszibilitás,
- a közegben a víz tárolódását befolyásoló, a tárolt vízmennyiség megváltozása és a nyomásváltozás közötti összefüggést meghatározó paraméterek, amely nyílt tükrű rendszer esetén - összenyomhatatlan folyadékot és pórusmátrixot feltételezve - a hézagtényező-hézagtérfogat, zárt tükrű rendszerben a tárolási tényező,
- a rendszerben található források és nyelők, mint például injektáló kutak, vízkivételek hozamadatai, és azok időbeli változása,
- a függőleges vízforgalom meghatározásához szükséges jellemzők: a felszín alatti vizeket tápláló beszivárgás intenzitásának mértéke, a szomszédos víztartókkal való kommunikáció során történő hozzáfolyás vagy elfolyás hozama, vagy azok meghatározásához az említett vízadók nyomásszintje, annak időbeli változása, valamint a rétegeket elválasztó féligáteresztő réteg, vagy rétegösszlet függőleges irányú szivárgási tényezője,
- a felszín alatti vizek vízszintjét befolyásoló felszini vízfolyások és tavak mértékadó vízszintjei, mederfenék-szintje, a kolmatált zóna vastagsága és áteresztőképessége.

A perem- és kezdeti feltételek megadásához pedig:

- a modell határán be- és kilépő hozamok és azok időbeli változása (Neumann-típusú határ),
- a modell határán a nyomásszintek és azok időbeli változása (Dirichlet-típusú határ),
- a nyomásszintek térbeli eloszlása egy kezdeti időpontban (kezdeti feltétel).

Bár az egyes paraméterek térben változnak, a számítások egyszerűsítésének érdekében a modellszámítások során sematizálással a számuk csökkenthető. Peck[1] és szerzőtársai elméleti vizsgálatai rámutattak, hogy egy átlagos 1200 elemből álló síkmodell (30x40 elem) esetén a számí-

tások összesen mintegy 38 000 egymástól különböző értékű változót kívánnának meg, amelynek számát szokásos módon 4 és 5 000 közé lehet csökkenteni geológiai, vízföldtani háttér-információk és a jellegzetes tendenciák ismeretének birtokában.

### *4.1.3. A modellszámítás második szakasza, a szennyezőanyag-terjedés számításának adatigénye*

A számítások második szakaszának célja a szennyezőanyagok mozgásának a meghatározása a rendszeren belül, azaz a koncentrációk idő- és térbeli változásainak a számítása, amihez a következő adatokra van szükség:

- az eltérő anyagi vagy terjedési tulajdonságokkal jellemezhető testek (geológiai képződmények) geometriája,
- a szivárgás sebessége és iránya a porózus közegben, valamint a szennyezőanyag mechanikai diszperzióját alapvetően meghatározó átlagos pórusbeli áramlási sebesség (meghatározásához a hézagtérfogat lokális értékének ismerete szükséges),
- a porózus áramlási közeg jellemzői: mértékadó szemcseátmérő, longitudinális és transzverzális diszperzivitás,
- az áramló közeg (szennyezőanyag) jellemzői: sűrűség, vizes közegben vagy az adott földtani képződményben mért diszperzió-állandó, a szennyezőanyag vízben való oldhatósága, a szennyezőanyagra vonatkozó megoszlási együttható vagy annak változása a koncentráció függvényében (Langmuir vagy Freundlich izoterma), szennyezőanyag bomlási együtthatója, radioaktív anyagok esetén a felezési idő,
- telítetlen közegbeli áramlás esetén a telitettség lokális értéke,
- szennyezőanyag források és nyelők adatai: a szennyezés pillanatnyi vagy tartós jellegének meghatározása, a vizsgált képződménybe jutó szennyezőanyag hozama, tehát az adott forrás aktivitásának mértéke, pontszerű források vagy nyelők esetén a kitermelt vagy injektált szennyezett víz koncentrációja és hozama, tartós szennyezések esetén a forrás aktív működési periódusának vagy periódusainak megállapítása.

Hasonlóan a szivárgási modellekhez a peremfeltételek Dirichlet vagy Neumann típusúak lehetnek, amelyek értékét meg kell állapítani. Amennyiben a határ a szennyezés által nem érintett területet jelenti, a koncentráció értéke állandó lehet (legtöbbször így értéke zérus), vagy megfelelhet a háttérterhelés értékének. Neumann típusú határ esetén a kémiai anyagáram mértéke határozandó meg.

Kezdeti feltételként egy tetszőleges, kezdeti időpontban mért koncentráció-eloszlás használható fel.

## 4.2. A modellszámítások adatigényének kielégítése

A modellszámítás egyik sarokpontja a megfelelő minőségű és megbízhatóságú adatrendszer kialakítása, mivel a modellek által szolgáltatott eredmények megbízhatósága arányos az alapadatrendszer reprezentativitásának mértékével.

### *4.2.1. Lokális értékek meghatározásának megbízhatósága, az adatrendszer értékelésének szempontjai*

Az előző fejezetekben felsorolt adatok meghatározására nagyszámú terepi és laboratóriumi módszer ismeretes. A vizsgálatok közös jellemzője, hogy mindannyiszor a terület egy-egy pontjára (mintavételi hely, kutatóárok, fúrás) és annak - a meghatározási módszertől és a paraméter térbeli változékonyságától függő - közeli környezetére vonatkozó értéket kapunk. Ezekből az adatokból általában inhomogén, változó megbízhatóságú adatrendszert sikerül kialakítani, ezért szükséges a rendelkezésre álló adatoknak következő szempontok szerinti értékelése:

<u>Az adat származása, megbízhatósága, méréstechnika fejlődése.</u> Az adat származásának és megbízhatóságának vizsgálata alatt a végzett mérések pontos dokumentációjának fellelhetőségét és

az azok alapján a mért érték pontosságára, reprezentativitására levonható következtetések összességét értjük. Tekintettel kell lenni a mérés óta eltelt idő alatt bekövetkezett esetleges méréstechnikai fejlődésre is.

A mérési eljárás megbízhatósága, közvetett vagy közvetlen jellege. A meghatározott paraméterek pontosságát erősen befolyásolja az alkalmazott eljárás közvetett vagy közvetlen jellege. Ilyen szempontok alapján a felszini (pl. szeizmikus vagy elektromos módszerek) vagy fúrólyuk (karottázs) geofizikai vizsgálatok eredményeit, azok közvetett jellege miatt elsősorban a területi eltérések és tendenciák kimutatására, mintsem a mérési értékek közvetlen felhasználására célszerű felhasználni, szemben például a zavartalan magminták vizsgálati eredményeivel.

A paraméter meghatározhatóságának pontossága. A felhasznált paraméterek meghatározhatósága egymástól jelentősen eltér. Jellegzetes például a szivárgási tényező meghatározásának bizonytalansága, ahol a különféle (terepi, laboratóriumi és számításos) meghatározási módszerekkel kapott eredmények gyakran akár nagyságrendben is különbözhetnek egymástól. Ezzel szemben például a víz- vagy nyomásszintek, hőmérsékleti értékek, elektromos vezetőképesség vagy pH értékek meghatározásánál a mérési értékek hibája - a transzportmodellezés szempontjából - gyakorlatilag elhanyagolható.

A mérési érték által jellemzett terület nagysága. A mért érték által jellemzett térrész korlátozódhat:

- egy adott (mag)mintára, (ilyen eset például a szivárgási tényező meghatározása permeabiméterrel, vagy szemeloszlásból),
- egy adott fúrási pont által jellemzett függőleges szelvényre, (pl. a rétegvastagság, a nyugalmi nyomás szintje stb.),
- egy adott mintavételi hely (fúrás, kút) közvetlen közelére, (pl. kutak próbaszivattyúzásából származó hidraulikai információk ),
- a vizsgált terület egy nagyobb, általában pontosan nem is lehatárolható térrészére, ( pl. rövid ideig tartó nyomjelzéses vizsgálat az áramlás irányának és sebességének meghatározására, vagy kismélységű mérnökgeofizikai vizsgálatok eredményei),
- az érintett terület egy több négyzetkilométer nagyságú régiójára, (pl. a nyomjelzéses vizsgálatok eredményei karsztos beszivárgási területek és források összefüggéseinek vizsgálatára, vagy a regionális nagymélységű geofizikai vizsgálatok szolgáltatta eredmények). Fontos információkat lehet nyerni egy-egy tartós szennyezés által okozott szennyezőanyag-felhő alakjából, annak időbeli megváltozásából, vagy a szennyezőanyag és a porózus mátrix anyagai között bekövetkező kémiai reakciók időbeli alakulásából.

Az adatrendszer kritikai értékelése. A felsorolt szempontok alapján egy olyan ellentmondásmentes adatrendszer kialakítására kell törekedni, amely a legmegbízhatóbb adatokon alapul, a kialakult geológiai, vízföldtani képnek és a geofizikai vizsgálatok által igazolt tendenciáknak megfelel. Az eltérő módszerek által okozott adatszórás kiküszöbölésének érdekében törekedni kell az egyes paraméterek tekintetében minél több azonos módon meghatározott mérési érték feldolgozására. A hidraulikai paraméterek meghatározásánál célszerű a számítás során alkalmazott elemi térrészek nagyságának megfelelő léptékű vizsgálati eredmények minél nagyobb számban történő felhasználása. A kutak környezetére vonatkozó mérési eredmények, mint pl. a próbaszivattyúzások eredményei egy nagyobb térrészre jellemzőek, így - a mintavétel esetleges véletlen hibáit kiküszöbölve - az adott területre leginkább jellemző értéket lehet a modellbe beépíteni. A tapasztalat azt mutatja, hogy még a legjobban feltárt területek vizsgálata esetén is rákényszerülünk kevésbé megbízható mérési értékek, esetleg becsült értékek alkalmazására.

A kiugró adatok geostatisztikai vizsgálata (keresztellenőrzéssel). A geostatisztikai módszereket a nem véletlen eloszlású adatok, pl. víznyomásszintek, koncentrációértékek stb. ellenőrzésére használhatjuk kellően nagyszámú adat esetén A módszer lényege, hogy az n észlelési pontot tartalmazó rendszerben egymás után egy-egy pontot kiválasztva a további n-1 észlelt érték felhasználásával a következő fejezetekben részletesebben ismertetett geostatisztikai interpolációs eljárással, a krigeléssel becslést végzünk a kitüntetett pontra. Ezek után összehasonlítjuk az ész-

lelt értéket a számított értékkel. A eltérést a számított és mért értékek négyzetének különbségével (variancia) jellemezhetjük. Amennyiben az adatrendszer homogén, akkor a két érték egymáshoz közelít. Azokon a területeken, ahol az észlelési pontok száma alacsony, vagy kiugró értékek vannak, ott a variancia-értékek kiugróan magasak lesznek, így ezeken a területeken esetleges további észlelésre vagy adatgyűjtésre lehet szükség. Természetesen magas variancia-értékeket okozhat az adott paraméter hirtelen, esetleg kiszámíthatatlanul szeszélyes megváltozása, ezekben az esetekben a módszer nem alkalmazható.

### *4.2.2. A lokális értékek kiterjesztése a modellezett térre (diszkretizálás)*

A modellalkotás során általában a modellezett térrész elkülönült pontjaiban (fúrólyukakban, a fúrásokból adott mélységben vett mintán stb.) ismertek a víz áramlását és a transzportfolyamatokat befolyásoló fizikai jellemzők. A feladat megoldása során a mért értékek alapján - földtani és vízföldtani háttér-információk felhasználásával - a felvett modell elemeire határozzuk meg a szükséges paraméterek értékeit valamilyen munkahipotézis alapján.

Zóna-alkotás. A zónák alkotása állandó paraméterekkel jellemezhető térrészek, úgynevezett zónák kijelölését jelenti. A zónák határvonalai többnyire valamilyen földtani, vízföldtani egység (jellemzően homogén képződmény, vetőkkel határolt terület, eltemetett folyómeder stb.) valós vagy feltételezett határán futnak. Adathiányos területeken a zónák határvonalának meghatározása történhet valamilyen munkahipotézis alapján, vagy például feltételezett áramvonalak mentén, így a transzportszámítás során a csak a diagonális diszperzív hozamok számítása esetén követünk el hibát a perem mentén.

A zónák kialakítása során alapvetően két problémát kell megoldani: egyrészt az egyes zónák helyzetét, méretét és alakját kell meghatározni, azaz a teret fel kell osztani egy-egy paraméterrel jellemezhető térrészekre, másrészt becsülni kell az egyes zónákra jellemző értékeket .

A zónák felvételét segíti a környezet képződésének ismerete, ennek alapján az egyes képződményeken belül további térrészek különíthetők el, esetleg a képződmény adott paraméter szempontjából történő változásának trendje lehet ismert, mint pl. egy víztartó képződmény elagyagosodása. A szemcseméret-eloszlás tendencia jellegű változásának ismeretében a szivárgási tényező térbeli eloszlását - néhány támpontot szolgáltató mérési adat segítségével, a modellezés szempontjából nagy területre - meg lehet határozni.

Az egyes zónákra jellemző értékek meghatározása történhet számtani átlagolással, területek szerint súlyozott átlagolással (Boldürev-eljárás), krigeléssel és azt követően egyenletes eloszlású pontokból történő átlagolással, valamint a későbbiekben - a modell-kalibráció egyik lehetséges módszereként - bemutatott inverz számítási eljárásokkal.

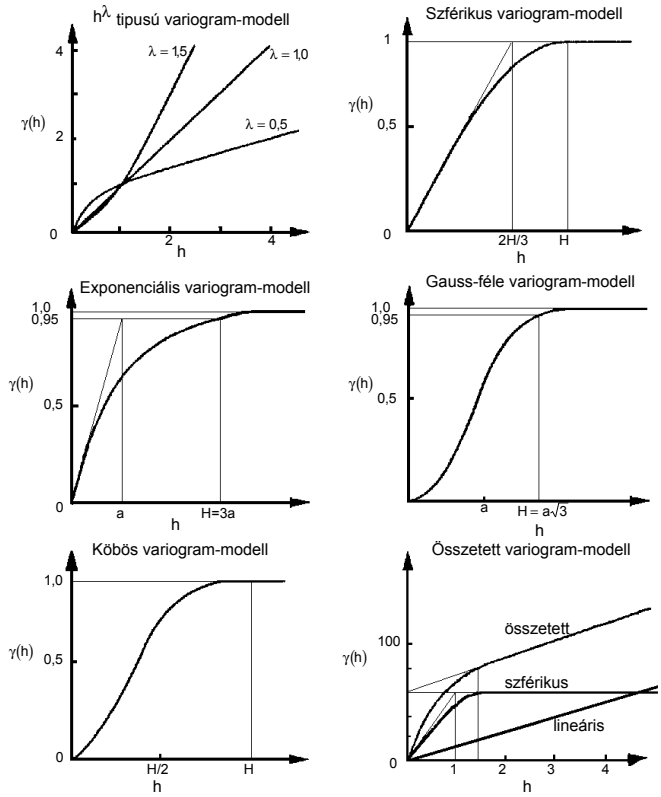
A krigelés. A krigelés a paramétereknek ismeretlen pontban, geostatisztikai alapokon nyugvó meghatározására alkalmas környező mérési értékek alapján. A módszer alapvetően egy súlyozott átlagszámítás. Az alkalmazott átlagszámítási súlyokat, geostatisztikai alapokon variogram-függvények segítségével határozhatjuk meg.[2]

Tapasztalati tény, hogy a nem véletlenszerű mérési értékek egy bizonyos távolságon, az úgynevezett H hatástávolságon belül egymással korrelálnak. Ezért határozzuk meg az rendelkezésre álló adathalmazból a létrehozható összes pontpár esetére a hasonlóság mértékét leíró varianciáját, ami a mért értékkülönbségek négyzetösszegének a különbsége. A kapott varianciákat rendeljük hozzá a kiszemelt két pont távolságához. Így $n = \frac{n_{adat}\left(n_{adat}+1\right)}{2}$ db távolsághoz rendelt variancia-értéket kapunk, ahol $n_{adat}$ az adatok száma. Amennyiben a pontpárokat a köztes távolság szerint csoportokba soroljuk és a csoportokhoz hozzárendeljük az adekvát variancia-értékek átlagát egy tapasztalati variogramot kapunk. Erre a tapasztalati variogramra egy elméleti variogram-függvényt illesztünk (4.1. táblázat, 4.2. ábra). A súlyozott átlagszámítás súlyait pedig a variogramokból leolvasható, illetve számítható kovariancia $COV\left[Z_{P_i}, Z_{P_{i+h}}\right] = C - \gamma(h)$ értéke adja.

4.1. táblázat: Az elméleti variogram-függvények gyakoribb típusai

| Variogram-modell típusa | Matematikai függvény | Feltétel |
|---|---|---|
| $h^{\lambda}$ - típus | $\gamma(h) = C \cdot h^{\lambda}$ | $\lambda<2$ |
| Szférikus modell | $\gamma(h) = C\left(\frac{3h}{2H} - \frac{1h^3}{2H^3}\right)$<br>$\gamma(h) = C$ | $0 \le h \le H$<br>$h > H$ |
| Gauss-modell | $\gamma(h) = C\left[1 - e^{-\left(\frac{h}{a}\right)^2}\right]$ | |
| Exponenciális modell | $\gamma(h) = C\left[1 - e^{-\frac{h}{a}}\right]$ | |
| Köbös modell | $\gamma(h) = C\left[7\left(\frac{h}{H}\right)^2 - 8{,}75\left(\frac{h}{H}\right)^3 + 3{,}5\left(\frac{h}{H}\right)^5 - 0{,}75\left(\frac{h}{H}\right)^7\right]$<br>$\gamma(h) = C$ | $0 \le h \le H$<br>$h > H$ |
| Összetett modell:<br>Lineáris és szférikus modell<br>Kombinációja | $\gamma(h) = K_1 h + C\left(\frac{3h}{2H_{szférikus}} - \frac{1h^3}{2H^3_{szférikus}}\right)$<br>$\gamma(h) = K_1 h + C$ | $0 \le h \le H_{szférikus}$<br>$h > H_{szférikus}$ |

A fenti táblázatban C=VAR(Z) az az érték, amelyhez a variogram-függvény a típusától függően nagy távolságok esetén közelit, illetve amelyet felvesz. Az exponenciális és a Gauss-típusú modell esetén a H hatástávolság definíciójáról (pl. $\gamma(H)=a=0{,}9 \div 0{,}95C$) önkényesen dönthetünk.




4.2.ábra: Az elméleti variogramok típusai (Peck et. al. , 1988 nyomán)

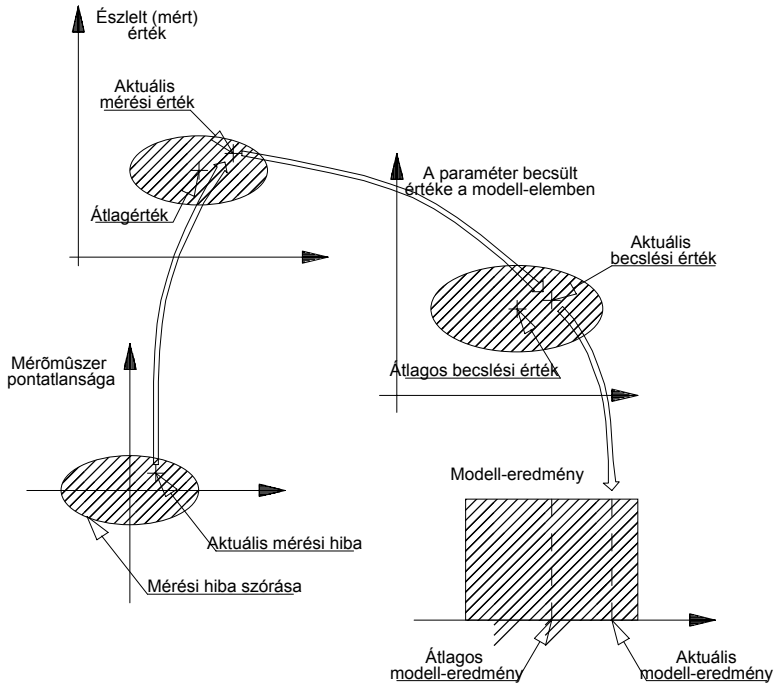
A kokrigelés alkalmazása. A kokrigelés során korrelációt tételezünk fel e becslendő paraméter és egy másik, általában jobban ismert statisztikai jellemzőkkel rendelkező paraméter között. A két adatsor felhasználásával azokon a területeken, ahol a becslendő paraméter interpolálásához szükséges információ hiányzik, keresztkorrelációs számítás alapján a második adatsor segítségével történhet a keresett paraméter becslése. A módszert Aboufirassi és Marino[3] alkalmazta először a hidrogeológiában. A vizsgált kaliforniai területen a transzmisszibilitás értékét becsülték ko-krigelés módszerével a transzmisszibilitás és az azzal korreláló tárolási tényező adatok alapján.

### *4.2.3. A modell-adatrendszer hibáinak okai és jellegzetességei*

Peck és szerzőtársai szerint a modell-adatrendszerek hibáinak három jellegzetes oka lehetséges:

- a felvett paraméterek önmaguk hibásak, vagy nem reprezentatívak,
- a származtatott értékek a számításhoz felhasznált mérési értékek hibáit továbbviszik,
- a modell általánosítása, egyszerűsítése során kialakított zonális jellemzők - a zónán belüli helyes mérési eredmények ellenére - nem reprezentatívak .

A hibák "átöröklődése". Sacher[4] szerint a hibák átöröklődésének folyamata a mérőműszer pontatlanságából eredő hibával kezdődik, majd a mérés és a mért érték alapján a jellemző paraméter becslésekor továbbnövekszik, ami végül az átlagos - várható - modell-eredménytől eltérő végeredmény létrejöttéhez vezet (4.3.ábra). Ez a hibaöröklődési lánc - közvetett információk esetén - tovább bővül a nyert információ interpretációjának pontatlanságaira visszavezethető hibákkal.

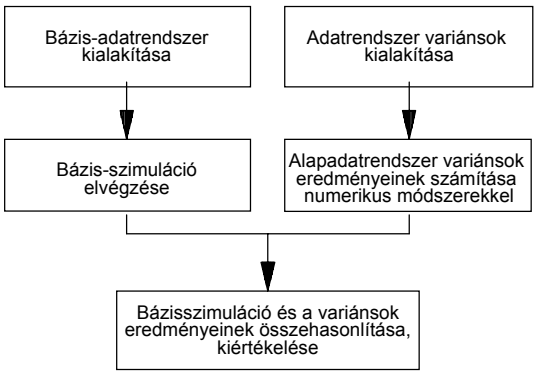



4.3.ábra: A hibák átöröklődésének sémája Mehra, 1978 és McLaughlin, 1978 nyomán[5]

A paraméter hibák és típusai. A paraméter hibák alatt transzport-szimuláció input adatainak a hibáit értjük. Típusai a mérési vagy észlelési, a regionalizálási (kiterjesztési), valamint a diszkretizálási hibák[6].

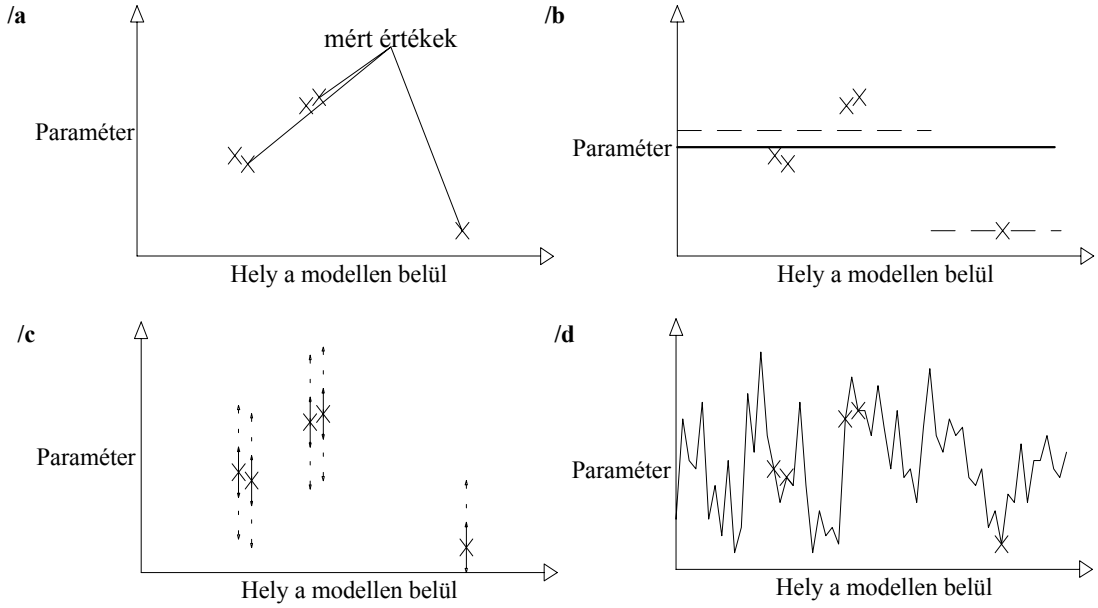
A *mérési hibák* kialakulásával itt nem foglakozunk. A mérési hibák hatását érzékenységi vizsgálattal (input sensitivity analysis) lehet követni, amelyet a 4.4.ábrán vázolt séma szerint végezhetünk el. Először előállítunk egy bázis-adatrendszert és az adott számítási módszerrel elvégezzük a bázis-szimulációt. Ezután a bázis adatrendszert a tapasztalt mérési eredmények tartományában fokozatosan módosítva újabb számításokat végzünk. A kapott eredmények és a bázis-

szimuláció eredményének összehasonlítása alapján megállapítható a vizsgált modell adott paraméterrel szembeni érzékenysége.




4.4.ábra: Egy alapadat-érzékenységi vizsgálat menete[7]

A *regionalizálási hibák* kialakulásának jellegzetes módját Smith[8] nyomán, a 4.5. ábra mutatja be. A modellezett térben kevés mért érték áll rendelkezésre. Az egyik tetszőleges modellparaméter öt mért értékét egy kiválasztott szelvény mentén a 4.5./a ábra mutatja. Az első döntési kényszer (egyben hibalehetőség) során először az döntendő el, hogy tekinthető-e a képződmény az adott jellemző mennyiség szempontjából homogénnek (4.5/b. folytonos vonal), esetleg további zónákra osztás szükséges(4.5/b. szaggatott vonal).Azt, hogy a két hipotézis közül melyik a helyesebb, azt a mérések pontosságának ismeretében lehet eldönteni. A 4.5./c ábrán a függőleges nyilak a mérési eredmények pontosságát jelzik. A folytonos nyilakkal jelölt nagyobb pontosságú mérések esetén jogos a több zónára bontás, míg a szaggatott nyilakkal ábrázolt alacsonyabb pontosságú mérések esetén az eltérést maguk a mérési hibák is okozhatják. A 4.5./d ábra a mérési pontok sűrítésének esetét mutatja be. Itt látható, hogy nem elég a terület egyenletes megismerése, hanem a megismerés mértékének is összhangban kell lennie a felhasznált paraméterek térbeli változékonyságával. Jelen esetben az öt észlelési pont szolgáltatta adatrendszer nem reprezentálja megfelelően a paraméter szelvény menti változását.




4.5.ábra: A paraméterhibák kialakulása (Smith nyomán)

A *diszkretizálás hibáinak* tanulmányozására és bemutatására számos vizsgálatot végeztek. Általánosságban megállapítható[9,10], hogy a legtöbb geostatisztikai interpolációs módszer (így pl. a krigelés) alkalmazása esetén a kis méretarányú mikro-változások elmosódnak, az anizotrópia lecsökken, a kiugró értékek (minimumok, maximumok) lesimulnak. Ennek a kedvezőtlen hatásnak a kiküszöbölésére egyéb speciális interpolációs eljárások, mint pl. a spline- és a szinusz

kardinálisz függvénnyel történő interpoláció[11] alkalmazása javasolható. Az interpolációs hibák akár irreális eredményekhez is vezethetnek, mint például az Gyöngyös és környékének vízadó rétegeinek vizsgálatánál[12] történt. Ebben az esetben a valóságban egymástól jól elkülönülő homokösszletek a krigelés interpolációs hibáinak hatására "összefogazódtak". Bár ez a hiba könnyen kiszűrhető volt, azonban sokszor a tévedés nem ennyire nyilvánvaló. A MOL Rt. szarvasi telephelye szennyezésének vizsgálata[13] esetén a zárttükrű vízadó homokréteg fedőjének jellegzetes, és az olajszennyezés terjedése szempontjából fontos kiboltozódása a krigelés hatására elmosódott.

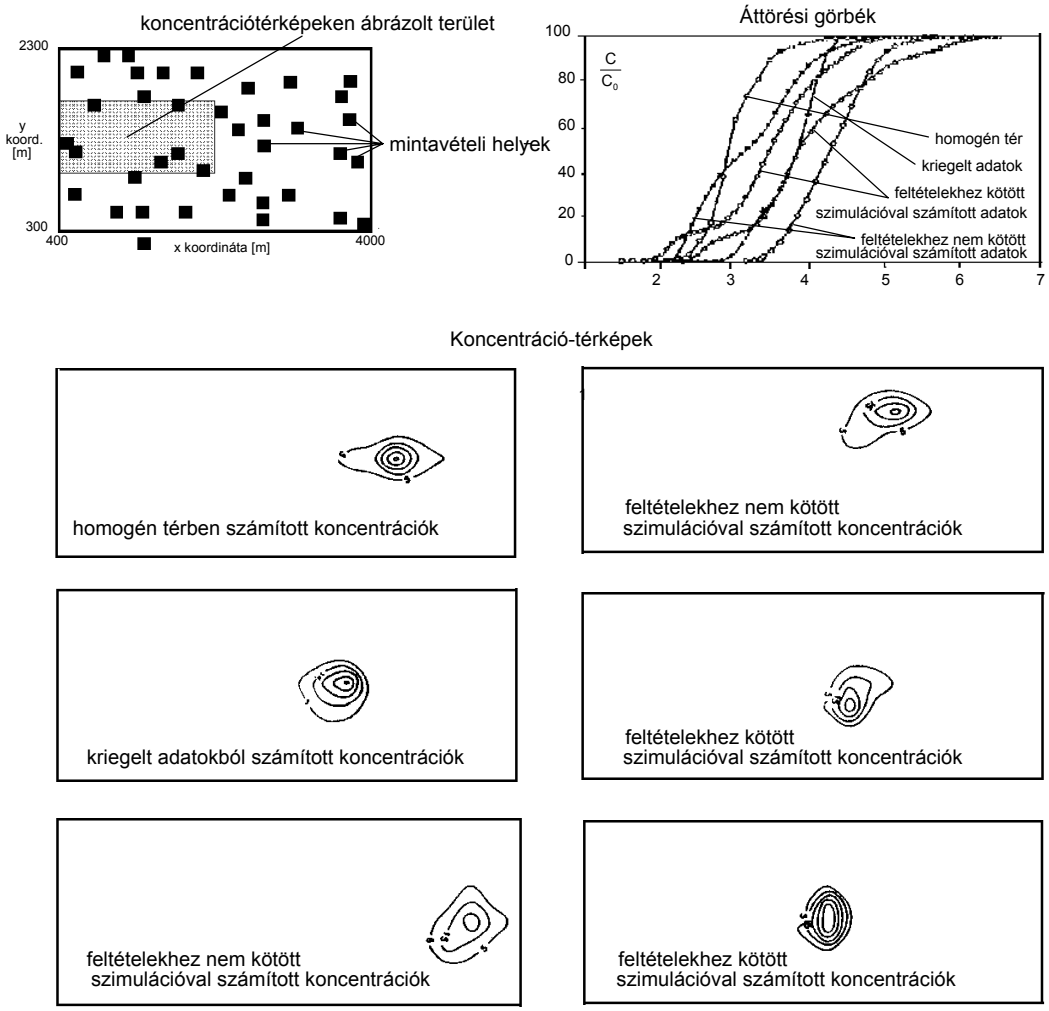
A zóna alkotás során elkövetett hibák a modellezett tér jellegzetességeinek félreismerésén alapulnak és éppen ezért nehezen korrigálhatók. Amennyiben a jellemzőnek tekintett érték nem reprezentatív, annak változtatására lehetőség van.

A geostatisztikai módszerek alkalmazásának korlátait Pekdeger és Schafmeister-Spierling vizsgálta. Tapasztalataik[14] szerint az alapvető statisztikai jellemzők: átlagérték, szórás, variancia a mintaszám csökkenésével jelentősen nem változik meg - ugyanakkor a variogramok jellemzői (maghatás, kovariancia) igen. Mivel az adatszám csökkenése a maghatás erős növekedéséhez és az anizotrópia csökkenéséhez vezetett, ezért az elméleti variogramok felhasználásával végzett krigelés során számottevő eltérések mutatkoztak, amely hibák a későbbi transzportszámítási eredményekbe átöröklődtek. A krigelési hiba (krigelés szórása) területi eloszlása az adatszám csökkenésével kevésbé egyenletes és egyre nagyobb, minek következtében a kisebb adathalmazból számított szivárgási tényező eloszlás fokozatosan elvesztette reprezentativitását.

Vizsgálva a geostatisztikai interpolációs módszerek megválasztásának hatását azonos alapadatokból egyszerű átlagképzéssel, krigeléssel, kétfajta feltételekhez nem kötött szimulációval és további kétfajta feltételekhez kötött interpolációval szivárgási tényező értékek adatait terjesztették ki egy 6-7 $km^2$ területű térrészre. A kapott adatrendszerrel egy pillanatnyi, ideális szennyezőforrás okozta szennyezés koncentrációit számították a karakterisztika módszerével.

A kapott áttörési görbék jellegzetesen eltértnek egymástól és megfigyelhető volt az is, hogy a krigeléssel származtatott adatállományban a nagyobb szivárgási tényező értékek előfordulási gyakorisága szignifikánsan alacsonyabb, mint az észlelési adatok között, aminek az oka a diszkretizálási módszerek simító hatása. [15] A kapott koncentráció eloszlásokon (4.6. ábra) megfigyelhető, hogy a lokális változékonyságokat jobban tükröző, nem feltételekhez kötött diszkretizálási módszer nemcsak a krigeléssel számított eredményekhez, hanem egymáshoz képest is jelentősen eltérő eredményekre vezetett ezért, szokás az ilyen szimulációk többszöri ismétlésével a legkedvezőtlenebb eseteket meghatározni. A krigelés esetén a lokális minimum és maximum értékek elmosódtak és ugyanígy elmosódott a longitudinális és transzverzális diszperzivitás közötti - a homogén teret feltételező esetben jól látható - anizotrópia is.

A fenti kísérletek alapján megállapítható, hogy elsősorban a kutatás kezdeti fázisában, amikor még kevés adat áll rendelkezésre, elfogadható közelítés a feltételekhez kötött szimuláció, mellyel a potenciális terjedési irányok, a legkedvezőtlenebb esetek meghatározhatók és ennek alapján a további munkához szükséges hipotézis felállítható. Az ismeretesség magasabb fokán, a kutatás későbbi fázisában, tehát megfelelő számú és eloszlású adat esetén alkalmazható a krigelés, amelynek simító hatását az eredmények kiértékelésénél figyelembe kell venni. Ha a simító hatás okozta hiba nem megengedhető, javasolható az ismert pontokban az értékeket nem megváltoztató más elveken alapuló interpolációs eljárások[16] alkalmazása.




4.6.ábra: A koncentráció-eloszlások izovonalas térképe a hat adatrendszer esetén (Schafmeister-Spierling és Pekdeger, 1989)

### *4.2.4. A számítási eredmények érzékenysége a nem reprezentatív adatokra*

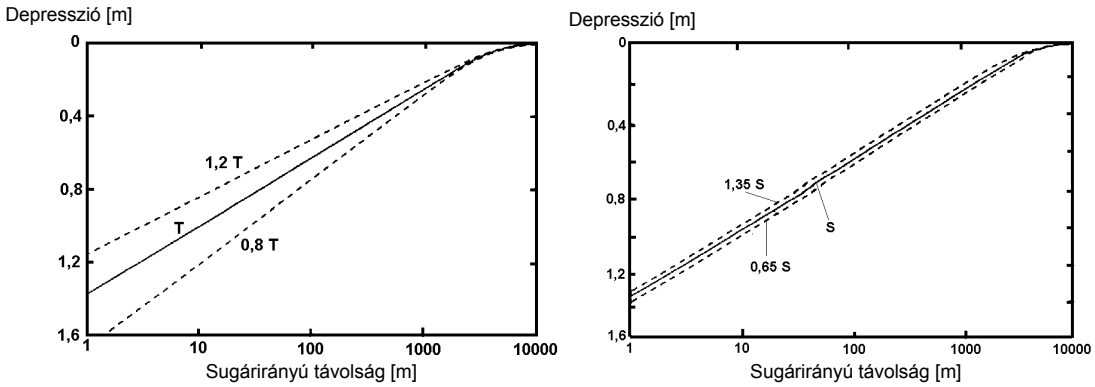
A földtani képződményekhez kapcsolódó modell-számítások egyik sajátsága, hogy a korábban részletezett transzport-egyenletben szereplő paraméterek meghatározási pontossága nagyságrendekkel kisebb, mint például a gépészeti alkalmazások hasonló paraméterei. További problémát jelent a közeg inhomogenitása a korábban említett nem földtani jellegű számításokkal szemben. A paraméterek pontatlanságaiból eredő hibák vizsgálatánál célszerű különválasztani a felszín alatti vizek mozgását, valamint a szennyezőanyag terjedését befolyásoló tényezők hatását.

A modellezés első szakasza, a hidrodinamikai számítási fázis paraméter-hibái piezometrikus szintre (depresszióra), azaz végső soron a szivárgási sebességre és annak időbeli és térbeli változására vannak hatással. Ezek a hatások a második szakasz folyamán a transzportmodellben, mint átörökített hibák jelennek meg. A transzport-egyenlet paraméter-hibái (a transzverzális és longitudinális diszperzivitás, a megoszlási együttható, a késleltetési tényező és a bomlási együttható) már közvetlenül a koncentráció időbeli és térbeli alakulását módosítják. Mint azt Nachtnebel és Bárdossy[17] megállapítják, a transzport-folyamatok reprezentativitásának biztosításánál elsődleges fontosságú a peremfeltételek által jelentősen befolyásolt nyomáseloszlás pontos ismerete, a rétegek geometriai és egyéb jellemzőinek pontossága az eredményeket kevésbé befolyásolja. Mindez a sebességmező lehetőség szerinti legpontosabb megismerésének szükségességét jelenti, amely a transzportegyenlet konvektív-diszperzív tagjainak meghatározó szerepére utal.

### *4.2.4.1. A felszín alatti vizek mozgását befolyásoló tényezők hatása*

A mérési hibák kiértékelésénél bemutatott elméleti érzékenységi vizsgálatokon túlmenően Peck és szerzőtársai[18] néhány analitikus megoldáson alapuló egyszerű érzékenységi vizsgálatot bemutattak további szerzők munkáit értékelve, elsősorban a nyomásszintek nem reprezentatív adatok hatására történő megváltozását vizsgálva. Ezek a vizsgálatok azért érdekesek, mert a transzportmodellek meghatározó alapadatai az áramlási sebességek, melyeket a hidraulikus gradiensből számítunk.

A transzmisszibilitás és a tárolási tényező hatását egy Q hozamú, m vastagságú zárt tükrű vízadóra telepített, teljes kút körül kialakuló depresszióstérben vizsgálhatjuk. Megállapíthatjuk, hogy míg a depresszió és egyben a szivárgási sebesség megváltozása a transzmisszibilitás hatására a kúttól mért távolsággal - és így a depresszió nagyságával is - arányosan csökken, addig a tárolási tényező változása esetében az eltérés a teljes területen közel azonos. (4.7.ábra). Mindez azt jelenti, hogy a transzmisszibilitás, illetve a szivárgási tényező értékek meghatározása során elkövetett hibák különösképpen a vízkivételi helyek közelében változtatják meg jelentősen a szivárgás számított sebességét, torzítva a transzportszámítások eredményeit

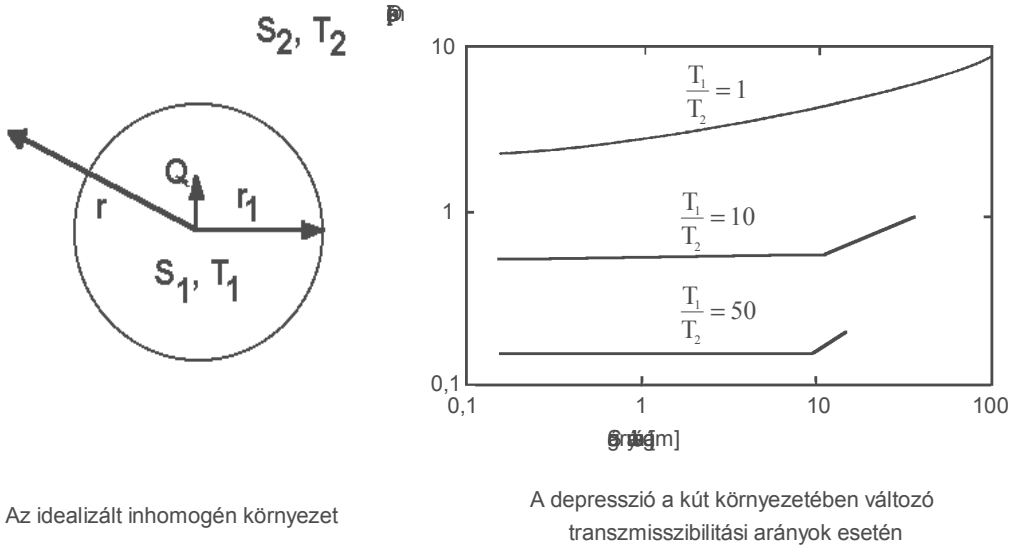



4.7.ábra A transzmisszibilitás és a tárolási tényező változásának hatása a depresszióra (Peck et. al 1988)

Homogén-inhomogén közeg hatását Barker és Herbert[19] nyomán egy idealizált inhomogén közegben vizsgálhatjuk A magányos kút ebben az esetben egy kör alakú terület középpontjában helyezkedik el, ahol a transzmisszibilitás és a tárolási tényező értéke eltér a környezetétől (4.8.ábra).

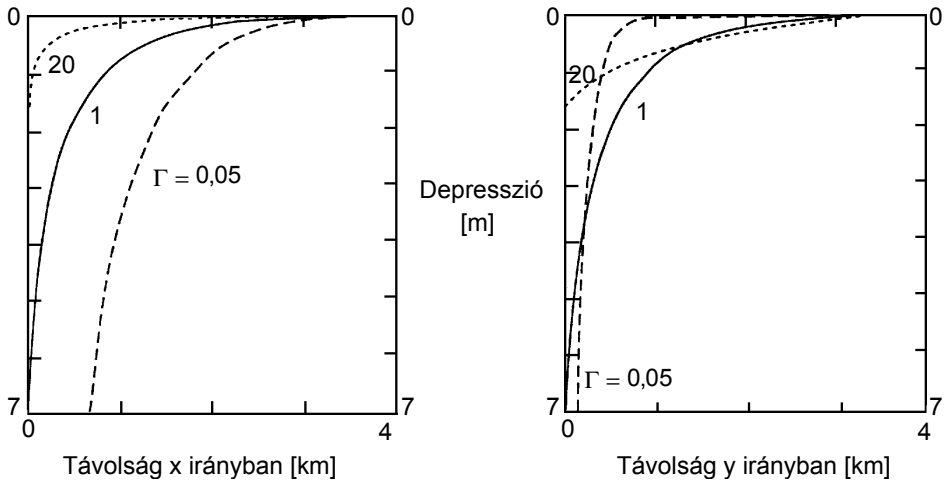
Meghatározva ezután a depressziót a sugárirányú távolság függvényében, különböző külső-belső transzmisszibilitási értékarányok esetére (4.8.ábra), láthatjuk, hogy amennyiben a kúttól távolabb eső területeken a transzmisszibilitás kisebb, mint a kút közelében, akkor ez a kút utánpótlódásának korlátozódását jelenti, ami a depresszió erős növekedéséhez vezet. Amennyiben a transzmisszibilitások aránya fordított, az utánpótlódás korlátlan és így a depressziót csak a $T_1$ értéke határozza meg. Látszik a határon a depresszió és egyben a szivárgási sebesség ugrásszerű megváltozása, ami a numerikus számítás divergenciáját okozhatja.

Ez a vizsgálat rámutat arra a gyakorlatban sokszor elkövetett hibára, amikor az oldalról történő utánpótlódást - a Dupuit-Thiem féle közelítés analógiájára - részproblémák vizsgálata esetén, mint pl. egy regionális jellegű vízkivétel - korlátlannak tekintjük, nem törődve a földtani viszonyok (rétegek kiékelődése, elagyagosodása, kiseprűződése), valamint esetleges egyéb vízkivételeknek az utánpótlódást korlátozó hatásával. Ennek eredményeként a modellezett rendszerbe a valóságot meghaladó mennyiségű víz táplálódik, így természetes módon nem jelentkezik például az Alföld rétegvízadóinak vizsgálata esetén a valóságban észlelt tendenciajellegű víznyomáscsökkenés.




4.8.ábra: A depresszió alakulása a sugárirányú távolság függvényében különböző transzmisszibilitás-arányok esetén (Barker és Herbert, 1982)

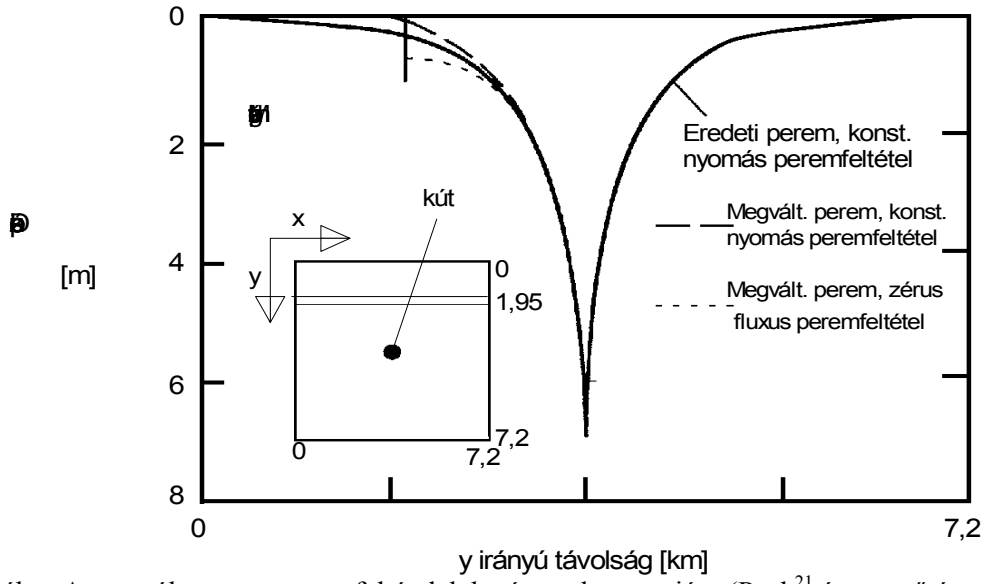
Az anizotrópia hatását Prickett és Lonnquist[20] eredményeinek felhasználásával mutathatjuk be. Definiáljuk az anizotrópia mérőszámát: $\Gamma = \frac{T_y}{T_x}$ A depressziókat egy kút környezetében való számítása alapján látható, hogy az anizotrópia hatására jelentősen deformálódik a depressziós tér és ennek következtében az áramlási sebességtér is. Mindez - elsősorban a pontszerű vízkivételek és betáplálások környezetében - a koncentráció-eloszlás torzulásához, az áramlási útvonalak megváltozásához vezet.(4.9. ábra)



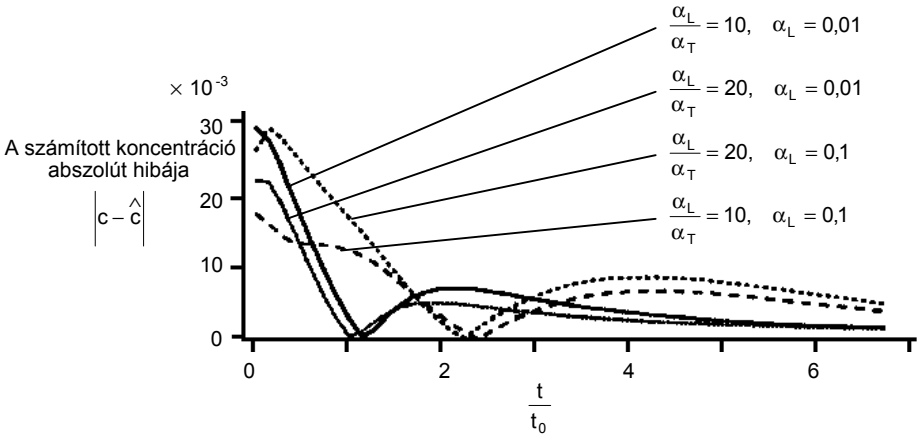

4.9.ábra: Véges differencia módszerrel számított depresszióértékek alakulása különféle anizotrópia-tényezők esetén (Prickett és Lonnquist in: Peck et. al., 1988)

A peremfeltételek bizonytalansága okozta hibákat az anizotrópia vizsgálatánál már bemutatott kút példáján mutathatjuk be. A 7.2 km oldalhosszúságú négyzet alakú területen, izotróp esetet feltételezve Dirichlet, majd Neumann típusú peremfeltételeket alkalmazva számították a depressziós tér alakját. Ezután a négyzet egyik oldalán a peremet az y=0 hely helyett az y=1,95 km-hez helyezték át. Mint azt Peck és szerzőtársainak (1988) eredményei (4.10.ábra) mutatják, a perem helyének megváltozása a 3 km < y < 7.2 km szakaszon semmilyen változást nem okozott, csak a megváltozott perem közelében. A változás a perem vonalában a legnagyobb, attól távolodva a hatása exponenciálisan csökken. Mindez arra mutat rá, hogy a becsült peremfeltételeket célszerű olyan helyen felvenni, ahol az a vizsgált területektől elegendően távol esik, így az ott elkövetett hiba az áramlási sebességteret számottevően nem zavarja.

A függőleges vízforgalom mértékének meghatározásánál (becslésénél) elkövetett hiba a gyakorlatban általában a vízszintnek a valóságos szintet meghaladó emelkedésével jelentkezik. Dirichlet típusú peremfeltételek alkalmazása esetén gyakran a nyílttükrű vízfelszín indokolatlanul "púpossá" válik, kidomborodik. A hiba kiszűrése a modell vízmérlegének, és a részletes geohidrológiai vizsgálattal meghatározott valóságos vízmérleg összehasonlításával lehetséges. A felülről táplálás hiányát részben az oldalról történő utánpótlódás emelkedése korrigálja, ezért ennek következtében komoly nyomásszintbeli eltérés ritkán alakul ki. Regionális problémák vizsgálata esetén azonban ez a közelítés nem helytálló, mert ez ezen modellek pontatlanságának egyik jelentős forrása.




4.10.ábra:A megváltoztatott peremfeltételek hatása a depresszióra (Peck[21] és szerzőtársai, 1988)



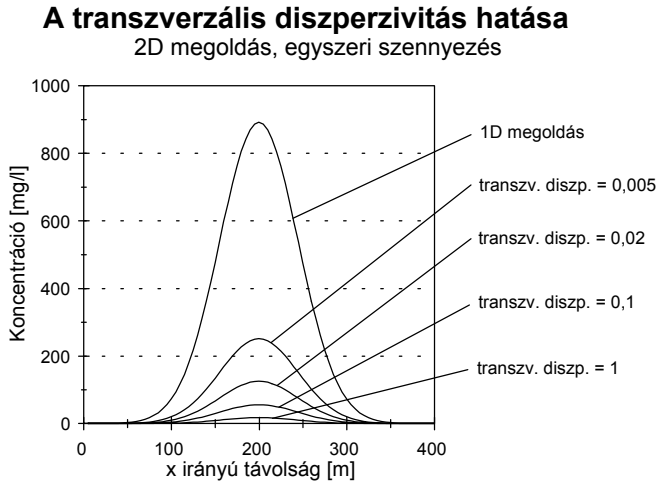

4.11.ábra: A SUTRA modell hibája különböző diszpezivitási értékek esetén

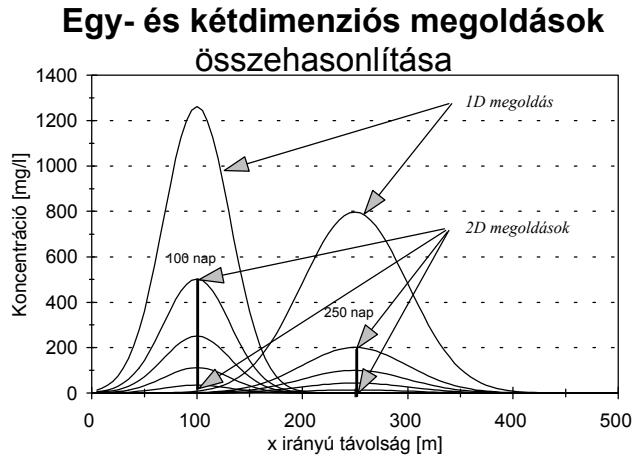
### *4.2.4.2. A szennyezőanyag-terjedés jellemzőinek hatása a modell-eredményekre*

A longitudinális és transzverzális diszperzivitás hatását a transzportegyenlet diszperzív tagjaira, Duffy és Lee[22] egy areális (nem pontszerű) forrás okozta szennyeződés dekontaminációjának példáján vizsgálta, mind a SUTRA[23] hibrid végeselem-véges differencia modellel, mind analitikus számítási eljárásokkal, annak érdekében, hogy a diszperzivitás értékek és azok arányának

függvényében a numerikus és analitikus módszerekkel számított eredményeket összevesse. Vizsgálatai alapján a számítás során tapasztalt hiba elsősorban a dekontamináció kezdeti szakaszán, tehát nagyobb koncentráció-gradiensek esetén jelentős és nagysága erősen függ a longitudinális és transzverzális diszperzivitás arányától. (4.11.ábra)

A longitudinális és transzverzális diszperzivitás jelentésének értelmezésére kézenfekvő a korábban bemutatott analitikus megoldáson alapuló számítási módszereket alkalmazni[24]. A vizsgált közeg egy 10 m vastag homogén réteg, ahol a szabad hézagtérfogat 0,1, a víz szivárgási sebessége 1 m/nap és a longitudinális diszperzivitás értéke 5 m. Ha számítjuk a koncentráció-eloszlást 100 kg tömegű szennyezőanyag dekontaminációjánál úgy, hogy a transzverzális diszperzivitás értéke 0,005 és 1m között változzon, látható, hogy a longitudinális és transzverzális diszperzivitás arányának csökkenése a koncentrációk jelentős csökkenését okozza (4.12.ábra).



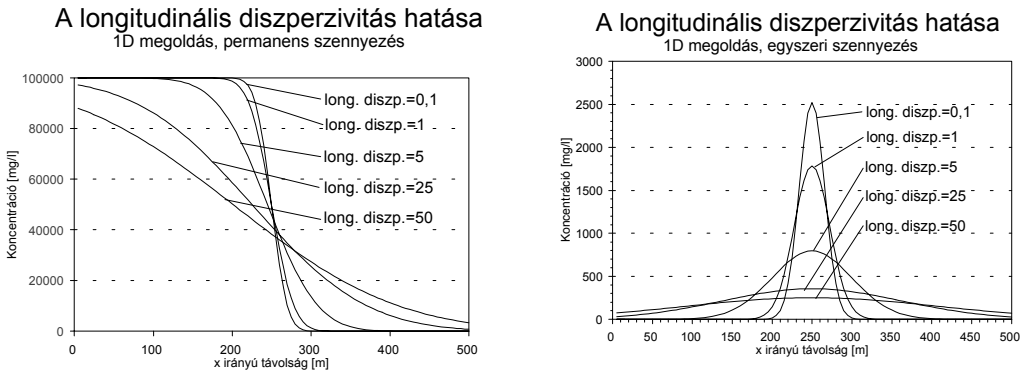

4.12.ábra: A transzverzális diszperzivitás hatása a kialakuló koncentráció-eloszlásra kétdimenziós analitikus megoldás alkalmazása esetén (Kovács-Szabó, 1995)

A valóságban az történik, hogy a diszperzív transzport 3.2. ábrán bemutatott diagonális hozamait változtatjuk a transzverzális diszperzivitáson keresztül. A diagonális hozamok növelésével a szennyezőanyag szóródása a szivárgás irányára merőleges irányban jelentősen megnövekszik, így végső soron a koncentrációmaximum csökkenéséhez vezet. Ez egyben megmutatja, hogy nagy a hiba, amikor az egyszerűbb egydimenziós számítást alkalmazzuk a megfelelőbb kétdimenziós helyett. Az egydimenziós számítás implicit módon tartalmazza azt a feltevést, hogy a diagonális diszperzív hozamok elhanyagolhatók, ami az esetek jelentős részében nem igaz. Az 1D megoldás leginkább ott állja meg a helyét, ahol a szomszédos térrészekben is hasonló fo-

lyamat zajlik le. Ilyenkor ezek a vizsgált térből a diagonális diszperzív hozamok miatt eltávozó szennyezőanyag fluxusa kompenzálódik a környezetből a vizsgált térbe irányuló fluxussal, így a peremhatás nem érvényesül. Megállapíthatjuk továbbá, hogy az egyszerűbb modell-alkotása érdekében történő dimenziószám csökkentés - okozta hiba nagysága az idővel arányosan csökken.

A diszperzivitás-értékek pontatlan meghatározása egyben az áttörési görbe alakjának megváltozásával is jár. Mivel a diszperzivitás értékek meghatározása a 2.3. fejezetben leírt módszerek bármelyikével körülbelül ±25% pontossággal lehetséges, így ennek a hibának a hatása az eredményekre - speciális esetektől eltekintve - kisebb jelentőségű.

További előny, hogy a diszperzivitás abszolút értékének hibája nem vezet a koncentráció-eloszlás alaki jellegének megváltozásához, szemben az arányok téves felvételével. (4.13.ábra)

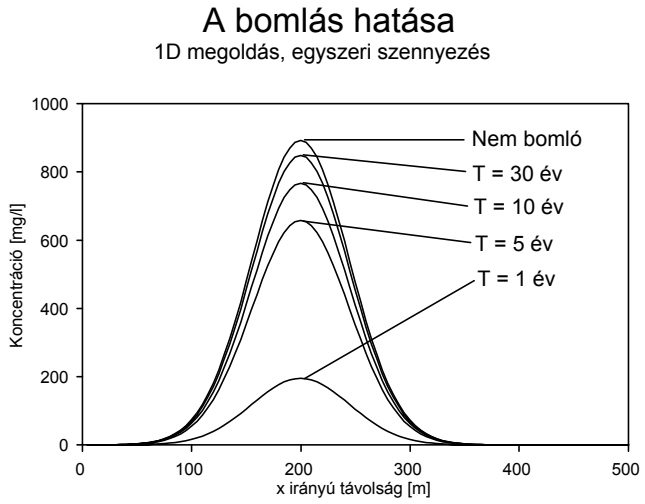



4.13.ábra: A longitudinális diszperzivitás változásának hatása a kialakuló koncentrációértékekre permanens, illetve pillanatnyi szennyezés esetén (Kovács - Szabó, 1995)

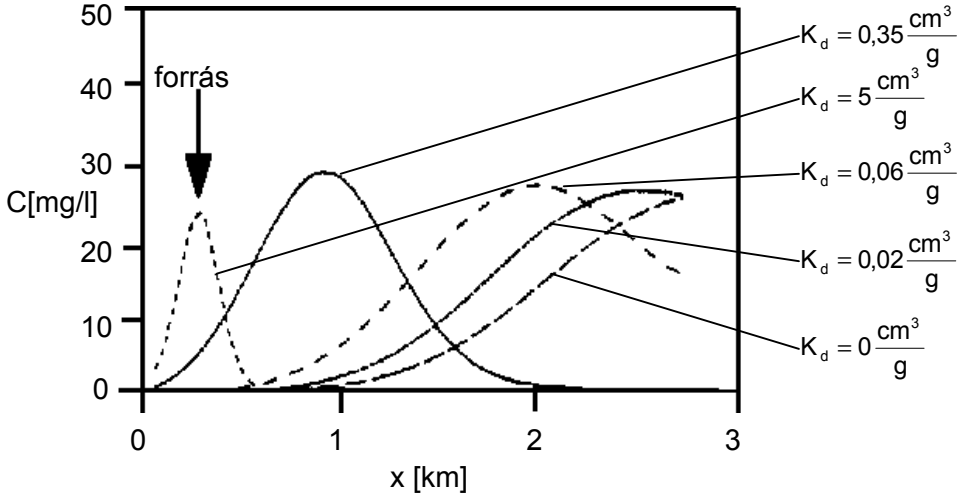
A bomlás hatását vizsgálva ugyanebben a rendszerben (4.14.ábra), 0,25 m/nap átlagos szivárgási sebesség mellett számítottuk egy 100 kg tömegű szennyezőanyag konvektív-diszperzív úton történő szóródását 1, 5, 10 és 30 év felezési idővel, illetve nem bomló szennyezőanyag esetén. A számított koncentrációmaximumot a bomlás gyorsasága egyértelműen determinálja, és, hogy a hatás egyre erősödik a szimuláció időtartamának növekedésével. Annak, hogy a transzport egyenletnél a bomlás miatti paraméterhibák ritkán súlyosak, az az oka, hogy a szennyezőanyag bomlási együtthatója, illetve - a radioaktív anyagok esetében - a felezési ideje általában pontosan ismert.

A transzportegyenlet paraméterei közül a lineáris adszorpció okozta késleltetést meghatározó mérőszámok megállapítása a legnehezebb. Ezért végeztek vizsgálatokat Bütow és szerzőtársai[25] a transzportegyenlet adszorpciós tagjára vonatkozóan. Számításaikban a $K_d$ megoszlási együttható számítási eredményekre gyakorolt hatását modellezték. Rámutattak arra, hogy a megoszlási együttható változhat az áramló közegben található anionok koncentrációjától, illetve az adszorbeálódó kation minőségétől függően. Számításaik során egy pontszerű forrás okozta koncentráció-eloszlást vizsgáltak egy dimenzióban, eltérő megoszlási együtthatók esetén. A 4.15. ábrán látható eredmények szórása jól mutatja a számítások érzékenységét az adszorpciós jellemzőkre.

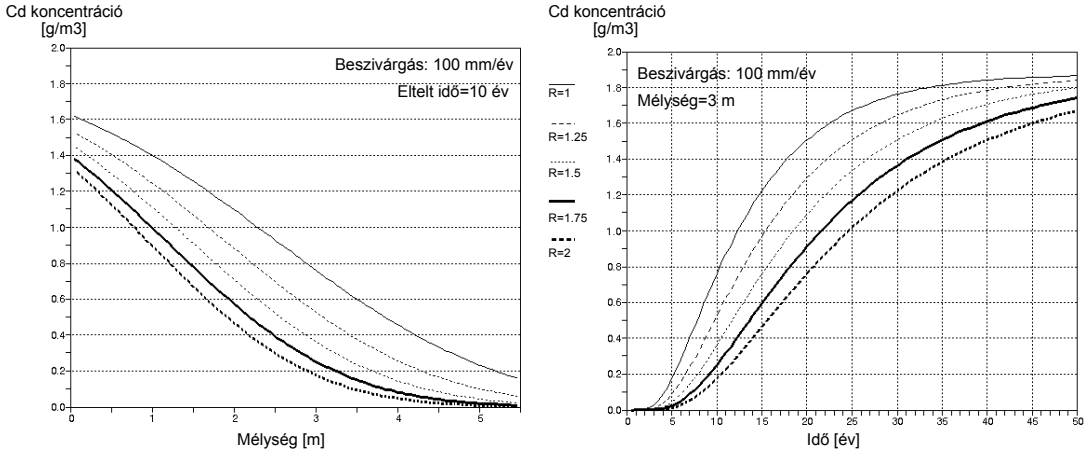
Az R késleltetési tényező hatását a peremartoni veszélyes hulladék tároló vizsgálata[26] során is tapasztaltuk. Az ott alkalmazott egydimenziós konvektiv-diszperzív-adszorpciós modellel végzett számítások eredményei alapján látható (4.16.ábra), hogy eltérő R késleltetési értékek mellett a koncentrációnak mind időbeli, mind térbeli (esetünkben mélységbeli) változása jelentősen eltér egymástól.




4.14.ábra: A felezési idő hatása a kialakuló koncentráció-értékékekre egydimenziós analitikus megoldás alkalmazása esetén (Kovács - Szabó, 1995)




4.15.ábra: Az áttörési görbék alakulása különféle megoszlási együtthatók esetén (Bütow et. al., 1990)




4.16.ábra: A késleltetés hatása a Cd koncentrációra a peremartoni hulladéklerakó környezetében
a, A koncentráció változása a mélység függvényében

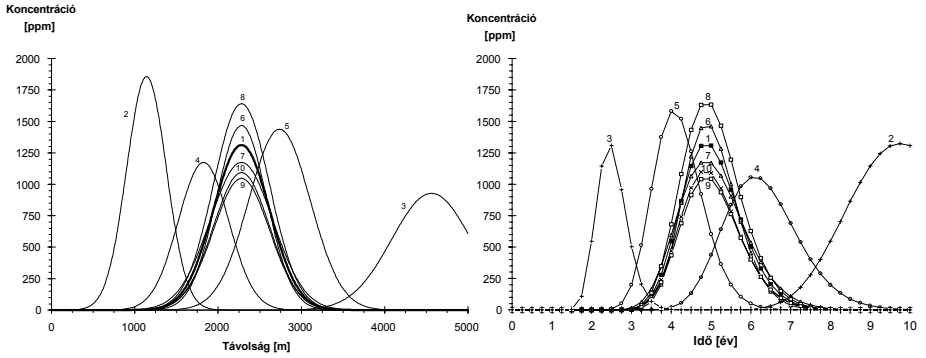
b, A koncentráció változása az eltelt idő függvényében
(Szabó és Kovács, 1993)

Ugyanakkor Duffy és Lee[27] azt is kimutatta, hogy jelentős késleltetés esetén a numerikus számítások során jelentkező hiba az időben állandóan nagy, mg R=1 esetén csak a szimuláció kezdetén, később nagysága jelentősen lecsökken.

A transzportegyenletekben szereplő <u>összes paraméter hatásának összehasonlító vizsgálatát</u> a szuhogyi veszélyes hulladéklerakó hatásvizsgálatához[28] végzett előzetes vizsgálat alapján mutatom be. A vizsgálat során tíz különböző paraméterkombinációval végeztem számításokat úgy, hogy azok segítségével a vizsgált paraméterek hatását a koncentráció alakulására megkapjam, mind az idő, mind a hely függvényében. Ennek érdekében először az egyes paraméterek jellemző értékeit határoztam meg, illetve a meghatározás hibájának alapján az adott paraméter előforduló maximális és minimális értékét megbecsültem. Az így kapott értékeket a következő táblázat tünteti fel:

| Paraméter | Szivárgási sebesség [m/nap] | Szabad hézagtérf. [-] | Longitudinálisdi szperzivitás [m] | Késleltetés [-] | Bomlási együttható [1/nap] |
|---|---|---|---|---|---|
| Jellemző érték | 1,5 | 0,15 | 25 | 1,2 | 0 |
| Becsült minimális érték | 0,75 | 0,12 | 20 | 1 | 0 |
| Becsült maximális érték | 3 | 0,18 | 31,5 | 1,5 | $10^{-4}$ |

A vizsgálat során először az alapadatsorral (jellemző érték) számítottam a koncentráció értékét a hely és az idő függvényében. Ezt követően az alapadatsort úgy módosítottam, hogy mindig csak egy paraméter minimális, vagy maximális értékét vettem figyelembe a reprezentatív érték helyett és elvégeztem a számítást. Így összesen kilenc további paraméterkombináció esetében számítottam a koncentráció értékeit. A kapott áttörési görbéket és koncentráció-eloszlásokat a 4.17.ábrán mutatom be. Az ábrákról jól látható, hogy a koncentráció-eloszlás jellegét a diszperzivitás, a szabad hézagtérfogat, valamint a bomlási együttható változása nem befolyásolja, ugyanakkor a szivárgási sebesség nagyságának, valamint a késleltetés értékének megváltozása igen. Mindez azt jelenti, hogy a felsorolt első három paraméter okozta hibák összegződnek, hatásuk erősítheti és gyengítheti is egymást, de a kapott eredmények jellegükben helyesek maradnak, azaz néhány észlelési érték alapján a számított koncentráció-eloszlás a valós helyzethez igazítható, a modell kalibrálható. Nem mondható el ugyanez a késleltetés és a szivárgási sebesség okozta hibákról, melyek az áttörési görbéket és a koncentráció-eloszlást is jelentősen módosítják. A gyakorlatban előforduló inhomogén áramlási térben ezek a hibák szinte korrigálhatatlanok.




Alapgörbe (1)
Minimális(2) vagy maximális(3) szivárgási sebesség
Minimális(4) vagy maximális(5) késleltetés
Minimális(6) vagy maximális(7) diszperzivitás
Minimális(8) vagy maximális(9) szabad hézagtérfogat
Maximális bomlási együttható(10)

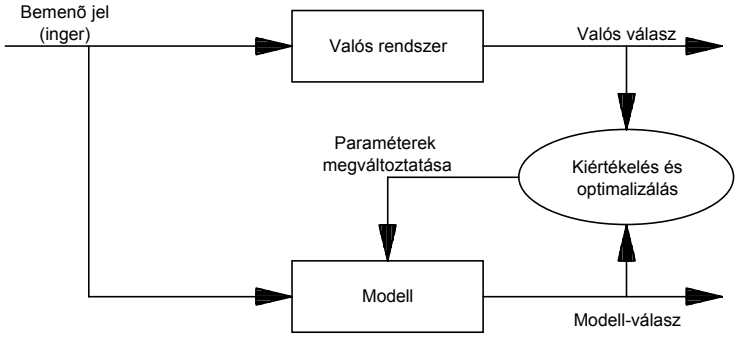
4.17.ábra: A szennyeződés-terjedési számítások alapadatérzékenységi vizsgálatának eredményei a szuhogyi lerakó adatrendszerének felhasználásával 1D analitikus megoldás esetén

A, A koncentrációk a forrástól mért távolság függvényében t=5 év időpontban
B, A koncentrációk az eltelt idő függvényében a forrástól mért 2250 m távolságban

Ez az érzékenységi vizsgálat alátámasztotta Bárdossy és Nachtnebel azon megállapítását, hogy a transzportmodellezés egyik sarokpontja a megfelelően reprezentatív áramlási tér kialakítása, a paraméterhibák előfordulási lehetőségének minimalizálása.

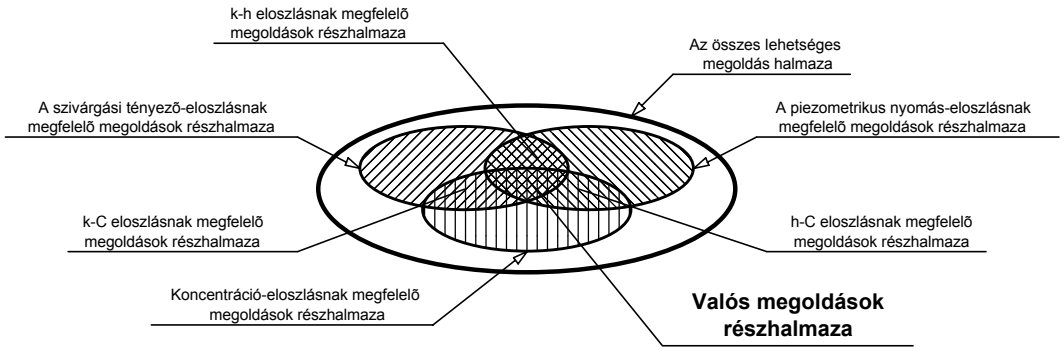
## 4.3. Modellek kalibrációja

A modellek kalibrációja az a folyamat, mellyel azt érjük el, hogy a modell és a valóságos rendszer azonos külső hatásokra, ingerekre egymáshoz legjobban közelítő válaszokat szolgáltasson (4.18.ábra). A szennyezőanyag-terjedési modell kalibrálása tehát egy sokparaméteres optimalizálási feladat, melynek során törekszünk a modellparaméterek és peremfeltételek egy olyan együttesének kialakítására, melyben az adott transzport-jelenség a legnagyobb valószínűséggel fog megfelelni a valóságban lezajló folyamatoknak.




4.18.ábra: A paraméterbecslés sémája[29]

A kalibráció fogalmát másképpen is meg lehet közelíteni[30]:
Tekintsük az összes paraméter-variáns halmazát. Ennek egy részhalmaza azon variánsokat tartalmazza, amelyeket nem zár ki az adatgyűjtés során kialakított piezometrikus szintek eloszlása. Ugyanígy létezik egy olyan részhalmaz is, amely megfelel a tapasztalt szivárgási tényező, illetve transzmisszibilitás eloszlásának. Természetesen az a részhalmaz is meghatározható, amelyet a tapasztalt koncentráció-eloszlás alátámaszt, és hasonlóképpen minden ismert paraméter-eloszlás által megengedett paraméter-variánsok részhalmaza is meghatározható. Mindezek után a paramétereknek keresett, "valósághű" variációja a meghatározott részhalmazok metszetében található. Minél több paraméterre történik meg a lehatárolás, annál szűkebb körben kell a lehetséges optimumot keresni.(4.19.ábra)




4.19.ábra: A lehetséges megoldások halmazának szűkítése a kalibrációnál[122]

A modellek kalibrációját az inverz számításokkal, autokalibrációval valamint a nagy adatbázisok és modellrendszerek kapcsolatán alapuló kalibrációval végezhetjük el.

### *4.3.1. Inverz számítási eljárásokkal végzett kalibráció*

A szivárgáshidraulikai modellezés során a piezometrikus szinteket számítjuk a hely, valamint az idő függvényében adott szivárgási tényező, transzmisszibilitás, tárolási tényező stb. értékek mellett. A transzport modellezés - hasonlóképpen - nem más mint a koncentrációértékek számítása a hely és idő függvényében adott diszperziós jellemzők, áramlási sebesség-mező, bomlási és adszorpciós jellemzők esetén. Ebben az esetben tehát a nyomásszint-, illetve a koncentráció-eloszlás tekinthető a függő változónak, azaz ismeretlennek. Az inverz kalibráció alapgondolata nem más, mint a korábban bemutatott egyenletekbe ismert, időben állandó, vagy változó nyomásszinteknek, illetve koncentráció-eloszlásoknak, valamint azok idő és hely szerinti deriváltjainak a behelyettesítése és ezáltal egy - az 3. fejezetben bemutatott számítási módszereknél - ismertnek tekintett paraméter (pl. szivárgási tényező, transzmisszibilitás, tárolási tényező, longitudinális vagy transzverzális diszperzivitás stb.) visszaszámítása. Másképp megközelítve az inverz eljárásokat, például keressük azt vagy azokat a (szivárgási tényező stb.) paraméter eloszlásokat a modellezett térben, amelyben az észlelt koncentráció-eloszlás vagy szivárgási sebességtér kialakulhat.

Az inverz számítási eljárás nemcsak a modellek kalibrációjára, hanem paraméterbecslésre is felhasználható. A kutatás kezdeti fázisában történő modellezés esetén sokszor nem áll rendelkezésre megfelelő számban a szivárgási tényezőre vonatkozó adat. Ebben az esetben például az ismert talajvízszint értékekből és azok időbeli változásából a szivárgási tényező területi eloszlása - a nyomásadatok pontosságának és reprezentativitásának függvényében becsülhető.

A hazai gyakorlatban Juhász[31] alkalmazta az inverz számításon alapuló paraméterbecslést a budapesti METRO É-D-i szakaszán bekövetkező káros talajvízszint emelkedések számításakor. A munka során a METRO korábban épített, analóg földtani felépítésű szakaszán észlelt vízszintemelkedések felhasználásával sikerült a modell adathiányos területein a kiindulási adatrendszert ellentmondásmentessé tenni.

Az inverz számítások szükségesek, mert a gyakorlatban ritkán áll rendelkezésre olyan teljes adatrendszer, mely az elvégzendő számítások adatigényét teljes mértékben kielégíti, ugyanakkor a hiányzó adatok in-situ, illetve laboratóriumi mérésekkel történő pótlása időigényes és költséges. Ezen túlmenően léteznek olyan paraméterek, mint pl. a tárolási tényező, a diszperzivitás, melyeknek közvetlen meghatározása körülményes és pontatlan, ezért ezen paraméterek meghatározásában az inverz módszer nagy segítséget nyújt.

Az inverz hidraulikai számításoknak két fő típusa a közvetlen és a közvetett közelítés.

#### *4.3.1.1. A közvetlen közelítés (autokalibráció) és hibái*

A közvetlen közelítés az ismeretlen paramétereket úgy becsli, hogy azokat függő változóknak tekinti a szivárgási alapegyenletben, ami megfelel az inverz módszer klasszikus értelmezésének. A közvetlen közelítés esetén a keresett modell-paramétereket iteratív úton közelítjük ahhoz az értékhez, melynek esetén a szimulált nyomásszint-eloszlás "megfelelően hasonlóvá" válik az észlelt nyomás értékekhez. Szokás a közvetlen közelítést az iterációs keresési algoritmus felhasználása miatt automatikus kalibrációnak, vagy egyszerűbben autokalibrációnak is nevezni.

Az autokalibráció két feltételezés mellett lehetséges: egyfelől amikor a szimulált és észlelt nyomásszint közötti $\varepsilon$ hiba elhanyagolhatónak tekinthető, másfelől amikor ez a hiba nem elhanyagolható, ezért annak minimalizálására törekszünk.

A modellezés története során elsőként Stallman[32] alkalmazta az elhanyagolhatóan kis $\varepsilon$ feltételét, mikoris a felülről táplálás (függőleges vízforgalom) illetve a tárolási tényező ismeretében a nyomáseloszlás alapján a transzmisszibilitás értékeit származtatta véges differencia módszerrel felírt egyenletek segítségével. Munkája során két hibajelenségre figyelt fel: Egyrészt, hogy a transzmisszibilitást a hely függvényében keresve az értékek egy része zérusnál kisebbre adódott, másrészt, hogy a megoldás instabil volt a nyomás-értékek felvételekor elkövetett kis hibák

esetén is. A jelenség kiküszöbölésére Stallman alkalmazta először a zónák kialakítását konstans, de zónánként különböző transzmisszibilitást feltételezve.

Az elhanyagolható vízmérleg hibán alapuló, ú.n. grafikus inverziós eljárást Nelson[33] vezette be. Az eljárás lényege, hogy a hidraulikus nyomások ismeretében megszerkeszthetők az áram- és potenciálvonalak. Ha az áramvonalak mentén egy áramlási csövet tételezünk fel és a szivárgás lamináris, tehát a Darcy-törvény érvényes, akkor állandó az áramló csőben Q vízhozam[34]. Ekkor az áramcső mentén, az áramcső alakváltozását is figyelembe véve egy ismert transzmisszibilitású helyről egy másik helyen meghatározható a transzmisszibilitás a hozamállandóság kritériumát szem előtt tartva. A módszer alkalmazásához vagy az egyes áramvonalak mentén legalább egy pontban a transzmisszibilitás, vagy a modell határán az áramvonalnál belépő fluxus ismerete szükséges, ami miatt a fenti megoldást a peremfeltétel alkalmazása folytán Cauchy problémának is nevezik[35].

A módszer kidolgozója Nelson, aki korábban elektromos analógiamodellel határozta meg az áramvonalakat, majd a potenciálos áramlás jellegének ismeretében kalibrálta modelljének transzmisszibilitási értékeit.[36]

A valóságban azonban az említett vízmérleg-hiba mindig létezik, melynek legfontosabb forrásai[37]:

- A modell definíciója pontatlan, pl. zárt tükrű rendszert tételezünk fel olyan területen, ahol a rendszer részben nyílttükrű.
- A nyomásszint értékei egyes területeken hiányoznak, melyek pótlására becsült értékek felvételére kényszerülünk.
- Az egyes paraméterek diszkretizálásakor interpolációs hibákat követünk el.

Felismerve, hogy az említett okok miatt az $\varepsilon$ hiba mindig létezik és az nem elhanyagolható, arra kell törekedni, hogy azt a teljes rendszerre vonatkoztatva minimalizáljuk. Kleinecke[38] az vízmérleg hibájának háromféle módon történő minimalizálását javasolta:

- a tömegmérleg egyenlet abszolút maximális hibájának a minimalizálása
- az abszolút hibaértékek összegének minimalizálása a tömegmérleg egyenletben
- az abszolút hibaértékek összegének összes elemre történő minimalizálása a tömegmérleg egyenletben, minden egyes időlépcsőben

A szerző a harmadik kritérium szerinti minimalizálást kísérelte meg alkalmazni, azonban sikertelenül, hiszen a származtatott tárolási tényezők és transzmisszibilitások jelentős része nullának adódott. A legelterjedtebb megoldási módot, a legkisebb négyzetek elvén alapuló közelítési algoritmust, később Hefez és szerzőtársai[39] dolgozták ki a mért és számított eredmények közötti eltérés hatékony redukálására.

A közvetlen közelítés legnagyobb hibája, hogy az eredmények igen érzékenyek a nyomásértékek hibáira. Mindez annak a következménye, hogy a transzmisszibilitás, a tárolási tényező stb. a nyomás, idő és a hely szerinti deriváltjai alapján számítható, így kis alapadathibák extrém hibákhoz vezethetnek a számított paraméterekben, különösen azokon a területeken, ahol a hidraulikus gradiens kicsi[40,41]. A hiba kiküszöbölésére elsősorban a terület konstans transzmisszibilitású zónákra történő osztását javasolják, melynek megalapozottságát számos alkalmazás bizonyítja[42,43].

A koncentráció-értékekből kiinduló számítások esetén a számított diszperziós jellemzők meghatározása a legpontatlanabb, hiszen ezek a koncentrációeloszlás-függvényének második deriváltjaiból származtathatók. Itt a hiba mértéke olyan nagy is lehet, hogy a modell adatrendszere értelmezhetetlenné válhat. Éppen ezért a gyakorlatban ezt a módszert a diszperzivitás-értékek meghatározására nem használják. Elvi megfontolások alapján a közvetlen közelítés gyakorlati alkalmazása a késleltetés meghatározására szorítkozhat, ehhez azonban szükséges legalább két időpontban a teljes területre a koncentráció eloszlás ismerete, amely a gyakorlatban csak ritkán áll rendelkezésre.

### *4.3.1.2. A közvetett közelítés (trial-and-error) módszere és hibái*

A közvetett közelítés során az eredeti egyenletekbe történik az ismeretlen paraméter behelyettesítése, mindaddig, amíg a paraméter fokozatos változtatása eredményeképpen a kapott koncentráció és nyomásértékek megközelítik az észlelt értékeket. Az explicit egyenletrendszer megoldása bármely ismertetett matematikai megoldással történhet. Ezt a módszert - mivel alapjában véve egyszerű próbálgatásról van szó - az angol irodalomból átvéve "trial-and-error" módszernek is nevezik.

A "trial-and-error" módszer az autokalibráció egyik legnagyobb hibáját küszöböli ki, mivel a megoldás nem követeli meg a nyomásértékek és azok deriváltjainak ismeretét a teljes modellezett térben, ami a közvetlen módszer (autokalibráció) pontatlanságának legfőbb forrása. Az eljárás további előnye, hogy semmilyen különösebb speciális matematikai eszköztárat nem igényel.

A trial-and-error módszer hátrányai:

- Mivel a szimulált nyomás- és a becsült paraméter-értékek közötti kapcsolat nem lineáris, ezért, az alkalmazás során optimalizálási algoritmusok nehezen alkothatók a közelítés pontosságának növelésére. Az eljárást csak gyakorlott, a hidraulikai és transzportfolyamatok összefüggéseit jól ismerő szakember tudja hatékonyan alkalmazni.
- A kalibráció igen munkaigényes, számítási oldalról nem hatékony.
- Nincs lehetőség a kalibrált paraméterek pontosságának számszerűsítésére, arra csak a kapott és észlelt eredmények eltérésének nagyságából, illetve a hibanagyság területi eloszlásából következtethetünk.

A trial-and-error módszer hátrányainak csökkentésére számos kísérlet történt. A megoldást egyfelől új programozási-optimalizálási algoritmusok kifejlesztése, másfelől statisztikai számításoknak a kalibráció folyamatba történő illesztése jelenthetik.

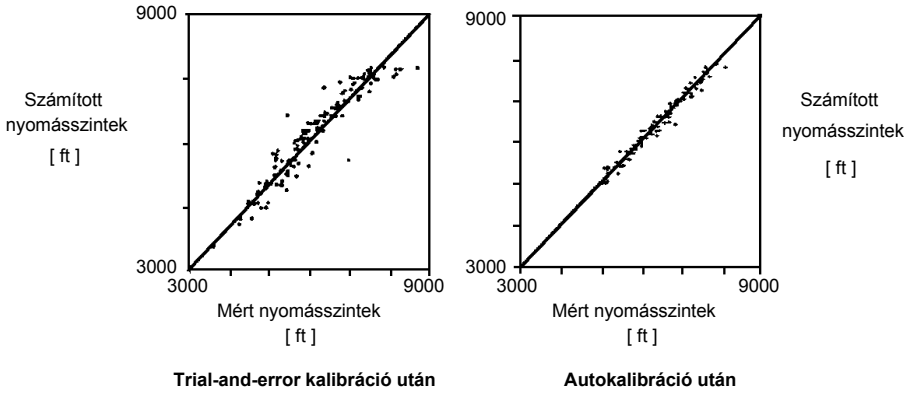
Az algoritmusok terén Jacquard és Jain[44] nemlineáris optimalizálási technikát dolgozott ki a szimulált és észlelt nyomások különbségei négyzetének minimalizálására, melyet később az olajiparban az áteresztőképesség területi megoszlásának számítására többen sikeresen alkalmaztak. Coats és szerzőtársai[45], valamint Slater és Durrer[46] a lineáris optimalizálási technikát továbbfejlesztették, azonban ez a megoldás csak az esetek szűk körében volt alkalmazható a nemlineáris jelleg gyakori dominanciája miatt. Yeh[47] új megoldás, az általa iteratív négyzetes programozásnak nevezett algoritmus bevezetését javasolta, melynek alkalmazását hipotetikus víztartókra be is mutatta.

Munkáink során általában a "trial-and-error" kalibrációt alkalmaztam elsősorban egyszerű kivitelezhetősége és kis számítógépkapacitás-igénye miatt. Ilyen kalibrációt végeztem s Sajóládi Vízmű környezetében[48], ahol éppen a modell kalibrálása mutatott rá a Hernád folyón található, korábban figyelmen kívül hagyott duzzasztás számottevő hatására. A közvetett közelítés alkalmazásával Sajó-völgyi Borsodsziráki Vízműtelepek környezetében készített hidrodinamikai modellnél az évekkel korábban analitikus úton és a modellel számított elérési idők közötti eltérés a kalibráció előtti 15-20%-ról a trial-and-error módszer alkalmazásával 5% alá süllyedt. Általában ennyire jó eredményt csak nagymértékű megkutatottságú területeken lehet elérni.

Tapasztalataim szerint a trial-and-error módszer hatékonysága nagyon kisfokú rétegzett tárolók esetében. Ilyen esetekben egyes korrekciók hatása nemcsak az adott rétegben, hanem a környezőkben is változásokat indukál, amelynek kihatásai nehezen követhetők. Ilyen eset volt a Gyöngyösi vízmű védőidomának meghatározásához[49] kialakított 9 réteges modell, ahol a fennálló hidraulikai helyzet szimulációja kalibrációs nehézségek miatt lassult le. A modellezés tanulsága szerint a többrétegű tárolók esetén a trial-and-error kalibráció hatékonysága exponenciálisan lecsökken.

### *4.3.1.3. Az autokalibráció és a trial-and-error módszer összevetése*

Az autokalibráció gyakran bonyolult kivitelezhetősége ellenére a gyakorlatban egyre inkább teret nyer a hagyományos trial-and-error kalibrációval szemben, aminek oka az autokalibrációval kapott paraméterértékek nagyobb pontossága. Carrera és szerzőtársai[50] egy végeselem modellhez használt adatrendszer példáján mutatták be, hogy a mért és a szimulált piezometrikus szintek eltérése - autokalibráció alkalmazása esetén - erősen lecsökkent (4.20.ábra).




4.20.ábra: A közvetett és közvetlen kalibráció hatékonyságának összehasonlítása (Carrera[51] et. al. 1989)

### *4.3.1.4. Inverz módszerek gyakorlati alkalmazásai a transzport-modellezésben*

Az inverz számítások alkalmazása a gyakorlati modell-számítások során elterjedt, ezek az alkalmazások mégis elsősorban a szivárgáshidraulikai paraméterek meghatározására, kalibrálására koncentrálódnak. A transzport-paraméterek inverz úton való meghatározása egyenlőre csak a tudományos modellezési kísérletekben kapott szerepet, aminek három oka lehet[52]:

- a konvektív-diszperzív transzportegyenlet megoldásának numerikus nehézségei,
- a transzport paraméterek in-situ meghatározásának korlátai, elsősorban az idő-korlát és a szennyezőanyag forrás biztonságos kialakítása,
- a konvektív-diszperzív transzportegyenlet alkalmazásának elméleti korlátai.

A fenti korlátok ellenére több sikeres inverz számítási kísérlet ismeretes a nemzetközi szakirodalomban. Murty és Scott[53] inverz polinomiális becslést alkalmazott egy víztartó kétdimenziós modelljénél a longitudinális és a transzverzális diszperzivitás meghatározására. A vizsgálataik során felfigyeltek arra, hogy a származtatott diszperzivitási értékek nagyon érzékenyek a koncentráció eloszlás minimális hibáira, amely jelenség teljesen hasonló a szivárgási jellemzők meghatározásánál tapasztaltakhoz és oka a koncentráció tér- is időbeli deriváltjainak a felhasználása a számítások során. Umari[54] és szerzőtársai egy "kvázi-linearizált" megoldási módszert mutattak be, amelynek lényege, hogy az inverz számítást lineáris számítási lépések sorozatára tudták visszavezetni. A származtatott diszperzivitási értékek az adott kétdimenziós rendszerben megfelelőek voltak, azonban az eredmények ebben az esetben is nagyon érzékenyeknek bizonyultak a koncentráció-eloszlás hibáira. Jury és Sposito[55] a vadózus zónában lejátszódó kvázi-egydimenziós transzportfolyamatokra fejlesztett ki inverz számítási eljárást - a legkisebb négyzetek elvének és a maximum likelihood becslésnek a felhasználásával. Tapasztalataik szerint a minimalizálási eljárástól függően jelentős eltérések voltak az eredményekben. Van Genuchten[56] egydimenziós analitikus megoldás alapján fejlesztette ki a nemlineáris, legkisebb négyzetek elvén alapuló algoritmusát. A transzport-szimulációs inverz probléma első, statisztikai alapokon nyugvó megoldását Wagner és Gorelick[57] mutatta be, egy egydimenziós konvektív-diszperzív transzport egyenleten alapuló, súlyozott legkisebb négyzetek elvét felhasználó algoritmus kidolgozásával. A gyakorlati probléma megoldásán is tesztelt módszer során először nyílt lehetőség a származtatott értékek hiba-nagyságának számszerűsítésére.

Minthogy a konvektív-diszperzív transzport-egyenlet egyik legfontosabb paramétere az időben és térben változó áramlási sebességvektor, amelyet hidraulikai modellszámítással határozhatunk meg, ezért lehetséges a paramétereknek mind a szivárgáshidraulikai-, mind a traszport-egyenletek segítségével történő inverz számításon alapuló kalibrációja. Ezt az eljárást kétlépcsős kalibrációnak is nevezik. A módszert Strecker és Chu[58] alkalmazta először, mikoris inverz úton számították előbb a transzmisszibilitást a szivárgási és a transzport-egyenletekből, majd felhasználva a kapott értékeket - a transzportegyenlet alapján - ugyancsak inverz számítással a diszperzivitási értékeket határozták meg.

Az inverz kalibráció legújabban használt formája a szimultán kalibráció, mikoris a transzport-egyenletek segítségével együttesen történik a szivárgási és terjedési jellemzők számítása. A módszert először Wagner és Gorelick[59] alkalmazta egy víztartó kétdimenziós modellezése esetén, mikoris a szivárgási tényező, a longitudinális és transzverzális diszperzivitás és a szabad hézagtérfogat értékeinek szimultán becslését valósították meg egy nemlineáris, súlyozott legkisebb négyzetek elvén alapuló algoritmus segítségével.

A kétlépcsős és a szimultán kalibráció összehasonlító vizsgálatát Kauffmann és szerzőtársai[60] egy a Neckar folyó környezetében lezajlott szennyezés esetén végezték el. A modellezés során először kétlépcsős kalibrációt alkalmazva kiszámították a szivárgási egyenlet alapján a modell peremfeltételeit adó határmenti fluxusokat, a Neckar folyó és a víztartó egymásrahatása miatt fellépő hozamokat, egy konstansnak tekintett nyomásszinttel jellemzett határ mentén fellépő hibákat, valamint a csapadékból történő felülről táplálás értékét. A második lépcsőben a transzport-egyenlet alapján számították a longitudinális és a transzverzális diszperzivitás, a szennyezőforrás intenzitásának időbeli változásából adódó hiba és a szabad hézagtérfogat értékét. A kétlépcsős kalibráció után elvégezték a nyolcparaméteres szimultán kalibrációt is. Összehasonlítva a két megoldást, a kétlépcsős kalibrációt matematikai oldalról egyszerűbben kivitelezhetőnek, ugyanakkor pontatlanabbnak tartották. Az eredmények pontosságát leíró függvény (mely a becsült és észlelt értékek eltérésén alapul) meghatározása során a koncentráció-értékeken alapuló függvények alkalmazását javasolták a nyomás-értékeken alapuló függvények helyett, hiszen az utóbbiak kevésbé érzékenyek a becsült paraméterek megváltozására és így ezen függvények "lapos" minimumhelyeinek iteratív úton történő megkeresése sokszor nehéz, illetve hosszadalmas.

Hasonló eredményre jutottak Medina[61] és szerzőtársai is, akik egy összetett felépítésű 900x2700 m nagyságú területen végezetek inverz számításokat. A munkájuk célja - az egyébként megfelelően feltárt területen - a transzmisszibilitási és függőleges vízforgalomra jellemző értékek meghatározása volt. A maximum likelihood becslésen és a Gauss-Newton algoritmuson alapuló számításokat két úton végezték el: a modellt egyfelől csak a nyomásértékek, másfelől a nyomás és koncentráció értékek alapján kalibrálták. Az eredményeket statisztikai úton kiértékelve megállapítható volt, hogy a valós(mért) értékeket a nyomás-koncentráció feltétellel kalibrált modell paraméterei szignifikánsan jobban közelítették, emellett az eredmények szórása is megfelelően alacsony volt a csak nyomásértékeken alapuló kalibrációval szemben. Ugyanakkor azonos számításhoz az első esetben mintegy 10 másodperc, a második esetben két óra volt szükséges ugyanazon a számítógépen. Ez a mintegy hétszázszoros különbség egyfelől a hosszabb iteráció, másfelől a sűrűbb hálóosztás - mely a koncentráció-értékeken alapuló kalibrálás stabilitása érdekében szükséges - miatt normálisnak tekinthető.

Felismerve a szimultán kalibráció instabilitása és lassú konvergenciája miatti problémákat Keidser és szerzőtársai[62] speciális összetett kétlépcsős kalibrációs módszert fejlesztettek ki. A korábbiakban az első lépcsőben csupán a nyomásértékek felhasználásával származtatták a paramétereket, majd a második lépcsőben a koncentráció-értékek felhasználásával a transzport-jellemzőket. Ezzel természetesen az információ egy része elveszett, hiszen a kialakult koncentráció-eloszlás is inherens a szivárgáshidraulikai jellemzőkkel. Ennek kiküszöbölésére az összetett kétlépcsős kalibráció első lépésében mind a hidraulikus nyomás, mind a koncentráció-eloszlás alapján számítják a szivárgási paramétereket, majd a második lépcsőben csak az észlelt koncentrációk alapján a terjedési jellemzőket. Behelyettesítve a kapott transzport-paramétereket

az első lépcső egyenletrendszerébe - Keidser és szerzőtársai szerint - egy gyorsan konvergáló, stabil megoldás kapható.

A bemutatott numerikus kalibrációs eljárások bonyolultságát felismerve Hosokawa és szerzőtársai[63] egy, az egyszerűsége miatt a gyakorlati életben is könnyen alkalmazható, a konvektív-diszperzív transzportegyenlet analitikus megoldásán alapuló kalibrációs eljárást dolgoztak ki. Munkájuk során a tengerparti víztartókban az édesvíz-tengervíz keveredési zóna koncentráció-értékeinek felhasználásával, a víztartó transzverzális diszperzivitását határozták meg. A módszer természetesen bármilyen szennyezőanyag felhő koncentrációértékeinek felhasználásával alkalmazható azzal a feltétellel, hogy a víztartó egy rétegű, a vizsgált zónában homogén és közelítőleg állandó vastagságú. A módszer lényege az észlelt koncentrációk áttörési görbéjének a változó diszperzivitási paraméterekkel felvett, az analitikus megoldásból származó áttörési görbéhez való simítása, amelynek pontosságát statisztikai úton lehet meghatározni.

### *4.3.2. A Kalman algoritmus alkalmazása*

A Kalman algoritmus lényege, hogy a kalibráció, illetve a szimuláció során a számított koncentráció és nyomásértékeket azonnal összehasonlítják a rendelkezésre álló mért értékekkel és azok eltérése esetén időlépcsőnként azokat korrigálják. Mindez azt jelenti, hogy a modell és a valóság közötti szignifikáns eltérések csökkentésére nemcsak a modell kalibráció folyamán, hanem az azt követő szimuláció során folyamatosan sor kerülhet. A fentiek értelmében az áramlást előidéző nyomáskülönbségekben, valamint a szennyezőanyag-terjedését dominánsan okozó nyomás- és koncentráció-különbségekben jelentkező hibák a szimuláció során nem összegződnek, amennyiben megfelelő számú észlelés történt.

A Kalman filter algoritmusának alkalmazási előnyeit van Geer és te Stroet alapján az alábbiakban foglalhatjuk össze[64]:

Alapvető megfontolás, hogy a modell a valóságnak csak egy részét írja le helyesen, éppen ezért az észlelési értékeket nemcsak a modell kalibrációjához, hanem a szimulációs számításokhoz is fel kell használni. A Kalman algoritmus használatakor a mért értékek nemcsak a kalibrációhoz, hanem a modell-eredmények számítás közbeni felfrissítéséhez is felhasználhatók.

A mért és szimulált nyomás vagy koncentráció-értékek különbségéből a modell reprezentativitásának mértéke számszerűsíthető.

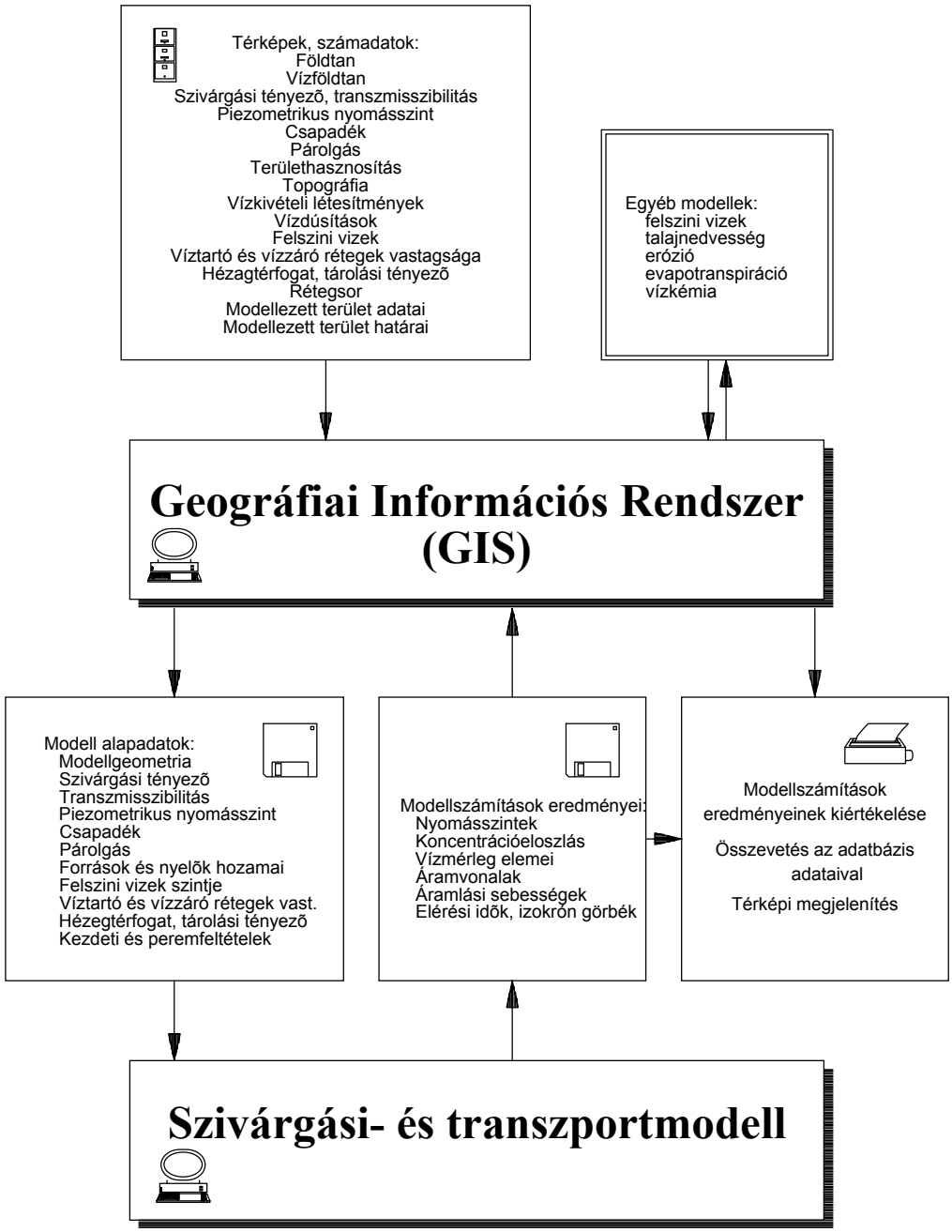
Bizonyítható, hogy a Kalman filter jobb kalibrációs algoritmus a hagyományosan alkalmazottaknál. Mindez azt jelenti, hogy a mért és szimulált nyomás vagy koncentráció-értékek különbsége az eltelt időtől független, azok varianciája kicsi és egyenletes eloszlású, azaz a kalibrált modell hibája térben és időben egyenletes.

### *4.3.3. A Geográfiai Információs Rendszerek (GIS) alkalmazási lehetőségei a kalibráció során*

A transzport-modellek kalibrálása során egyre nagyobb szerepet játszanak a geográfiai információs rendszerek (térinformatikai rendszerek). A nevezett rendszerekben egyszerre találhatók meg a képi, grafikus, numerikus és a szöveges információk egy tetszőlegesen bonyolult felépítésű relációs adatbázis keretein belül, melyek egyfelől felhasználhatók a szivárgáshidraulikai és transzportmodellek alapadat-rendszerének kialakításához, másfelől azok ellenőrzésére, kalibrálására is alkalmasak. Mint azt Biesheuvel és Hemker[65] egy példán bemutatja, a GIS adatbázisban tárolt adatok segítségével történhet a transzport-modell alapadat-rendszerének a felépítése, majd a számítások eredményei (nyomás- és koncentráció-eloszlás, áramlási sebességmező adatai stb.) visszakerülnek a GIS adatbázisba (4.21.ábra).

A központi adatbázis alkalmas arra, hogy a kapott eredményeket grafikus úton megjelenítse, valamint, hogy azokat az adatbázisban szereplő reprezentatívnak tekintett adatokkal egybevesse. Ellentmondások megléte esetén a számításokhoz felhasznált adatrendszer módosítható. A rendszer nagy előnye az alapadatrendszer felépítésének leegyszerűsödésén túl az is, hogy a terü-

letre vonatkozó folyamatosan bővülő mérési adatsorok felhasználásával a modell reprezentativitása, pontosítása folyamatosan történhet.




4.21.ábra: Geográfiai Információs Rendszer és a transzportmodell összeillesztése (Biesheuvel és Hemker[66], 1993)

A GIS adatbázisok numerikus modellekkel való összekapcsolása már számos alkalmazás során megvalósult, így megvalósult az ARC/Info adatbázis és a VAM3D szivárgáshidraulikai végeselem modell együttes alkalmazása[67], Hollandiában pedig az ILWIS (Integrált Területi és Vízhasznosítási Információs Rendszer) és a MICRO-FEM végeselemes program-család csatlakoztatása[68]. Egy GIS alapú adatbázis és a hozzá csatlakozó numerikus transzportmodell felhasználható vízügyi döntés-előkészítő rendszerek kialakítására is, amely a vízgazdálkodással, a vízbázisok védelmével foglalkozó szakemberek számára nyújt fontos információt [69, 70].

A GIS hidraulikai transzportmodellezési alkalmazásának azonban számos hátránya is van, melyek közül a legnagyobb, hogy a legelterjedtebb GIS rendszerek elsősorban fejlett demonstrációs eszköztárral, kevésbé fejlett adatbázis kezeléssel rendelkeznek. Ezen programok számítási

képességei elenyészőek. A területek jellemzőit leíró térképek tárolása például elsősorban bittérképes grafika formátumban és nem bármely adatformátumban történik, amely további felhasználásra a térkép kinyomtatásán kívül alkalmatlan. Az említett grafikus formátumú térképekkel még a matematikai alapműveletek sem végezhetők el (hiszen nem arra készültek), ugyanakkor a térképekhez rendelt adatbázisok sem eléggé komplexek ahhoz, hogy - átalakítás nélkül - alapul szolgálhassanak a modellvizsgálatokhoz. Éppen ezért a felsorolt külföldi példák is elsősorban a kiindulási adatok és eredmények GIS rendszerekkel történő vizualizálásában rejlő lehetőségeket használták ki, valamint egy esetlegesen meglévő országos GIS alapú adatbázisból a modellszámításokhoz szükséges adatok átvételét oldották meg. Problémát jelent a GIS igényelte munkaállomás kategóriájú gépek, valamint az egyszerűbb modellszámításokhoz használt személyi számítógépek teljesítmény és hardverkülönbségeinek áthidalása, ami a jövő feladata.

Összességben megállapítható, hogy a jelenleg működő GIS rendszerek: ESRI ARC/Info, Intergraph Microstation, stb. egy térképezési feladat megoldására vagy adatok és eredmények vizualizációjára alkalmasak, ugyanakkor numerikus modulok és alapvető számítási képességek hiányában a transzport-modellezésben egyenlőre nehezen alkalmazhatók.

A térinformatikai rendszerek és a numerikus modellek egy újabb együttes alkalmazási lehetőségét jelentik a térinformatikai adatállományok modell-adaptációját lehetővé tevő hidrodinamikai és transzportmodellező rendszerek kialakítása, melyek közül legismertebbek a GMS (Groundwater Modelling System és az Argus Open Numerical Environments (ARGUS ONE) . Ezek a rendszerek egy átlagos szintű térinformatikai értelmező felülettel rendelkeznek, amelyek a leggyakrabban alkalmazott térinformatikai programok által használt adatformátumokat olvasni és értelmezni képesek. Ezek a GIS modulok tehát lehetővé teszik a térinformatikai programba bedigitalizált, vagy a térinformatikai értelmezés és feldolgozás során előállított vonalakat, poligonokat, sőt egyes esetekben egy jelkulcsnak megfelelően akár a tulajdonságokat is átvenni. Így valójában a valóság térinformatikai rendszerek által leképzett mását olvassák be.

A GMS és az Argus rendszerek ezután egy - az alkalmazott programoknak megfelelő - interfész program segítségével a hidrodinamikai, illetve transzportprogramnak megfelelő elemosztást (rács, háromszög-, négyszögelem, hasábok) elkészíti, majd az egyes elemekhez - az átvett térinformatikai képnek megfelelően - a geometriai, hidraulikai és transzportjellemzőket hozzárendeli. Ezután a szokványos módon elvégzi a számítást, majd az eredményeket grafikusan megjeleníti, adott esetben valamilyen térinformatikai program adatformátumában is rögzíti.

---

[1]A. Peck - S. Gorelick - G. de Marsily - S. Forster - V. Kovalevsky: Consequences of Spatial Variability in Aquifer Properties and Data Limitations for Groundwater Modelling Practice, 1988, IAHS Publication No.175, pp. 25-27.

[2]pl. Steiner F.: A geostatisztika alapjai, Tankönyvkiadó, 1990, p.284

[3]M. Aboufirassi - M.A. Marino: Cokriging of Aquifer Trasmissivities from Field Measurements of Transmissivity and Specific Capacity, 1984, Mathematical Geology, 16(1) pp.19-35.

[4]H. P. Sacher: Berücksichtigung von Unsicherheiten bei der Parameterschätzung für matematisch-numerische Grundwassermodelle, 1983, Mitteilungen, Institut für Wasserbau, RWTH Aachen, Vol. 49

[5]in: H. P. Sacher: Berücksichtigung von Unsicherheiten bei der Parameterschätzung für matematisch-numerische Grundwassermodelle, 1983, Mitteilungen, Institut für Wasserbau, RWTH Aachen, Vol. 49

[6]T. C. Winter: Uncertainties in Estimating the Water Balance of Lakes, 1981, Water Resources Bulletin, 17(1), pp. 82-115.

[7]H. Heidermann: Datenfehler bei matematisch-numerische Grundwassermodellen - Input Sensitivität und Kalman Filter, 1986, Mitteilungen, Institut für Wasserbau, RWTH Aachen, Vol. 61.

[8]L. Smith: On the Spatial Variability of Flow Parameters in Stratified Sand, 1981, Mathematical Geology, 13(1), pp.1-21.

[9]A. Pekdeger - M-Th. Schafmeister-Spierling: Regionalization of Hydraulic Aquifer Properties - Optimization by Geostatistical Simulation Techniques, 1990, in: Proc. of ModelCARE '90: Calibration and Reliability in Groundwater Modelling, 1990, IAHS Publ. No. 195, pp. 447-455.

[10]A. Pekdeger - M-Th. Schafmeister-Spierling: Influence of Spatial Variability of Aquifer Properties on Groundwater Flow and Dispersion, 1989, in: Porc. of. Conf. on Contaminant Transport in Groundwater, ed. Kobus & Kinzelbach, Balkema, 1989, pp. 215-220.

[11]Steiner F.: A geostatisztika alapjai, Tankönyvkiadó, 1990, pp.301-307.

[12]Szabó I.-Kovács B.: Numerikus modellszámítás a Gyöngyösi vízmű védőidomának meghatározásához, 1994, szakvélemény, kézirat

[13]Kovács B.: Kiegészítő hidraulikai szakvélemény a MOL Rt. szarvasi telephelye szénhidrogén szennyezésének kárelhárítási tervéhez, 1994, szakvélemény, kézirat

[14]A. Pekdeger - M-Th. Schafmeister-Spierling: Regionalization of Hydraulic Aquifer Properties - Optimization by Geostatistical Simulation Techniques, 1990, in: Proc. of ModelCARE '90: Calibration and Reliability in Groundwater Modelling, 1990, IAHS Publ. No. 195, pp. 447-455.

[15]A. Pekdeger - M-Th. Schafmeister-Spierling: Influence of Spatial variability of Aquifer properties on Groundwater Flow and Dispersion, 1989, in: Porc. of. Conf. on Contaminant Transport in Groundwater, ed. Kobus & Kinzelbach, Balkema, 1989, pp. 215-220.

[16]Steiner F.: A geostatisztika alapjai, Tankönyvkiadó, 1990, pp.301-307.

[17]H.P Nachtnebel - A. Bárdossy: Network Geometry and Spatial Uncertainty in Groundwater Solute Transport Modelling, 1990, in: Proc. of ModelCARE '90: Calibration and Reliability in Groundwater Modelling, 1990, IAHS Publ. No. 195, pp. 529-539.

[18]A. Peck - S. Gorelick - G. de Marsily - S. Forster - V. Kovalevsky: Consequences of Spatial Variability in Aquifer Properties and Data Limitations for Groundwater Modelling Practice, IAHS Publ. No. 175. pp. 78-113.

[19]J. A. Barker - R. Herbert: Pumping Tests in Patchy Aquifers, 1982, Ground Water 20(2), pp.150-155.

[20]T. A. Prickett - C. G. Lonnquist: Selected Digital Computer Techniques for Groundwater Resource Evaluation, 1971, Illinois State Water Bulletin No.55.

[21]A. Peck - S. Gorelick - G. de Marsily - S. Forster - V. Kovalevsky: Consequences of Spatial Variability in Aquifer Properties and Data Limitations for Groundwater Modelling Practice, IAHS Publ. No. 175. pp. 78-113

[22]Ch. J. Duffy - D.-H. Lee: Base Flow Response from Nonpoint Source Contamination: Simulated Spatial Variability in Source, Structure, and Initial Condition, 1992, Water Resources Research, Vol. 28. No.3, pp. 905-914.

[23]C. I. Voss: A Finite-Element Simulation Model for Saturated-Unsaturated, Fluid-Density-Dependent Groundwater-Flow with Energy Transport or Chemically Reactive Single-Species Solute Transport, 1984, US. Geological Survey Report pp. 1-409.

[24] Kovács B. - Szabó I.: Hulladékelhelyezés IV. A szennyezőanyagok terjedése, A modellezés elmélete és gyakorlata, 1995. Ipar a környezetért Alapítvány, Budapest p.270.

[25]E. Bütow - E. Holzbecher - V. Koss: Approach to Model Transport of Contaminants including Geochemical Processes - Dependence of Sorption Coefficients on Geochemical Surrounding, 1990, in: Proc. of ModelCARE '90: Calibration and Reliability in Groundwater Modelling, 1990, IAHS Publ. No. 195, pp. 221-229.

[26]Szabó I. - Kovács B.: Számítógépes modellvizsgálat a Peremartoni Vegyipari Vállalat által lerakott veszélyes hulladék átdeponálással történő ártalmatlanításához, 1993, szakvélemény, kézirat

[27]Ch. J. Duffy - D.-H. Lee: Base Flow Response from Noinpoint Source Contamination: Simulated Spatial Variability in Source, Structure, and Initial Condition, 1992, Water Resources Research, Vol. 28. No.3, pp. 905-914.

[28]Szabó I.- Kovács B. : A 2. sz. Regonális hulladékégetőmű szuhogyi lerakója környezeti hatásának előzetes becslése számítógépes szimuláció segítségével, 1992, Szakvélemény, Kézirat

[29]H. Heidermann: Datenfehler bei matematisch-numerischen Grundwassermodellen - Input Sensitivität und Kalman Filter, 1986, Mitteilungen, Institut für Wasserbau, RWTH Aachen, Vol. 61.

[30]D. van Rooy - D. Rosbjerg : The Effect of Conditioning Transport Simulations on Transmissivity, Head and Concentration Data, 1988 in: A. Peck - S. Gorelick - G. de Marsily - S. Forster - V. Kovalevsky: Consequences of Spatial Variability in Aquifer Properties and Data Limitations for Groundwater Modelling Practice, 1988, IAHS Publication No.175 pp. 163-177.

[31]Juhász J.: A METRO É-D vonal III. szakaszán a beépítés utáni talajvízszint változás és káros emelkedés megakadályozásának meghatározása, Szakvélemény, Kézirat, 1984

[32]R.W.Stallman: Numerical Analysis of Regional Water Levels to Define Aquifer Hydrology, 1956, Trans. of American Geophysical Union 37(4), pp.451-460.

[33]R.W. Nelson: In-place Measurement of Permeability in Heterogenous Media 1. Theory of proposed Method, 1960, J. of Geophysical Res. 65(6), pp.1753-1760.

[34]Juhász J.: Hidrogeológia, Akadémiai Kiadó, 1987, p. 971.

[35]W.A. Rice - S.M. Gorelick: Geologic Interference from "Flow Net" Tansmissivity Dtermination: Three Case Studies. 1985, Water Resources Bulletin 21(6), pp. 919-929.

[36]R.W. Nelson: Conditions for Determining Areal Permeability Distributions by Calculation, 1962, Society of Petroleum Engineering Journal, pp.223-224

[37]S.M. Gorelick: Incorporating Assurance into Groundwater Quality Management Models, 1988, in: Groundwater Flow and Quality Modeling, Szerk: E.Custodio et. al. NATO ASI series, Mathematical and Physical Sciences 224: pp. 135-150.

[38]D. Kleinecke: Use of Linear Programing for Estimating Geohydrologic Parameters of Groundwater Basins, 1971, Water Resources Research 7(2), pp. 367-374.

[39]E.Hefez - V. Shamir - J. Bear: Identifying the Parameters of an Aquifer Cell Model, 1975, Water Resources Research 11(6), pp. 993-1004.

[40]C.D. McElwee: Sensitivity Analysis and the Groundwater Inverse Problem, 1982, Groundwater 20(6), pp.723-735.

[41]S.P. Neuman - S. Yakowitz: A Statistical Approach to the Inverse Problem of Aquifer hydrology, 1. Theory,1980, Water Resources Research 15(4) pp. 845-860.

[42]Y. Emsellem - G. de Marsily: An Automatic Solution for the Inverse Problem, 1971, Water Resources Research 7(5): pp 1264-1283.

[43]W.W-G. Yeh - Y.S.Yoon - K.S. Lee: Aquifer Parameter Identification with Kriging and Optimum Parameterization, 1983, Water Resources Research, 19(1), pp. 225-233.

[44]P. Jacquard - C. Jain: Permeability Distribution from Field Pressure Data, 1965, Soc. Petroleum Engineering Journal 5, pp. 281-294.

[45]K.H. Coats - J.R. Dempsey - J.H. Henderson: A New Technique for Determining Reservoir Description from Field Performance Data, 1970, Soc. Petroleum Engineering Journal 10(1), pp. 66-74.

[46]G.E Slater - E.J. Durrer: Adjustment of Reservoir Simulation Models to Match Field Performance, 1971, Soc. Petroleum Engineering Journal 11(3), pp. 295-305.

[47]W.W-G. Yeh: Optimal Identification of Parameters in an Inhomogenous Medium with Quadratic Programing, 1975, Soc. Petroleum Engineering Journal 15(5), pp. 371-375.

[48]Szabó I.-Kovács B.: Felszín alatti vizek szennyeződésének modellezése, 1991, Kézirat, KFH Adattár

[49]Szabó I.-Kovács B.: Numerikus modellszámítás a Gyöngyösi vízmű védőidomának meghatározásához, 1994, szakvélemény, kézirat

[50]J. Carrera - A. Medina - J. Heredia - L.Vives - J. Ward -G. Walters: Parameter Estimation in Groundwater Modelling: From Theory to Apllication, 1989, Proc. of Groundwater Contamination: Use of Models in Decision Making, Ed..: G. Jousma et.al. , pp 151-169. Kluwer Academic Publ. Co., 1989

[51]J. Carrera - A. Medina - J. Heredia - L.Vives - J. Ward -G. Walters: Parameter Estimation in Groundwater Modelling: From Theory to Apllication, 1989, Proc. of Groundwater Contamination: Use of Models in Decision Making, Ed..: G. Jousma et.al. , pp 151-169. Kluwer Academic Publ. Co., 1989

[52]A. Peck - S. Gorelick - G. de Marsily - S. Forster - V. Kovalevsky: Consequences of Spatial Variability in Aquifer Properties and Data Limitations for Groundwater Modelling Practice, 1988, IAHS Publication No.175 pp. 54-55.

[53]V. V. N. Murty - V.H. Scott: Determination of Transport Model Parameters in Groundwater Aquifers, 1977, Water Resources Research 13(6), pp.941-947.

[54]A. Umari - R. Willis - P.L-F. Liu: Identification of Aquifer Dispersivities in Two-dimensional Transient Groudwater Contaminant Transport: An Optimization Approach, 1979, Water Resources Research, 15(4), pp. 815-831.

[55]W.A. Jury - G. Sposito: Field Calibration and Validation of Solute Transport Models for the Unsaturated Zone, 1985, Soil Sciences Am. J.49, pp. 1331-1341.

[56] M.T. van Genuchten: Determining Transport Parameters from Miscible Displacement Experiments, 1980, és Non Equilibrum Transport Parameters from Miscible Displacement Experiments, 1981, Research Report No. 118 és 119. US. Salinity Lab. Riverside, Kalifornia in: A. Peck - S. Gorelick - G. de Marsily - S. Forster - V. Kovalevsky:

Consequences of Spatial Variability in Aquifer Properties and Data Limitations for Groundwater Modelling Practice, 1988, IAHS Publication No.175

[57]B.J. Wagner - S.M. Gorelick: A Statistical Methodology for Estimating Transport Parameters: Theory and Applications to One-dimensional Advective-Dispersive Systems, 1986, Water Resources Research, 22(8), pp.303-315.

[58]R.W. Strecker -W. Chu: Parameter Identification of Groundwater Contaminant Transport Model, 1986, Groundwater 24(1): pp.56-62.

[59]B.J. Wagner - S.M. Gorelick: Optimal Groundwater Quality Management under Parameter Uncertainty, 1987, Water Resources Research, 23(7), pp.1162-1174.

[60]C. Kauffmann - W. Kinzelbach - J.J. Fried: Simultaneous Calibration of Flow and Transport Models and Optimization of Remediation Measures, 1990, Proc. of ModelCARE'90: Calibration and Reliability in Groundwater Modelling, IAHS Publ. No. 195. pp.159-170.

[61]A. Medina - J. Carrera - G. Galarza: Inverse Modelling of Coupled Flow nad Solute Transport, 1990, Proc. of ModelCARE'90: Calibration and Reliability in Groundwater Modelling, IAHS Publ. No. 195. pp.159-170.

[62]A. Keidser - D. Rosbjerg - K. Högh Jensen - K. Bitsch: A Joint Kriging and Zonation Approach to Inverse Groundwater Modelling, 1990, Proc. of ModelCARE'90: Calibration and Reliability in Groundwater Modelling, IAHS Publ. No. 195. pp.171-183.

[63]T. Hosokawa - K. Jinno - K. Momii: Estimation of Transverse Dispersivity in the Mixing Zone of Fresh-Salt Groundwater,1990, Proc. of ModelCARE'90: Calibration and Reliability in Groundwater Modelling, IAHS Publ. No. 195. pp.149-158.

[64]F.C. van Geer - C.B.M. te Stroet: A Kalman Filter Approach to the Quantification of the Reliability of a Groundwater Model, 1990, Proc. of ModelCARE'90: Calibration and Reliability in Groundwater Modelling, IAHS Publ. No. 195. pp.467-476.

[65]A. Biesheuvel - C.J. Hemker: Groundwater Modelling and GIS: Integrating MICRO-FEM and ILWIS, 1993, Proc of. Conf. HIDROGIS '93: Application of Geographic Information Systems In Hydrology and Water Resources, IAHS Publ. No. 211. pp. 289-296.

[66]A. Biesheuvel - C.J. Hemker: Groundwater Modelling and GIS: Integrating MICRO-FEM and ILWIS, 1993, Proc of. Conf. HIDROGIS '93: Application of Geographic Information Systems In Hydrology and Water Resources, IAHS Publ. No. 211. pp. 289-296.

[67]M. Stibitz -Z. Patzelt - J. Wolfbauer: Database Development and GIS Application in Suport of Groundwater Management: Case Study at the Austrian-Bohemian Border, 1993, Proc of. Conf. HIDROGIS '93: Application of Geographic Information Systems In Hydrology and Water Resources, IAHS Publ. No. 211. pp. 263-270.

[68]A. Biesheuvel - C.J. Hemker: Groundwater Modelling and GIS: Integrating MICRO-FEM and ILWIS, 1993, Proc of. Conf. HIDROGIS '93: Application of Geographic Information Systems In Hydrology and Water Resources, IAHS Publ. No. 211. pp. 289-296.

[69]J.H. Hoogendoorn - W.van der Linden - C.B.M. Te Stroet: The Importance of GIS in Regional Geohydrological Studies, 1993, Proc of. Conf. HIDROGIS '93: Application of Geographic Information Systems In Hydrology and Water Resources, IAHS Publ. No. 211. pp. 375-3872.

[70]J. Fürst - G. Girstmair - H.P.Nachtnebel: Application of GIS in Decision Support Systems for Groundwater Management, 1993, Proc of. Conf. HIDROGIS '93: Application of Geographic Information Systems In Hydrology and Water Resources, IAHS Publ. No. 211. pp. 13-21.

# 5. TRANSZPORTMODELLEZÉS GYAKORLATI PROBLÉMÁI ÉS ALKAMAZÁSI LEHETŐSÉGEI A KÖRNYEZETVÉDELEMBEN

A dolgozat első négy fejezetében ismertettem a transzportmodellezés elméleti alapjait és magát a folyamatot, amelyet egy ilyen modell kialakítása és a valósághoz történő illesztése megkíván. Jelen fejezet a transzportmodellek néhány gyakorlati alkalmazási lehetőségét, illetve az alkalmazás korlátait kijelölő problémákat mutatja be.

## 5.1. A szennyezőanyag-terjedési modellek gyakorlati alkalmazásának lehetőségei

A transzportmodellek felhasználásának tág lehetőségei vannak. A környezeti hatásvizsgálatról szóló 152/1995(XII.12). Kormányrendelet előírja egyes, részletezett tevékenységek megkezdéséhez és folytatásához hatásvizsgálat elvégzését. Mivel a rendelet előírja a tevékenység felszín alatti vizekre gyakorolt hatásának elemzését, ezért a hatásvizsgálatok során gyakorlat a szennyeződés-terjedési vizsgálatok végzése.

A veszélyes hulladékokról szóló 102/1996. (VII.12) Kormányrendelet szerint a veszélyes-hulladék lerakótelep létesítéséhez környezeti hatástanulmányt kell készíteni, amelynek kiemelten tartalmaznia kell a lerakóból esetlegesen kikerülő szennyezőanyagok értékelését a bezárást követő 30 évre vonatkozóan. Ugyenezen rendelet függeléke előírja a hulladéklerakó altalajával kapcsolatos követelményeket és kiemeli, hogy amennyiben a meghatározott minőségű természetes altalaj nem áll rendelkezésre, akkor azzal egyenértékű, természetes anyagú, épített szigetelőréteg is megfelel. Az egyenértékűség feltétele: az épített, természetes anyagú szigetelőrétegen a 30 év alatt átjutó csurgalékvíz komponenseinek koncentrációja nem lehet nagyobb, mint az egyébként szükséges 3 m vastag természetes réteg esetén. A 102/1996. (VII.16) Kormányrendelet tehát implicit módon előírja transzportszámítások elvégzését mind a lerakó természetes altalajára, mind az aljzatszigetelésére vonatkozóan, azaz az említett számításokat nemcsak az előforduló gyakorlati problémák megoldásának igénye, hanem a hatályos törvényi előírások is megkívánják. A rövid bevezető érzékelteti, hogy a transzportmodellezés a környezeti állapotfelmérés, a mérnöki előtervezés, a tervezések ellenőrzése, az állapotfelmérés és tervek alapján meghozandó döntések előkészítése során is hasznos eszköz, ami ugyanúgy hasznosítható a tervezés-előtervezés, a környezeti szennyeződések megelőzése és szennyezett területek kármentesítése során.

A transzport-modellek alkalmazásának néhány fontosabb területe:

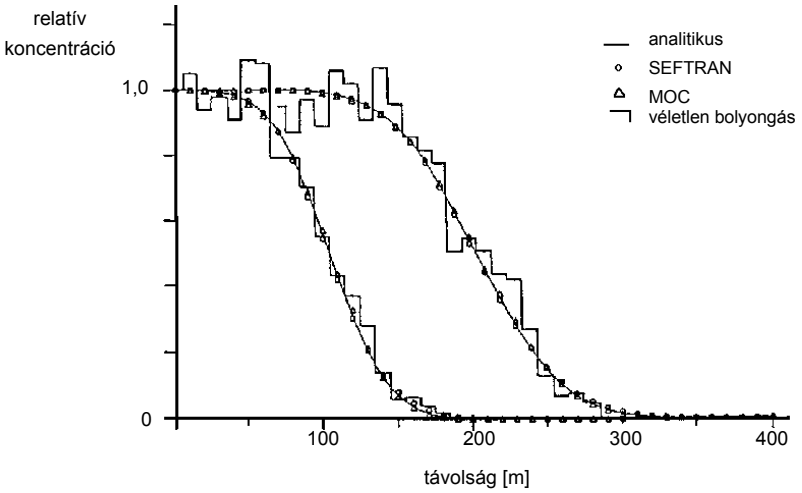
<u>Hidrodinamikai modellek</u> (transzportmodellezés 1. fázisa) jól felhasználhatók vízműlétesítmények elhelyezésének optimalizálásakor, vízműbővítések környezeti hatásának vizsgálatánál, a vízművek védőidomának meghatározására, egyéb mérnöki létesítmények környezeti hatásának vizsgálatánál, vonalas létesítmények okozta hidraulikai hatások meghatározása során, szennyezőanyag-mentesítő hidraulikai létesítmények hatásának előtervezése és optimalizálása folyamán, végül tervezett kármentesítő-telepek hatékonyságának ellenőrzésére.

Szennyeződés-terjedési számításokat (transzportmodellezés 2. fázisa) alkalmazhatunk szennyezőanyagok konvektív-diszperzív úton történő terjedésének számítására tekintettel a felületi adszorpcióra és a bomlás jelenségére, vagyis szennyezőforrások okozta koncentrációk meghatározására térben és időben, továbbá potenciális szennyezőforrások környezeti hatásának vizsgálata és a potenciálisan veszélyeztetett területek lehatárolása folyamán, környezet-szennyezések elhárításának optimalizálása érdekében végzett szimulációja során, végül a hulladéklerakók szigetelőrétegének előzetes méretezése, a lerakók környezeti hatásának vizsgálata céljából.

## 5.2. A gyakorlati transzportmodellezés néhány problémája

### *5.2.1. Analitikus vagy numerikus módszerek alkalmazásának dilemmája*

A modellalkotás talán legelső kérdése, hogy az adott terjedési jelenség számítható-e analitikus úton vagy numerikus módszerek alkalmazása a célszerűbb. Bár a kérdés mindig egyedileg döntendő el, mégis megállapítható, hogy elvileg minden probléma megfelelő szinten közelíthető, mind analitikus, mind numerikus ,mind részecskeszemléletű megoldások segítségével is. Mint azt Beljin és v.d. Heijde[1] megállapította, hogy amennyiben a probléma a különböző számítási módszerekre azonos mértékben adaptálható, úgy a kapott eredmények módszer-függetlenül jól közelítik egymást. (5.1.ábra) Egy állandó forrás okozta szennyeződés terjedését egy dimenzióban vizsgálva a Huyakorn és szerzőtársai által kidolgozott, végeselem módszeren alapuló SEFTRAN[2], a karakterisztika módszerét alkalmazó MOC[3] (Konikow és Bredehoeft), valamint a véletlen bolyongást szimuláló (Prickett[4] és szerzőtársai) programok eredményeit az analitikus megoldás eredményeit jól közelítették. Bár matematikai szempontból valóban pontos megoldást csak az analitikus megoldás ad (a numerikus módszerek eredményei mindig közelítések), ugyanakkor az analitikus módszerek követelte feltételezések ( mint pl. homogén, izotróp közeg) a modell reprezentativitást csökkentik le. Így az analitikus módszer egy kevésbé jellemző állapot pontos számítását jelenti, míg a numerikus megoldások egy reprezentatívabb állapotnak a közelítő megoldását keresi.

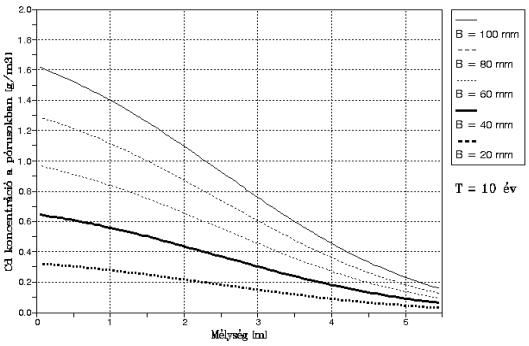



5.1.ábra:
A különböző módszerekkel számított eredmények összehasonlítása (Beljin és v.d. Heijde, 1989)

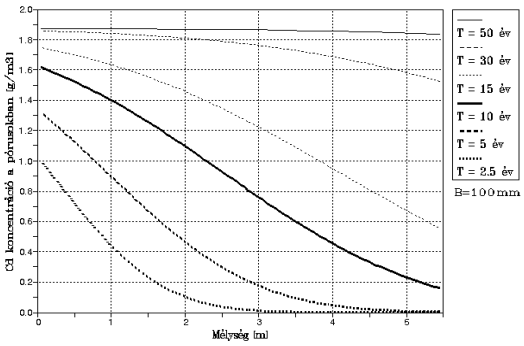
Analitikus módszereket érdemes minden olyan esetben használni, amikor a vizsgált transzport-jelenség analitikus modelladaptációja a terjedési folyamat szempontjából lényeges egyszerűsítést nem tartalmaz. Ez az eset általában akkor következhet be, ha a szennyeződés mozgásának fő iránya kizárólag függőleges (egy dimenziós), vagy pedig horizontális sík mentén történik. Amennyiben a vizsgált folyamat ettől eltérő, úgy kevés kivételtől eltekintve célszerű a képződmények geometriájának, kőzetfizikai jellemzőinek, a szivárgás irányának és sebességének, stb. változását is megengedő numerikus módszerek alkalmazása.

Az analitikus módszerek alkalmazásának egy jellegzetes példája egy dunántúli vegyipari vállalat hulladéklerakója környezetében bekövetkezett szennyeződés vizsgálata[5]. A vizsgált esetben egy nagykiterjedésű, meghibásodott szigetelésű tárolótérből egy adott, kb. 5 m vastagságú agyagrétegen keresztül a csurgalékvizek függőleges irányú, szabad szivárgással jutottak a fedett karsztképződményekbe. Az agyagréteg a fedő humuszos részt leszámítva homogénnek volt tekinthető, ezért az 3. fejezetben ismertetett egydimenziós analitikus összefüggés volt alkalmazható (megoldásához az Ogata, Banks-féle analitikus megoldáson alapuló saját fejlesztésű programot használtam, amely közvetlenül adott helyen idősorokat, illetve egy egyenes mentén a koncentrációváltozásokat számítja). Az analitikus megoldás alkalmazásának feltétele ebben az esetben egyrészt a talajvíz hiánya, a homogén agyagréteg miatt állandó sebességűnek feltételez-

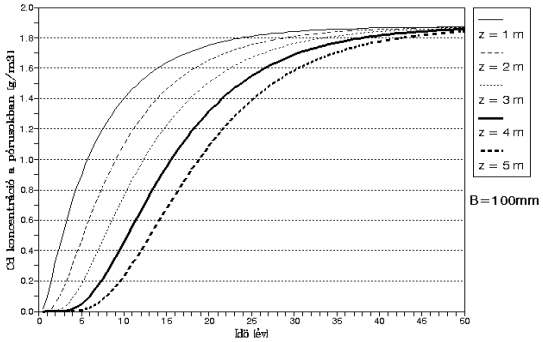
hető, uralkodóan függőleges szivárgás, a nagy oldalirányú kiterjedés, ami miatt az 1D megoldás során elhanyagolt diagonális diszperzív hozamok a horizontális koncentráció-gradiens jelentéktelen nagysága miatt valóban elhanyagolhatóvá váltak. A feladat egyszerűsítve a koncentráció értékének meghatározása volt az idő, a B beszivárgással arányos szennyezőanyag intenzitás, a z mélység és az R késleltetés függvényében. Az analitikus további megoldás előnye, hogy a számítás gyorsasága miatt számos paramétervariáns feltételezésére nyílt lehetőség, amire ebben az esetben erre azért volt szükség, mert a beszivárgás, valamint a szorpciós folyamatok miatt kialakuló késleltetés pontos mértéke ismeretlen volt. A számítások során a legkedvezőbb, illetve legkedvezőtlenebb helyzetek szimulációjára törekedve ítéltük meg a karsztba beszivárgó csurgalékvizek legkisebb és legnagyobb koncentrációját, illetve hozamát.




A koncentráció a mélység függvényében 10 év elteltével 100 és 20 mm közötti éves beszivárgás esetén




A koncentráció a mélység függvényében 100 mm/év beszivárgásintenzitás esetén különböző időpontokban




A koncentráció az idő függvényében 1 és 5 m közötti mélységben

5.2.ábra: A kadmium-ion számított koncentrációi a mélység, a beszivárgás intenzitása, a késleltetés és az idő függvényében

Az eredmények (5.2. ábra) mutatják, hogy az adott tárolóból a közel 5 m vastagságú természetes védőrétegen keresztül a szennyeződésre érzékeny karsztos képződményekbe szennyezőanyag szivároghat, ezért az adott tározóból az elszivárgás megszüntetésére műszaki védelmet kell kialakítani. Az ismertetett probléma és annak bemutatott megoldási módja felhívja a figyelmet arra, hogy léteznek a mérnöki gyakorlatban olyan speciális esetek, amikor az analitikus megoldások során feltételezett állapot megfelelő mértékben közelíti a valóságot, ezért azok alkalmazása célszerű.

### *5.2.2. A modellgeometria megválasztásának dilemmája*

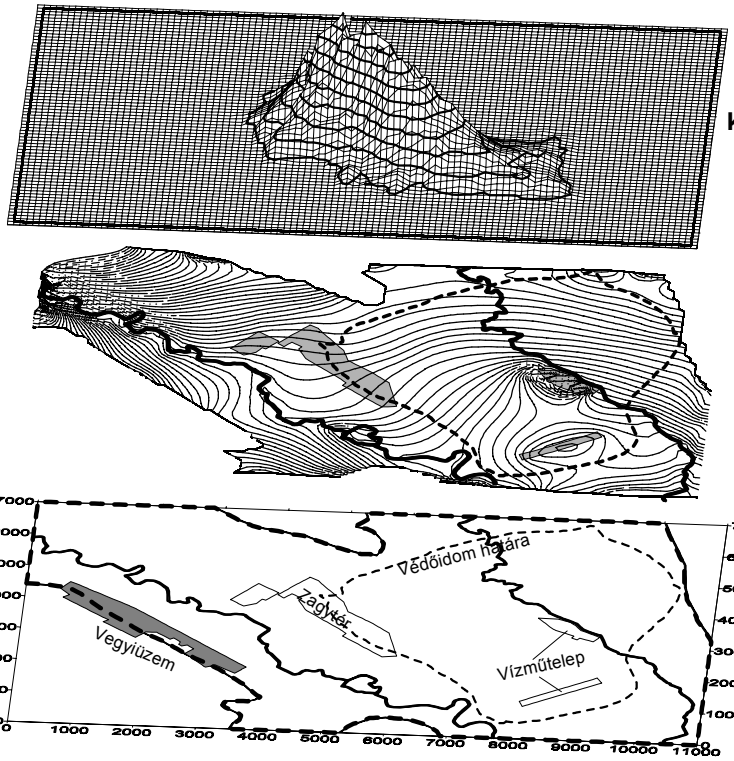
A vizsgált problémát egydimenziós vonal-, kétdimenziós (horizontális) sík- vagy szelvénymodellel, illetve háromdimenziós térmodellel lehetséges közelíteni.

Az egydimenziós számítási modell alkalmazásának lehetséges esetei:

– a modell pusztán advektiv(konvektív) transzportot számol és a vizsgálat iránya megfelel a szivárgás irányának,

– bár a modell advektív-konvektív, de a diagonális szennyezőanyag-hozamok elhanyagolhatók, mivel a transzverzális diszperzivitás vagy diszperziós együttható a longitudinális jellemzőhöz képes nagyságrendekkel kisebb,
– bár a modell advektív-konvektív és a longitudinális és transzverzális diszperziós jellemzők is összevethetőek, de a szennyezőforrás a vizsgálat irányára merőleges sík mentén nagy kiterjedésű és egyenletesnek tekinthető intenzitású, ezért a vizsgált egyenes mentén kilépő, illetve a környezetből a vizsgált térrészbe belépő diagonális hozamok, kiegyenlítik egymást,
– a modell advektív-konvektív és a longitudinális és transzverzális diszperziós jellemzők összevethetőek, ugyanakkor egy vízszintes vonalszerű szennyezőforrásra merőlegesen, az uralkodó szivárgási iránnyal párhuzamos egyenes mentén történik a vizsgálat (5.3. ábra).

Egy egydimenziós számítás bemutatására az 5.2.1. fejezetben került sor.




**A zagytér szennyezőhatása következtében kialakuló klorid-koncentráció eloszlása a talajvízben**

**A talajvíz hidroizohipszái**

**A vizsgált térrész**

5.4. ábra: A Bódva-Sajó teraszréteg síkszivárgási modelljének néhány fontosabb fedvénye

A kétdimenziós horizontális síkmodellek alkalmazásának feltétele, hogy a vizsgált folyamat csak a egy jól meghatározott vízadóban való szivárgást kövesse, a szennyezőanyagnak az általában felszini vagy felszínközeli szennyezőforrástól a vízadóig megtett útját az elérési idő számításokkor pusztán egy additív tagként kezeljük. A vízadó vastagsága megfelelően kicsi ahhoz, hogy a koncentráció a szennyezőanyag-felhő területén lévő bármely függély mentén állandónak legyen tekinthető, a vizsgált vízadónak csak oldalról, a felszini beszivárgásból és a felszini vizekkel származó kommunikációból van utánpótlódása, a vízadónak mélyebb rétegvizekkel kapcsolata nincsen vagy elhanyagolható.

Horizontális síkmodell alkalmazására példaképpen a Sajó-Bódva völgy teraszrétegében végzett hidrodinamikai és transzportmodellt mutatom be példaképpen (5.4 ábra). A 3-10 m vastagságú, uralkodóan kavicsos-homok teraszréteget a számítások során egy horizontális rétegként lehet kezelni, amely hidraulikai kapcsolatban áll a Sajó és Bódva folyókkal, valamint a területen található zagyterekkel és iszaplerakókkal. Bár a teraszréteg vertikálisan inhomogén, hiszen mind a feküben, mind a fedőben enyhén kihomokosodik és elagyagosodik, mégis alkalmazható az az

egyszerűsítő feltevés, hogy a jó vízvezető képességgel rendelkező teraszösszletet egy rétegbe vonjuk össze. Ez a rétegösszevonás - tapasztalataim szerint - a Duna teraszrétegeinek vizsgálatánál is megfelelően alkalmazható[6] Ugyan a teraszrétegek a feküben található miocén barnakőszén-telepes rétegösszlettel a bányászati tevékenységgel kapcsolatos fellazulási zónák miatt hidraulikai kapcsolatban állnak, mégis a rendszerben a horizontális irányú a teraszrétegbeli vízforgalomhoz képest elhanyagolható. Érdekes, hogy ugyanezek a vízhozamok a kőszéntelepek közötti vízadók vízforgalma szempontjából már egyértelműen nem elhanyagolhatók. Maga a transzportmodellt több vizsgálat során is felhasználtuk, egyrészt a közeli vegyi üzem területén bekövetkezett ammóniumszennyezés terjedésének vizsgálata során, másfelől a zagyterek környezeti vizsgálatához, illetve a környező borsodsziráki vízműtelepek veszélyeztetettségének vizsgálata során.

Nagy vastagságú, nyílt tükrű vízadórendszerek esetén is több ízben használtunk síkszivárgási modelleket, így a Nyírség területén a felszínen található homokrétegek esetén[7], valamint a kiskunsági, futóhomokos területeken[8]. Ezekben az esetekben egy nagy vastagságú homokréteg tárolja a szabad felszínű vizet, a melynek feküszintje sokszor pontosan nem is ismert. Ilyen esetekben a modellezett réteg vastagságát vagy a szélső áramvonalak módszerével, vagy a Zamarin féle aktív zóna[9] felhasználásával határozzuk meg. Az így lecsökkentett vastagságú rétegre már jó közelítéssel igaz az, hogy a koncentráció bármely függély mentén állandónak tekinthető.

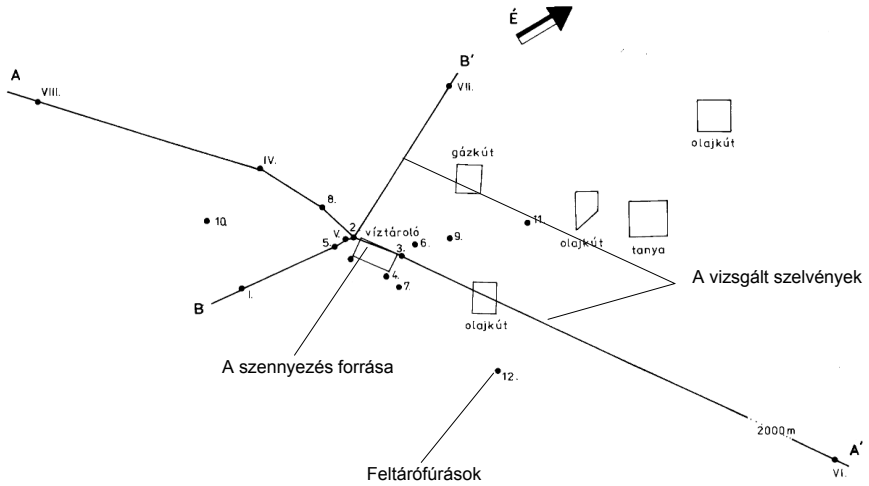
A <u>vertikális síkmodellek</u>, azaz <u>szelvénymodellek</u> akkor alkalmazhatók, ha a szelvény áramvonalon húzódik végig, azaz a szivárgási sebességnek a vizsgált egy vagy több vízadóban csak a szelvénnyel párhuzamos komponense van. A vizsgált képződmény, illetve a szennyezőforrás a vizsgált szelvényre merőleges irányban megfelelően nagy kiterjedéssel rendelkezik, illetve a szennyezőforrás intenzitása a vizsgált szelvényre merőleges irányban állandó. A vertikális szelvénymodellek esetében a gravitációs hatásokra bekövetkező (sűrűségkülönbségekre visszavezethető) szennyezőanyag-migráció elhanyagolható. Amennyiben a felsorolt feltételek nem teljesülnek, úgy a szelvényirányra merőleges irányban nem elhanyagolható szennyezőanyag migráció történik, amit a modell nem képes figyelembe venni, és ez az eredmények irrealitását okozhatja.

A szelvénymodellek alkalmazását általában a megfelelő földtani információk hiánya kényszeríti ki, bár a jelenség vizsgálatára elvi szinten legmegfelelőbb egy térmodell felépítése lenne, azonban ennek megalkotása - a síkmodellekét sokszorosan meghaladó adatigény miatt - lehetetlen. Itt jegyzem meg, hogy a legismertebb háromdimenziós, hidraulikai és traszportmodellezésre szolgáló programok többnyire szelvénymodellek felépítését a nem szelvényirányú transzportfolyamatok miatt elkövethető hiba miatt nem engedik meg, ezért saját fejlesztésű, explicit véges differencia elven működő, transzport számítását lehetővé programot fejlesztettem ki. A szelvénymodellek alkalmazására példaképpen az Alföldön bekövetkezett NaCl infiltráció diszperziójának számítását[10], valamint a garéi klórbenzol szennyezés környezeti hatásának[11] megállapítását mutatom be.

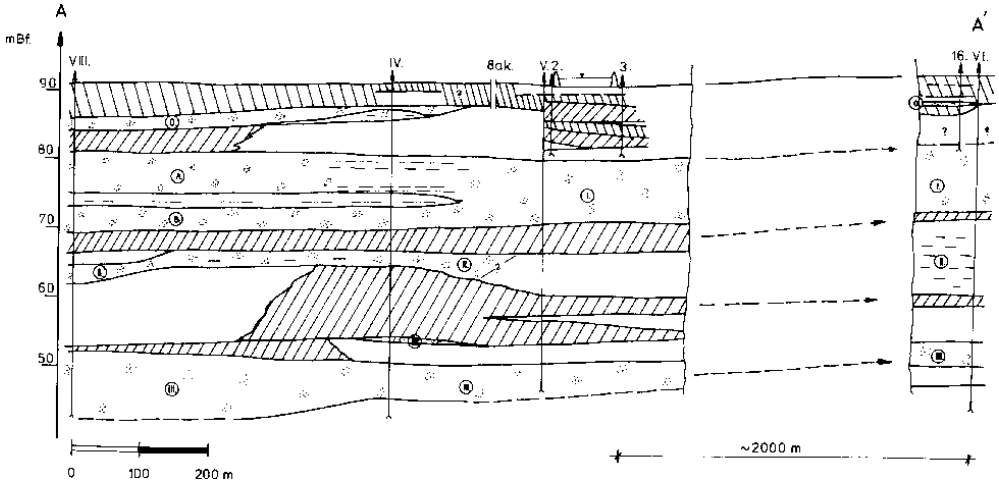
Az Alföldön ipari tevékenységhez kapcsolódóan egy tározótérben sósvíz folyamatos tárolását végezték. A tároló a meghibásodott szigetelésén keresztül kb. 20 évig zavartalanul szennyezte környezetét. Mára az ipari tevékenység  már megszűnt, azonban a környező település kútjaiban megjelent a só-szennyeződés. A földtani környezetbe jutott szennyezőanyag további sorsának szimulációjával a falu veszélyeztetettségének előrejelzését végeztük el annak ismeretében, hogy a vizsgált területen a mélybeszivárgás és ennek megfelelően a mély alföldi tároló-képződmények utánpótlódása a domináns, nem az oldalirányú transzport-folyamat. A földtani ismeretek igen hiányosak voltak, fúrások elsősorban a tározó környékén mélyültek, attól távolabb csak néhány szelvény mentén rendelkeztünk adatokkal. (5.5.ábra)

A terület földtani felépítése igen változékony (5.6. ábra), aminek követése horizontális síkmodellel túlságosan leegyszerűsített modellalkotás lett volna, ugyanakkor a háromdimenziós modell kialakításához az 5.6. ábrán feltüntetett fúrások nem nyújtottak megfelelő hátteret. Mivel az egyes képződmények fizikai jellemzői a teljes területen csak mintegy 5-10 pontban voltak ismeretesek, ezért a modellben 4.2.2. fejezet szerint, 10 egymástól eltérő paraméter-együttessel leír-

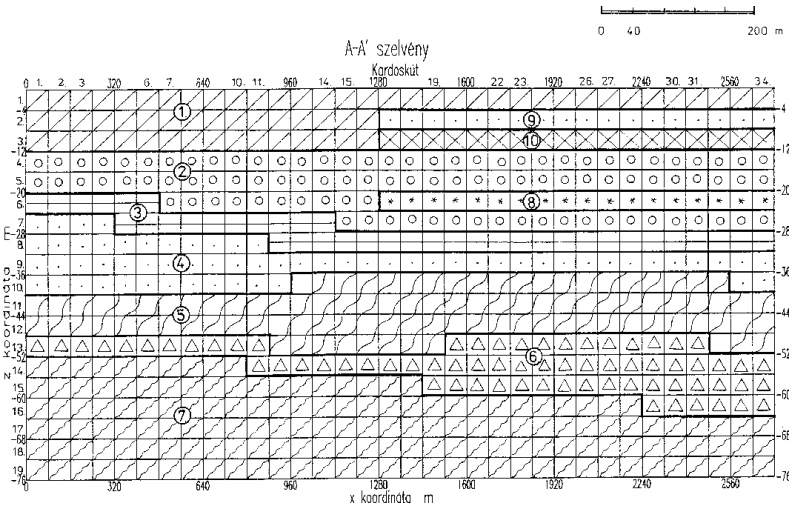
ható zónát alakítottam ki (5.7.ábra). A számításokat először a 20 éves szennyezési periódusra, majd a forrás azonnali megszüntetése utáni 50 éves dekontaminációs szakaszra végeztem el (5.8.ábra). A modell kalibrációját a 20 éves kontamináció következtében kialakult koncentráció-eloszlás alapján végeztem el. A bemutatott izovonalas koncentráció-térképen jól követhető a szennyezőanyag domináns mélység felé történő szivárgása, illetve diszperziója. A rendelkezésre álló kevés adat ellenére is sikerült a szennyezés terjedésének előzetes tér- és időbeli becslését elvégezni. A számítások alapján elmondhattuk, hogy a szennyezőanyag diszperziója folytán a koncentrációk évtizeden belüli jelentős csökkenésével lehet számolni.



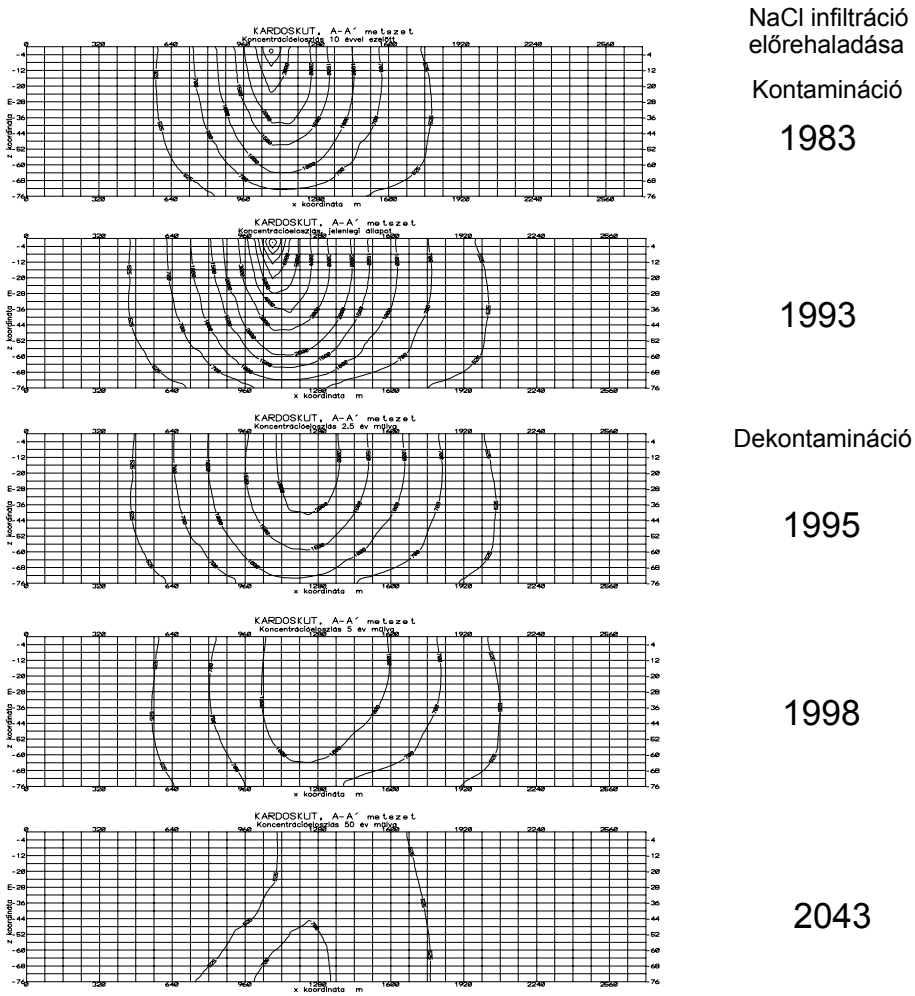

5.5. ábra: A vizsgált terület a szelvényekkel




5.6.ábra: A vizsgált területen keresztül húzódó Ny-K irányú szelvény




5.7.ábra: Az 5.6. ábrán bemutatott földtani környezet modelladaptációja K-Ny irányú szelvényen



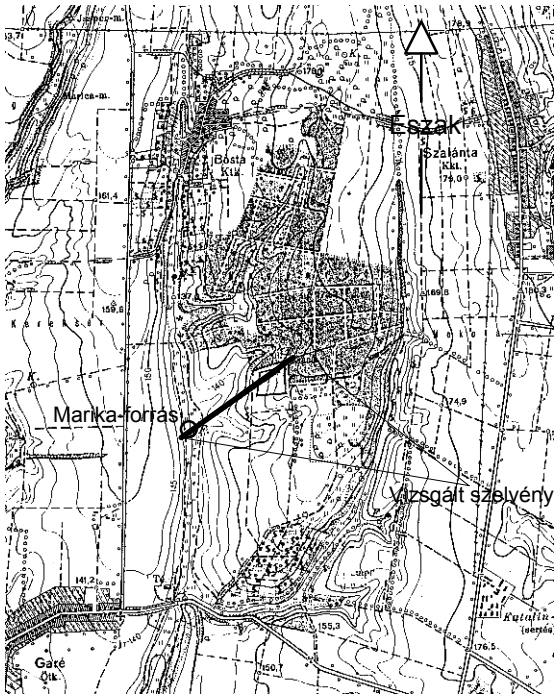

5.8. ábra: NaCl infiltráció követése szelvénymodell segítségével

A szelvénymodell alkalmazásának másik példájaként a garéi klórbenzol szennyezés szimulációs modelljét [12] mutatom be. Ebben az esetben a problémát az jelenti, hogy bár az áramlási tér ismeretességének mértéke megfelelő szintű, ugyanakkor a szennyezőanyag terjedési és fizikai tulajdonságai ismeretlenek voltak. Az ismeretlen anyagi minőségnek általánosságban a következő főbb okai lehetnek, hogy :

- A deponált anyag ismeretlen. Elsősorban vadlerakók esetében jellemző, hogy titokban vagy engedély nélkül ellenőrizetlen minőségű hulladékokat deponálnak. Sokszor még a hulladék eredete is ismeretlen, esetleg a lerakás pontos helye sem azonosítható az időközben végrehajtott tereprendezés miatt.
- A deponált anyag ismert, ugyanakkor annak összetétele változó. A deponálandó anyagok többnyire gyártási melléktermékek. Ezek a hulladék-anyagok annyira változatos összetételűek, hogy más iparágakban történő további feldolgozásuk, hasznosításuk egyenlőre technikailag nem megoldott vagy gazdaságtalan. Szerves hulladékok esetében gyakori, hogy bár a hulladékanyag lehetséges komponensei ismertek, azonban azok mennyiségaránya nem. A garéi lerakó vizsgálata során pl. klórbenzollal és annak származékaival és adalékanyagokkal találkoztunk. A vizsgált anyag gélszerű volt, ugyanakkor a vegytiszta klórbenzol - terepi és szoba hőmérsékleten egyaránt - folyadék. Ha a depóniatérbe hosszabb időn keresztül kerülnek be hulladékanyagok, akkor azok összetétele az adott iparág technikai fejlődésével megváltozhat. Ezzel az esettel egy alföldi fúrási iszaptároló vizsgálata[13] során találkoztunk, ahol a mélyfúráshoz használt fúróiszap minősége - egy környezetvédelmi célú technológiaváltás következtében - jelentősen megváltozott. Ugyanitt volt jellemző, hogy az iszap minőségét a harántolt rétegek minősége és a fúrólyuk talpmélysége függvényében változtatták, így a tárolótérbe mindig más minőségű anyag került.
- A deponált anyag terjedési tulajdonságai erősen megváltoznak a környezet hőmérséklete, pH-ja, egyes a környezetben előforduló egyéb anionok, kationok mennyiségétől. A szénhidrogén-szennyezések esetén számolni kell a viszkozitás hőmérsékletfüggésétől, ami a szivárgási tényező értékét befolyásolja. A környezet pH-jának értéke főként ipari területek esetén okozhat jelentős gondokat, mivel egyes nehézfémek mobilizációja erősen pH függő. Ilyen esetekben előfordulhat, hogy a szennyezőanyag transzportját nem a hidraulikai viszonyok, hanem a kémiai környezet határozza meg[14].

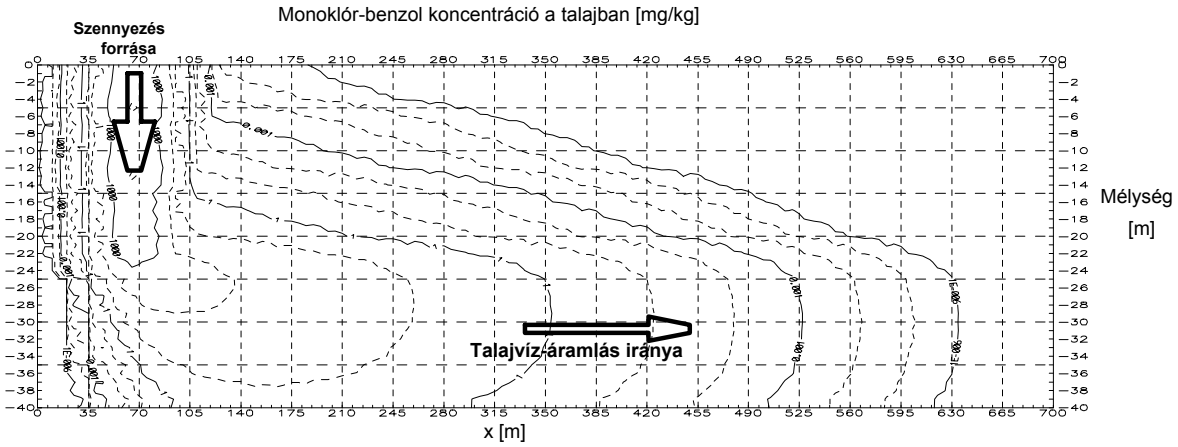
Amikor a felsorolt bármely okból eredően ismeretlenek a pontos terjedési jellemzők, akkor becsült értékekkel dolgozunk, ilyenkor az alapelv mindig a biztonság javára történő tévedés, azaz mindig az elméletileg kialakuló legmagasabb koncentráció számítása az előforduló legveszélyesebb szennyezőanyag esetére. A legveszélyesebb szennyezőanyag kiválasztásának során a szennyezőanyag terjedés sebességét, környezetben észlelt maximális koncentráció és a határérték arányát és hidraulikai szempontokat kell figyelembe venni. A forrásból származó anyagok nem azonos terjedési sebességgel rendelkeznek, amit jól mutatnak a vizes oldatban mért diffúzió-állandó különbségei is: általában gyorsan terjed a klorid, nitrát, a nitrit és az ammónium, lassabban a különböző fémek ionjai, valamint a magnézium és a kalcium. Másrészt célszerű lehet azokkal a kémiai komponensekkel a számítást elvégezni, melyek a vizsgált területen az adott probléma szempontjából releváns határértéket leginkább meghaladó mennyiségben vannak jelen. Hidraulikai szempontok alapján a legkisebb viszkozitással rendelkező, vízzel legjobban nedvesedő, a hőmérséklet és a pH változásoktól leginkább független tulajdonságú anyagok transzportjának szimulációja indokolt.

A vizsgált probléma: A garéi átmeneti tározó telepen, hordókban, veszélyes hulladéknak minősülő, klórbenzol-származékokat tároltak. A részben talajréteggel fedett hordók korróziója következtében a környezetéhez képest kiemelt helyzetű tárolótérből (5.9.ábra) a klórbenzol a talajba szivárgott. Az említettek miatt merült fel a kérdés, hogy a beszivárgó szennyezőanyag elérheti-e a területen mintegy 20-22 m mélységben levő talajvízszintet, valamint, hogy mikorra tehető a szennyezésnek a közeli Marika-forrásban való megjelenésének időpontja. A környezetvédelmi felügyelőség határozatában számítógépes szimuláció elvégzését írta elő annak megállapítására, hogy a szennyeződés előrehaladásának mértéke megengedi-e a tervezett veszélyes hulladék-égetőmű kivitelezését, vagy a terjedés gyorsasága miatt azonnali beavatkozás szükséges.




5.9.ábra: A vizsgált terület a szelvénnyel

Tekintettel arra, hogy a földtani rétegsort a tároló környezetében csak egy 30 m-es és néhány 12 m-es talpmélységű fúrás tárta fel, valamint, hogy egyéb adatok kizárólag a domb nyugati oldalára vonatkozóan álltak rendelkezésre, ezért - a rendelkezésre álló adatok mennyisége alapján - egy 700 m hosszú 40 m mélységű, a talajvíz szivárgási irányába eső szelvény mentén végeztük el számításainkat, melynek eredményeként megbecsültük a szennyezés időbeli lefolyásának menetét. A területen a szennyezőanyag először szabad szivárgással mozog a mintegy 20-22m mélységben található talajvíz felé, majd ott az uralkodó áramlási iránynak megfelelően terjed tovább (5.10.ábra). Mivel a szennyezőanyag pontos minősége ismeretlen volt, ezért vegytiszta klórbenzolra vonatkozóan végeztük el a számításokat, amit az indokol, hogy ez az anyag kis viszkozitású folyadék, amellyel a tanszékünkön flexibilis falú permeabiméterrel a környező agyagok szivárgási tényezőjének meghatározására[15] is sor került. A mintegy 600 m-re található forrás veszélyeztetettségének megállapítására végzett 2D szelvény menti véges differencia módszerrel végzett számítások azt mutatták, hogy a folyamat meglehetősen előrehaladott, a környező Bosta-völgyi vízkilépések elszennyeződésének hidraulikai akadálya nincs. Mivel az említett forrásokban a számítások szerint a klórbenzol vagy származékai néhány éven belül megjelenhetnek, így a kármentesítés mielőbbi megkezdése ajánlatos.[16] A számítások eredményeit később a gyakorlat igazolta, a forrás vizében azóta a klórbenzol nyomokban megjelent.




5.10. ábra: Talajra számított szennyezőanyag koncentrációk egy klórbenzol szennyezés példa-ján

A térmodellek alkalmazásának az itt felsoroltakhoz hasonló korlátai nincsenek. Akkor célszerű térmodelleket felállítani, amikor egymás alatt több - egymástól jelentősen eltérő tulajdonságokkal jellemezhető - képződmény található a modellezett térrészen belül, a modellezett földtani képződmények alakja szeszélyesen változik, a modellen belüli függőleges vízforgalom nem hanyagolható el.

A modell dimenziószámának megválasztása alapvetően egy földtani, vízföldtani adatoptimalizálási probléma. A dimenziószám emelkedésével a megoldást érintő elvi korlátok csökkennek, miközben a modell adatigényének exponenciális növekedésével a számítási adatrendszer megbízható kialakításának esélyei rohamosan csökkennek. A feladat tehát annak a legegyszerűbb, de az adott feladat szempontjából még reprezentatív modellnek a meghatározása, amely még megfelel a terület földtani és vízföldtani megkutatottságának és képes az összes fontos terjedési folyamat hatásainak a szimulációjára.

Egy további lehetőséget jelent **összetett modellek** alkalmazása. Összetett modell alkalmazásán azt értjük, hogy egy adott problémát a vizsgált jelenségtől függően különböző dimenziószámú modellel vizsgálunk. Ilyen összetett modell készült a D&D Kft felsőzsolcai lerakója környezetében végezett modellezés[17] során, ahol egy tározó körül kialakított résfalnak a hatását a környező talajvizek áramlására egy vízszintes síkszivárgási modellel, míg a résfal alatt potenciális átszivárgó hozamokat térmodellel vizsgáltuk. A térmodell-vizsgálat néhány részletét a sztochasztikus modellezésről szóló fejezetben mutatom be.

## 5.3. A transzportmodellek speciális alkalmazási lehetőségei

### *5.3.1. Sztochasztikus modellek gyakorlati alkalmazása*

A sztochasztikus modellezés statisztikai alapon kezeli a hidrodinamikai és transzportfolyamatokat. Az ilyen megközelítés esetén a különböző hidraulikai, vízföldtani és transzportjellemzőket vagy azok egy részét olyan statisztikai változóknak tekintjük, amelyeknek valamilyen ismert diszkrét matematikai eloszlásuk van. Ezt a diszkrét eloszlást egy folytonos eloszlásfüggvénnyel közelítve generálható tetszőleges számú olyan modell-adatrendszer, amelyben a kiválasztott paraméterek statisztikai eloszlása megfelel a tapasztalt diszkrét eloszlásra fektetett folyamatos eloszlásfüggvénynek. Amennyiben ezen alapadatrendszer sorozattal elvégezzük a hidrodinamikai és transzportszámításokat, úgy a korábban kapott determinisztikus eredmény helyett egy olyan eredményhalmazhoz jutunk, ahol az eredményeket is mint valószínűségi változókat kezelhetjük. Ilyen módon pl. egy laboratóriumi oszlopkísérlet során egy adott kiindulási koncentráció és geometriai elrendezés mellett, egy adott időpontra nem egy koncentráció értéket, hanem a szimulációk számától függő koncentrációsereget kapunk, amelynek ezután meghatározható az statisztikai eloszlása. Így végülis pl. egy adott koncentrációnál magasabb effluens koncentrációérték megjelenését pl. a szivárgási tényező, vagy a szemeloszlás stb. függvényében egy adott valószínűségi szinttel jellemezhetjük.

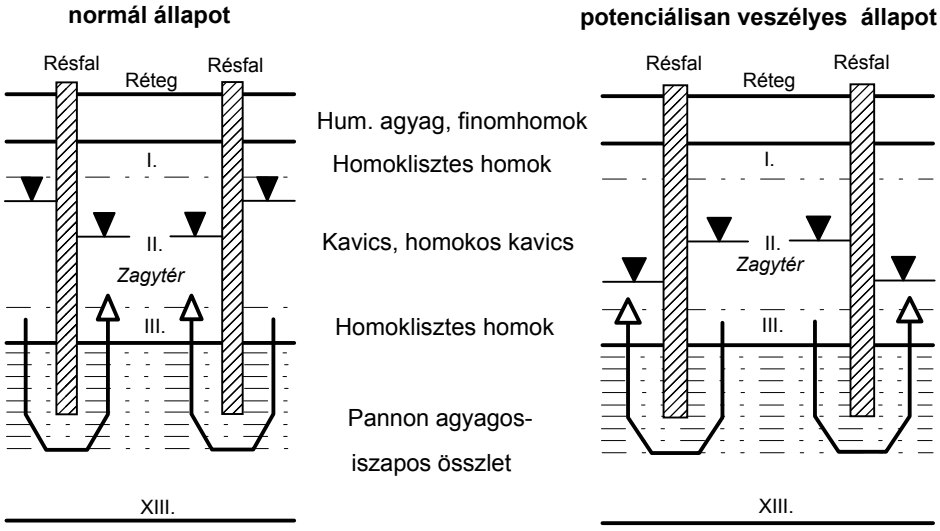
Ez az elgondolás konform a hulladék-elhelyezés földtani követelményrendszerének megalkotásánál megfogalmazott optimális kockázat elvével[18], amely kimondja, hogy gyakorlatilag minden emberi tevékenység (így egy hulladéklerakó megépítése is) bizonyos kockázattal jár. Ezt a kockázatot megszüntetni nem lehet, ugyanakkor feltétlenül ezt egy az optimálishoz közelítő, minimális szintre kell csökkenteni. Ugyanakkor a kockázat zérushoz közelítése egyre nagyobb ráfordításokkal jár, éppen ezért egy minimális kockázatot tudatosan vállalni kell. A stochasztikus modellezési megközelítéssel már egy-egy koncentrációérték bekövetkezéséhez matematikai valószínűségi szinteket tudunk rendelni, így a számítási eredmények kiértékelése során meghatározható a tevékenység során vállalt kockázat nagysága.

Egy tipikus sztochasztikus modellezési folyamatot a D&D Kft felsőzsolcai lerakója környezetében elvégezett modellezés[19] példáján mutatok be.

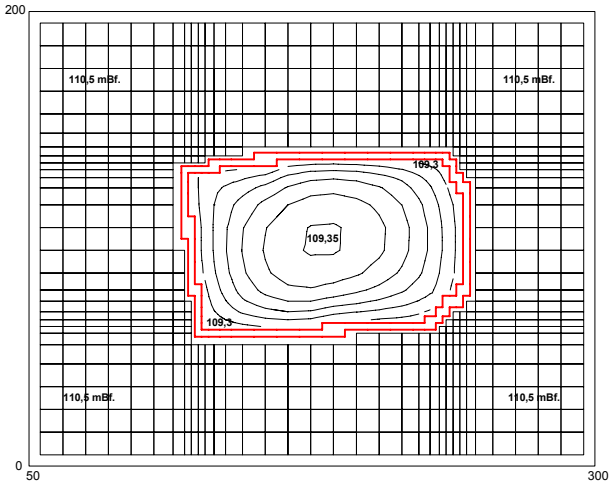
Adott a Sajó teraszrétegeire telepített veszélyes hulladékok lerakására kialakított lerakó, amelynek szigetelése - a környező megfigyelőkutakból vett vízminták elemzése alapján - nem megfelelő. A tervező több variáns közül a lerakó résfallal történő körülzárása mellett döntött, amely

résfalat mintegy 1,5 m mélységben a teraszréteg feküjét képző pannon agyagos-iszapos összletbe kívánt bekötni. A résfalon belül szivárgórendszer kiépítését tervezik, amelynek legmélyebb pontja a Sajó 5 napos időtartamra számított vízállása 90%-os valószínűségi szinten, azaz az említett 90%-os valószínűségi szinten maximálisan 5 napig állhat elő olyan hidraulikai helyzet, hogy a résfalon belül magasabb a víz szintje, mint azon kívül. Ez az eset tekinthető a legkedvezőtlenebb variánsnak, azaz amikor a hidraulikus gradiens iránya a tározótérből kifelé mutat.

A feladat a körülzárt tároló és környezete közötti maximális vízforgalom megállapítása volt, majd a tározótérből kijutó legmagasabb koncentráció meghatározása volt. Ebben az esetben egy háromdimenziós modell kialakítására került sor kedvező, illetve kedvezőtlen esetben kialakuló nyomásállapotok számítására. Ezt követően sztochasztikus transzport számítást végeztünk a biztonság kedvéért 10 nap hosszúságúnak feltételezett potenciálisan veszélyes helyzetben a tárolótérből a résfal megkerülésével kijutó szennyezőanyag okozta maximális koncentráció meghatározására. (5.11.ábra)




5.11.ábra: A felsőzsolcai lerakó környezetében kialakuló hidraulikai állapotok




5.12.ábra: A felsőzsolcai résfallal határolt tárolótér körül kialakuló hidraulikai állapot (Normál üzemállapot)

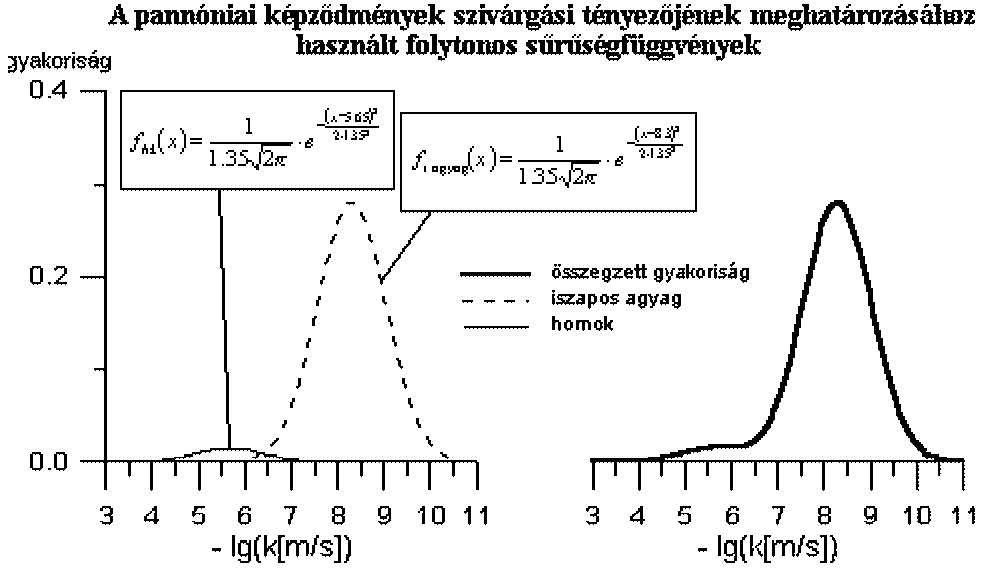
Az 5.11.ábrán vázolt esetekre egy 13 réteges modellt alakítottam ki, amelynek segítségével a normál és a potenciálisan veszélyes helyzetre számítottam a szivárgási sebességteret. A modell specialitását a valójában ismeretlen felépítésű pannóniai összlet modellezése jelentette. Az említett rétegösszlet a Pannon-tenger partszegélyi fáciesében alakult ki. Néhány cm vastag; 1—

10 m, ritkán 50 m nagyságrendű horizontális kiterjedésű kőzettestek komplexuma, amelynek anyaga agyag, iszap, valamint sokszor jó vízvezető képességgel rendelkező homok. Ezt az összletet általában egy - pannon agyagos-iszapos - összletbe vonják össze, valamilyen átlagos tulajdonságokkal felruházva, azonban mindez a valóságot csak nagyon kis mértékben közelíti. Az ilyen rétegsort leginkább egy véletlen módon egymásra települt kisméretű kőzettest sorozatnak kell tekinteni, ahol az egyes képződmények tulajdonságai megfelelnek a valóságban tapasztalt tulajdonságoknak. Ez a meggondolás vezetett el a pannóniai képződmények szivárgási tényezőjének valószínűségi változónak tekintéséhez. A számítás 250 különböző irányítottan véletlenszerű eloszlású szivárgási tényező-halmazt generáltunk, minden adathalmaz közel 15 000 elemet tartalmazott.

A pannon agyagos iszapos összletre vonatkozóan - flexibilis falú permeabiméterrel végzett - saját mérési adatok álltak rendelkezésre, melyek jól tükrözték a az összlet inhomogenitását. Az eredmények szerint a szivárgási tényezők mért értékei az $5\cdot10^{-8}\div5\cdot10^{-10}$ m/s intervallumba estek. A pannóniai rétegösszlet tartalmaz alárendelten homokokat is, amelyeknek szivárgási tényezője $1\cdot10^{-5}\div5\cdot10^{-7}$ m/s közötti a miskolci építésföldtani térképezés adatai alapján. A homokok térfogati arányát 5%-nak tételeztük fel, ezért először minden egyes adat generálása esetén egy egyenletes eloszlású véletlen számot generáltunk a 0-1 intervallumban és amennyiben a kapott érték 0-0.05 közötti volt úgy a képződményt homoknak, egyébként iszapos-agyagnak tekintettük. A második lépcsőben a homokokra vagy iszapos agyagra az 5.13. ábra szerinti folytonos eloszlásfüggvények segítségével a szivárgási tényezőket generáltuk. Ilyen feltételezések mellett kialakulhatnak kedvező vagy kedvezőtlenebb esetek, jobban vagy kevésbé vízvezető rétegösszlet-részek stb. a véletlen valószínűségi változóként értelmezett, anyagi tulajdonságok diszkrét térbeli megoszlása szerint.

Hasonló meggondolást az alkalmazott földtani tudományok egyéb területein már alkalmaztak, hiszen Németh[20] hasonló közelítést alkalmazott a bükkábrányi külfejtés pannon rétegösszletben kialakított rézsűi állékonyságának vizsgálatakor a kohézió és a belső súrlódási szög esetében, amit Rétháti[21] kiterjesztett az összes kőzetfizikai jellemzőre, kidolgozva a valószínűségelméleten alapuló tervezés alapelveit az állékonyságvizsgálaton túl, a talajok határfeszültségének és süllyedések előrejelzésének meghatározására is.

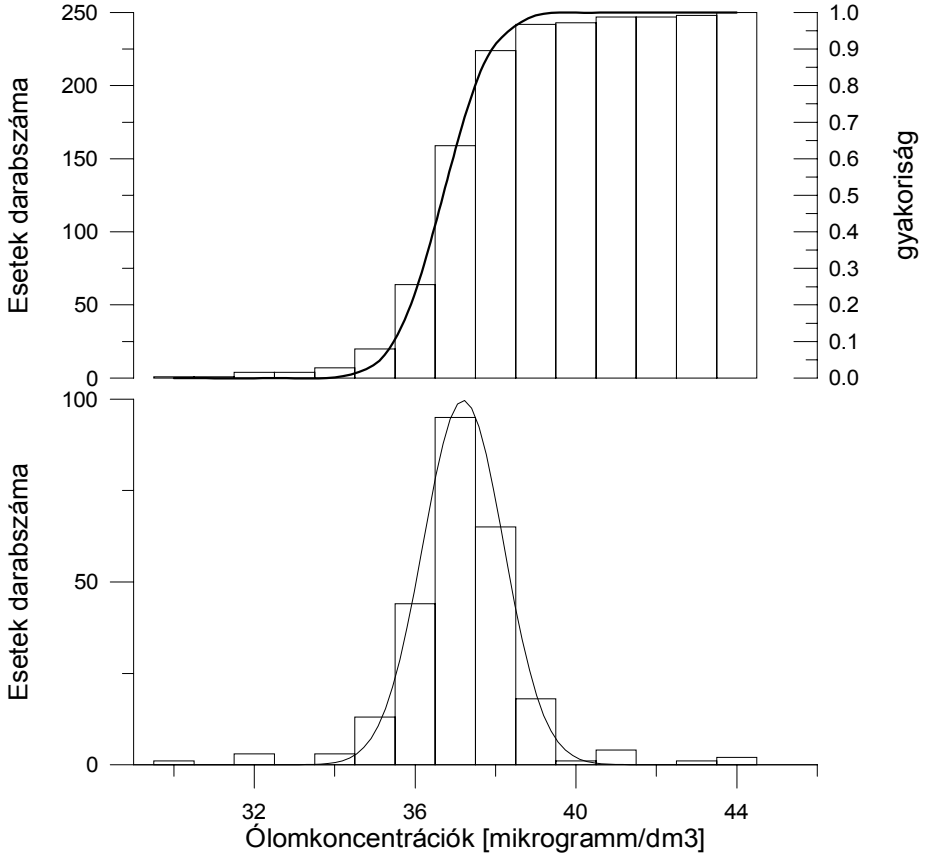
A transzport számítást az ólom esetében mind a 250 véletlenszerűen felvett adatállományra elvégeztük. Tekintettel az így kapott hatalmas adatmennyiségre a továbbiakban csak közvetlenül a résfal alatti elemekben, a legveszélyeztetettebb, Sajó felőli oldalon kialakult ólom koncentrációkat vizsgáltuk (5.11. ábra, X-XIII. rétegek). Az eredmények közül kiválasztottuk a maximális és a minimális koncentrációkat, illetve számítottuk az átlagos koncentrációt is. Ezen eredmények eloszlását az 5.14. ábra mutatja be.



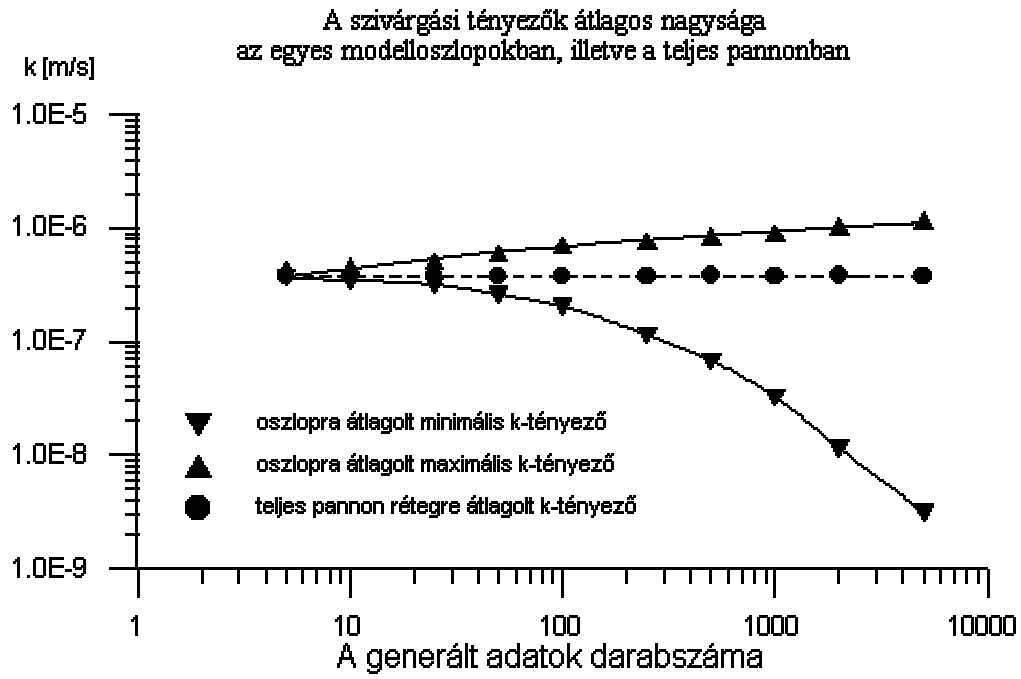
5.13. ábra: A felsőzsolcai zagytér feküjében található, pannon képződmények szivárgási tényezőinek generálásához felhasznált sűrűségfüggvények

A koncentrációértékek alapján pl. elmondható, hogy a résfal alatt kialakuló koncentrációk a számított esetben 80% valószínűségi szinten nem haladja meg a 37 μg/l koncentrációt.

A kiindulási adathalmaz elemzésére a statisztikai alapokon meghatározott szivárgási tényező értékeket függőleges irányban, a véges differencia megoldáshoz kijelölt oszlopok mentén - a sorosan kötött ellenállások elvének megfelelően átlagoltam:




5.14. A valószínűségi változóként definiált maximális ólom-ion koncentráció a résfal alatt



5.15.ábra: A pannóniai összlet szivárgási tényezője minimális, maximális és átlagértékének alakulása véletlen szimuláció esetén

$k_{rétegoszlop} = \frac{\sum_{1}^{n} M_i}{\sum_{1}^{n} \frac{M_i}{k_i}}$ ahol $M_i$ a i-dik réteg vastagsága, $k_i$ az i-dik réteg szivárgási tényezője, n az összes réteg száma a rétegoszlopban, majd az egyes rétegoszlopokra számított szivárgási tényezőket a felületükkel súlyozva számítottam a teljes területre közelítőleg jellemző szivárgási tényező értéket. Az 5.15 ábráról látszik, hogy miközben a rétegre vonatkoztatott átlagos szivárgási tényező alig változott, addig az egyes oszlopokra átlagolt szivárgási tényezők egy széles intervallumban szóródtak. A jelenség jobb bemutatására további adatsorozatokat, összesen 5000 darabot állítottam elő.

A bemutatott megközelítés a számított koncentrációértékeknek egy valószínűségi szinthez kötését jelenti, aminek meghatározása csak a számítási időt növeli, ugyanakkor az eredményeknek egy jobb értelmezését teszi lehetővé.

### *5.3.2. A hulladéklerakók aljzatszigetelésének egyenértékűsége*

A hulladéklerakók aljzatszigetelése természetes és mesterséges anyagú összetevőkből áll. A természetes anyagú szigetelőréteg lehet megfelelő beépítési tulajdonságokkal rendelkező iszap vagy sovány-közepes agyag, lehet laza üledékeknek bentonitos keveréke, de ide sorolhatjuk a bentonit szigetelő paplanokat is. A mesterséges anyagú szigetelőrétegek közül legelterjedtebb a geomembrán szigetelés, de ide sorolható az aszfalt- vagy aszfaltbeton-szigetelés, és kísérletek történtek talaj-cement keverékekkel is. [22]

Bármilyen anyagból is készüljön a szigetelés, szükséges a szigetelőréteg hatékony működésének egyenértékűség vizsgálatokkal való a bizonyítása. Az egyenértékűség megállapítása során azt vizsgáljuk, hogy adott csurgalékvizek mellett a tárolótéren kívül kialakuló legmagasabb koncentráció hogyan viszonyul a szabványokban rögzített felépítés mellett kialakuló koncentrációkhoz. Általánosságban két szigetelés akkor egyenértékű, ha a szigetelésen átjutó szennyezőanyag koncentrációja adott időintervallum alatt azonos nagyságú. A magyarországi jogi szabályozás (102/1996. (VII.16) Korm.rendelet) szerint az egyenértékűséget 30 éves időintervallumra kell bizonyítani.

#### *5.3.2.1. Az egyenértékűség meghatározási módjai*

Egyenértékűnek mondjuk azt a két tetszőleges szigetelőrendszert, amely a transzport-folyamatokat tekintve azonos idő alatt azonos mentett oldali koncentrációkat tesz lehetővé. Az egyenértékűség megállapításához egy viszonyítási alapra, azaz egy előírt szigetelőrendszerre van szükség, amit a hatályos jogszabályok és a hazai depónia-építési gyakorlat alapján határozhatunk meg. Ezek után vizsgálhatjuk a kérdéses szigetelőrendszernek - bármely viszonyítási alaphoz viszonyított - egyenértékűségét.

##### **5.3.2.1.1. Az egyenértékűség viszonyítási alapjai**

Az egyenértékűség vizsgálata során egy viszonyítási alapot jelentenek a törvényekben rögzített előírások, és a hazai szakmai gyakorlatban követett irányelvek.

A későbbiek során ilyen viszonyítási alapnak tekintjük a 102/1996. (VII.16) Kormányrendeletben az I. és II. osztályú veszélyes hulladékokra meghatározott aljzatszigetelő-rendszer felépítését. Ebben az esetben a védelmi rendszer alsó része egy $k<10^{-8}$ m/s szivárgási tényezőjű, minimálisan 3 m vastagságú altalaj, amin 3x20 cm vastag, $k<10^{-9}$ m/s szivárgási tényezőjű épített, természetes anyagú szigetelőréteg, majd azon $d \geq 2.5$ mm HDPE geomembrán fekszik. Ezt geotextília, majd 30 cm vastagságú $k>10^{-4}$ m/s szivárgási tényezőjű szivárgó-ellenőrző réteg

fedi. A drénrétegre újabb geomembrán, geotextília és újabb drénréteg kerül minimum 30 cm vastagságban, amelyet egy szűrőréteg vagy egy felső geotextília takar be.

Kommunális hulladékok esetében az 1994 novemberében a KVM által kiadott közleményt az 1996. évi önkormányzati céltámogatások odaítéléséhez készített műszaki követelményrendszerről vehetjük alapul, amelyet a hazai regionális kommunális hulladéklerakó-építési gyakorlat is követ. A közelmúltban megépült lerakók esetében minimális követelményként a KVM közlemény III. építési osztályának követelményrendszerét vették alapul, ahol az előírás alkalmas altalaj megléte (1.5-3 m vastagság, $k<5\cdot10^{-8}$ m/s), valamint 3x20 cm vastag, $k<10^{-9}$ m/s szivárgási tényezőjű épített, természetes anyagú szigetelőréteg , HDPE lemez d≥2 mm, geotextília és az azt borító, 30 cm vastagságú $k>10^{-4}$ m/s szivárgási tényezőjű szivárgóréteg, amit szűrőréteg vagy geotextília fed.[23]

Bár nem gyakori, mégis előfordul, hogy a hatóságok megelégednek - megfelelő földtani viszonyok mellett - 3x20 cm vastag, $k<10^{-9}$ m/s szivárgási tényezőjű, épített, természetes anyagú geomembrán borítás nélküli szigetelő-réteggel, amit geotextília, 30 cm vastagságú $k>10^{-4}$ m/s szivárgási tényezőjű szivárgóréteg fed, szűrőréteg vagy geotextília borítással.

#### 5.3.2.1.2. Az advektív egyenértékűség (hidrodinamikai egyenértékűség)

Az advektíve egyenértékűnek mondjuk azt a két tetszőleges szigetelőrendszert, amely pusztán az advektív transzport-folyamatot tekintve - az azonos hidrodinamikai fluxusok következtében kialakuló kémiai anyagáramok miatt - adott idő elteltével azonos mentett oldali koncentrációkat tesz lehetővé. Tekintve, hogy az advektiv szennyezőanyag fluxusokat koncentráció és a szivárgás Darcy-féle átlagsebessége (lamináris szivárgást feltételezve) szorzataként kaphatjuk, így az advektiv egyenértékűség valójában hidrodinamikai egyenértékűséget jelent, azaz a két szigetelőrendszerre vonatkozó átlagos szivárgási sebesség megegyezését.

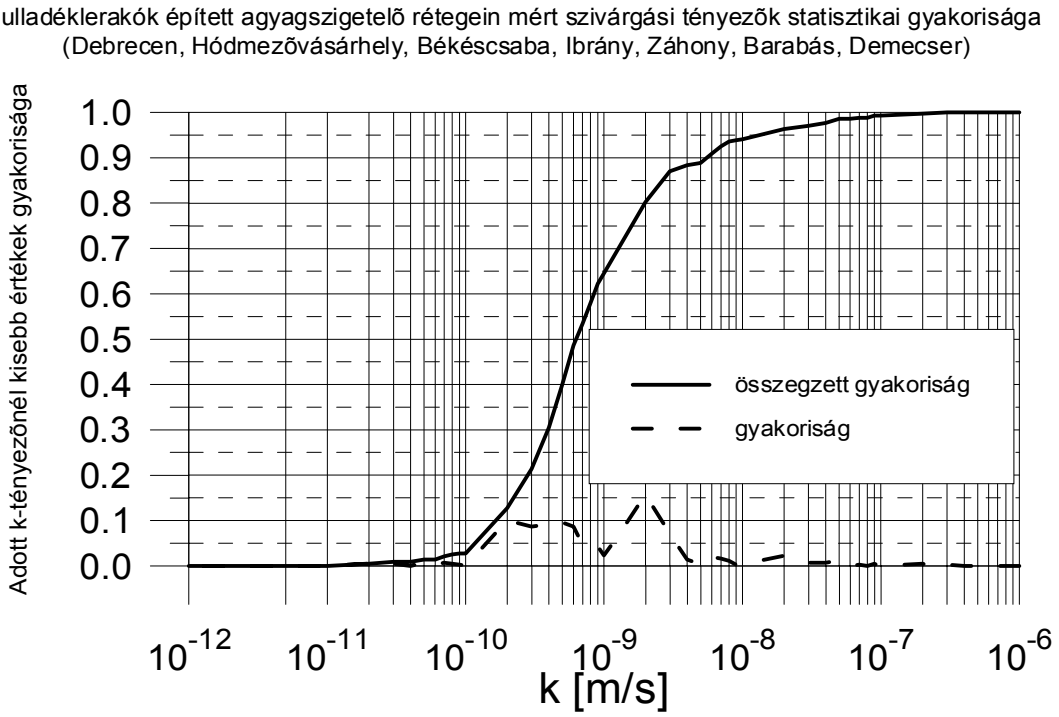
Tekintve egy adott rétegoszlop átlagos szivárgási tényezőjét: $\bar{k} = \frac{\sum_{i=1}^{n} m_i}{\sum_{i=1}^{n} \frac{m_i}{k_i}}$, a hidrodinamikai egyenértékűség esetén $\bar{k}_{szabványos} \geq \bar{k}_{vizsgált}$.

Az átlagos szivárgási tényezők meghatározásához, azaz az advektiv egyenértékűség vizsgálatához ismernünk kell a gyakorlatban alkalmazott szigetelőanyagok vízzárósági mutatóit és vastagságát.

A természetes anyagú, épített szigetelőrétegek minimális megkívánt szivárgási tényezője $k<10^{-9}$ m/s, amit az építés közben csőinfiltrométeres vizsgálatokkal folyamatosan ellenőriznek. A hazai hulladéklerakók mérési gyakorlata azt mutatja, hogy az egyes beépített rétegek nem minden ponton felelnek meg a követelményeknek. Összes saját mérésünket alapul véve megállapítható, hogy a hazai műszaki színvonal és építési gyakorlat mellett, csak átlagosan a mérési pontok 65 %-án volt azonnal megfelelően megépítve a szigetelőréteg, további 20% esetében tűrhető értékeket mértünk (5.16. ábra). Ez a viszonylagosan alacsony megfelelési arány arra utal, hogy nem könnyű olyan anyagot találni, amely megfelelően beépíthető, nem fordítanak kellő figyelmet az építési agyag előzetes vizsgálataira, valamint, hogy nem egyenletes a beépítés minősége sem.

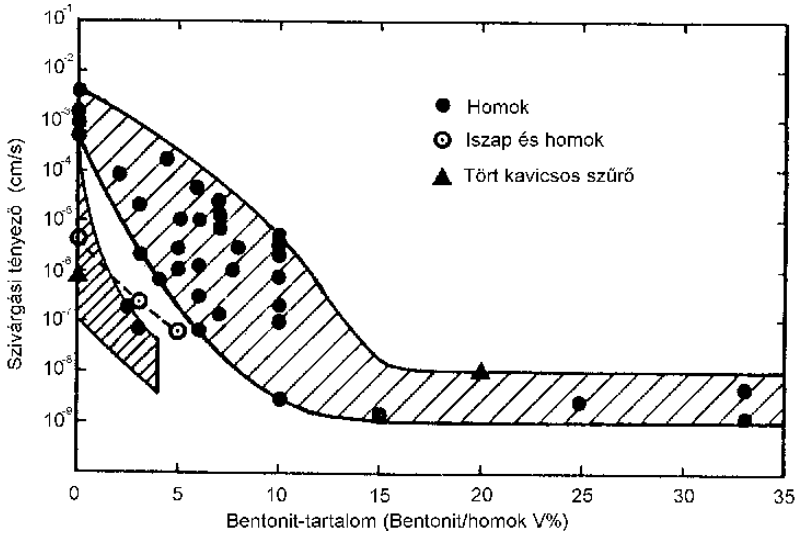
Az egyenértékűségi vizsgálatoknál ennek a bizonytalanságnak ellenére is abból indulhatunk ki, hogy a beépített rétegre – a legkedvezőtlenebb esetben is - teljesül a $k=10^{-9}$ m/s feltétel, hiszen ha ez nem igaz, akkor a réteget tovább javítják a beépítési technológia változtatásával és/vagy bentonit adagolással. Lehetőség van homokoknak, vagy a területen található bármilyen, nem szervesanyag-tartalmú talajnak bentonittal való keverésére, amellyel általában $10^{-8}$ - $10^{-10}$ m/s szivárgási tényezőt lehet elérni. Hazai lerakóink építési hibáinak javítása során szerzett tapasztalataink szerint a homokok, homoklisztek bentonitos vízzáróság növelését csak bentonit-keverőtelepek létesítésével lehet hatékonyan megvalósítani, ellenkező esetben olyan mértékű

bentonit túladagolásra van szükség a megkívánt vízzáróság elérésére, hogy az a műveletet teljesen gazdaságtalanná teszi.




5.16. ábra: Épülő hulladék-lerakókon mért szivárgási tényezők előfordulási gyakorisága (n=440)

Chapuis[24] laboratóriumi sorozatmérései alapján megállapította, hogy a homok bentonit keverékek szivárgási tényezőjét 0-15 V% között változtatva a szivárgási tényező kb. $10^{-5}$ m/s-ról átlagosan $10^{-10}$ m/s-ra csökkent, azonban további bentonitadagolás már nem volt hatással a vízzáróságra. Ilyen jó eredményeket elérni terepi viszonyok között nehéz, a kapott adatokat a legkedvezőbb esetnek kell tekinteni. (5.17. ábra )




5.17. ábra: Bentonit, homok keverékek vízzáróságа Chapuis, 1990 szerint

Schababerle, Wagner és Czurda[25] vizsgálataikat speciálisan szigetelésre kifejlesztett bentonit-tartalmú anyagokon végezték. A Tixoton nevű aktivált Na-montmorillonit tartalmú szigetelőanyag szivárgási tényezőjét $1{,}5 \cdot 10^{-11}$ m/s-nak, a Montigel nevű aktivált Ca-montmorillonit tartalmúét $6{,}2 \cdot 10^{-10}$ m/s-nak, a Calcigel nevű természetes Ca-montmorillonit tartalmúét $9{,}5 \cdot 10^{-9}$

m/s-nak, míg az azonos módon beépített kaolinitét $1{,}4\cdot10^{-9}$ m/s-nak mérték. Oberdorfer és Czurda [26] Na-bentonittal javított depóniamező esetén $2.45\cdot10^{-10}$ m/s, organofil bentonittal javított mező esetében $3.57\cdot10^{-10}$ m/s, míg zeolittal javított mezőben $1{,}22\cdot10^{-10}$ m/s értékű szivárgási tényezőről számolt be próbatömörítések során.

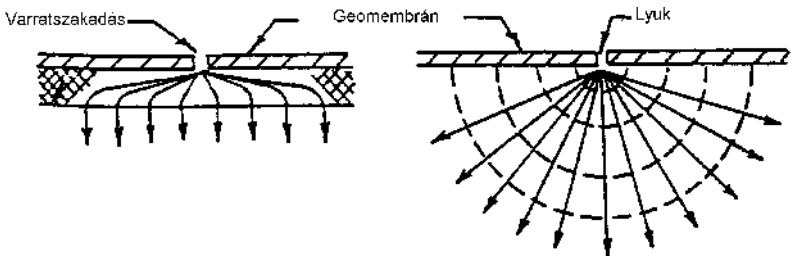
Az agyag szigetelőréteget sok országban pótolni igyekeznek más anyagokkal. Az egyik ilyen lehetőség bentonitpaplanok alkalmazása, amelyek két tűnemezelt geotextília közé szórt, mintegy 5 kg/m$^2$ mennyiségű nedves közegben megduzzadó, aktivált bentonitporból áll. Példaképpen a Bentofix fantázianevű bentonitpaplanok vízzárósága $k=10^{-12}$ - $10^{-11}$ m/s nagyságrendű (az átlagos érték $2.5\cdot10^{-11}$ m/s) 1 cm körüli, duzzadt állapotban mért, átlagos vastagság mellett[27].

Egy másik lehetséges megoldás permetezett aszfalt, illetve aszfaltbeton alkalmazása, amelyek szivárgási tényezője $10^{-9}$ és $10^{-11}$ m/s közötti, vastagsága 4-8 mm. A hidraulikus aszfalt esetében a $3.3\text{-}1\cdot10^{-11}$ m/s szivárgási tényezőt mértek 61 mm vastag mintán, az útburkoló aszfalt 56 mm vastagságú rétege 12 - $1\cdot10^{-11}$ m/s szivárgási tényezővel bírt[28]. Eggloffstein és Burkhardt[29] szerint a magas bitumentartalmú, szigetelőaszfaltok esetében $k<10^{-12}$ m/s értékkel számolhatunk. Az aszfaltbeton alkalmazása során $10^{-11}$ m/s szivárgási tényezőt lehet elérni[30].

A geomembránok vízáteresztő-képességére vonatkozóan eltérő adatokkal rendelkezünk: Folkes - szakirodalmi adatok alapján - a $5\cdot10^{-12}$ m/s<k<$5\cdot10^{-14}$ m/s feltevéssel él. Münk és szerzőtársai[31] műanyag fóliákon átszivárgó toluol-oldatok fajlagos tömegét vizsgálták. A műanyagoknak - a hasonló a hasonlóban való oldódási elvet figyelembe véve - a tartós szivárgási tényezője ezekkel a szerves vegyületekkel szemben a legalacsonyabb. Felhasználva a toluol sűrűségét (870 kg/m$^3$) ez körülbelül $10^{-10}$ - $10^{-11}$ m/s szivárgási tényezőt jelent.

Müller-Kirchenbauer és szerzőtársai[32] tartós, mintegy 5 év hosszú kísérletei alapján kadmium mozgását vizsgálva $6\cdot10^{-16}$ m/s szivárgási tényezőt mutattak ki HDPE geomembránon keresztül. Rowe és szerzőtársai[33] 2 mm vastag HDPE fóliának a szivárgási tényezőjét NaCl oldat migrációját követve $1.3\cdot10^{-14}$ m/s-nak mérték. Már ez a néhány adat is mutatja, hogy nagyságrendileg is eltérők a mérési eredmények, ugyanakkor jól látszik, hogy a vizsgált komponens anyagi minősége döntő mértékben határozza meg a szivárgási tényező nagyságát.

A számításainkban azonban nem csak az ép, hanem a károsodott szigetelőrétegnek a hatását is figyelembe kell venni. Bár napjainkban már létezik olyan elektromos mérési módszer, amellyel akár az elkészült és drénkaviccsal lefedett geomembrán hibahelyei kimutathatók, mégis számolnunk kell azzal, hogy ilyen ellenőrzés hiányában egy-egy depónián a drénréteg terítése közben a munkagépek mozgása lerakónként néhány hibahely létrejöttéhez vezet. A hibahelyeknek két típusa lehetséges: a geomembrán kilyukadása vagy a varratok felszakadása. A lyukadás esetében egy gömb-, a varratszakadás esetén hengerszimmetrikus áramlási tér alakul ki, ahol az átszivárgó csurgalékvíz-mennyiség számítható. Amennyiben a geomembrán alatt geotextília található, akkor ez a jól vezető textilréteg lehetőséget nyújt az esetleges lyukképződés esetén a szennyezőanyagnak egy r sugarú környezetében való szétterjedésére, így a gömbszimmetrikus áramlási tér helyett egy függőleges tengelyű hengerszimmetrikus szivárgás alakulhat ki.




5.18. ábra: A geomembrán sérüléseinek típusai (Oweis és Khera (1990), Fukuoka nyomán)

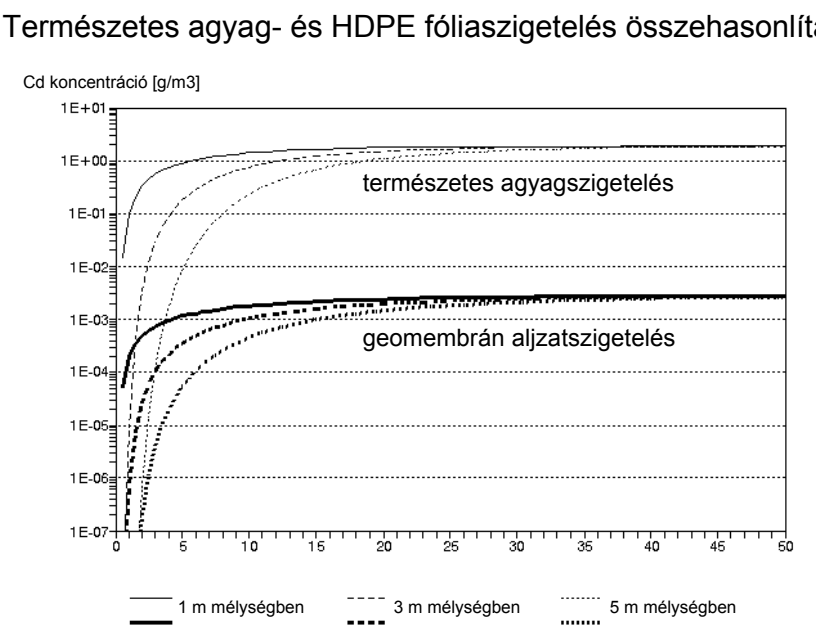
Lyuk esetén a gömbszimmetrikus áramlási térben a beszivárgó Q vízhozam a kör alakúnak feltételezett lyuk $r_0$ sugara, a $h_0$ vízoszlopmagasság és a geomembrán alatti réteg $k_1$ szivárgási tényezőjének a függvénye: $Q = 2\pi k_1 h_0 r_0$. A lyuk sugara változó, többnyire 1 cm alatti, a lyukak gyakorisága legrosszabb esetben sem több mint 2 db/ha irodalmi becslések alapján.

Varratszakadás esetén egy L hosszúságú, $r_0$ szélességű folytonossági hiány keletkezik. Ekkor a q fajlagos hozamot $q = \frac{\pi k_1 (h_R - h_0)}{\ln R / r_0}$ képlettel kapjuk, ahol $h_R$ a nyomásszint egy adott R távolságban.

Amennyiben a geomembrán alatt geotextília van (5.18 ábra), akkor a lyuk vízszállító képessége korlátlanná válhat. Tekintve egy R átmérőjű kör alakú sérülést, amelyet geotextília tölt ki, a Q maximális hozamot a $Q = R^2 \pi \sqrt{2gh_0}$ képlettel számíthatjuk. Amennyiben a lyuk aszimmetrikus, mint egy varrat, akkor egy $2r_0$ szélességű szakadási hely esetén az egységnyi hosszra eső q maximális vízhozam $q = 2r_0 \sqrt{2gh_0}$ [34].

A felsorolt alapadatok és képletek segítségével ezután bármely szivárgási tényező számítási módszert felhasználva a hidrodinamikai egyenértékűség számítható (5.1. táblázat).

Az Oweis és Khera által javasolt módon vizsgáltuk egy pótlólagosan beépített fóliaszigetelés hatását a kialakuló koncentrációkra egy dunántúli vegyi üzemnek az esetén, ahol a veszélyeshulladék-lerakót - egy mintegy 5 m vastag agyaggal fedett - karsztosodott karbonátos összletre telepítették. A depóniák szanálásakor merült fel a lehetősége egy pótlólagos geomembránszigetelés beépítésének. Lévén a beavatkozás igen költséges, előzetes számítógépes analízissel kívánta a tervező és a beruházó az elképzelés hatékonyságát ellenőrizni.




5.19 ábra: Kadmium-ion koncentrációk alakulása a természetes védőrétegen, illetve sérült szigetelőfólián keresztül történő transzport esetén

A számításokat a transzportegyenlet analitikus megoldásának segítségével végeztük el, úgy, hogy - a jelenlegi helyzetet szimulálandó - a szennyezés 5 m vastag agyagrétegen keresztül történő mozgását számítottuk. Ezek után a kijutó szennyezőanyag mennyiségét a nyugat-európai irányelveknek megfelelően redukáltuk, modellezve azt az esetet , amikor a beépített fóliaszigetelés megsérül. A 5.19 ábrán látható, hogy a tározótérből a környezetbe jutó veszélyes szennyezőanyag koncentrációja még egy sérült fóliaszigetelésen keresztüljutva is legalább három nagyságrenddel kisebbre adódott, mintha csak a mintegy 5 m vastagságú természetes agyagrétegen

migrál keresztül. Ebben az esetben az ép szigetelésre számítást végezni a megbecsülhetetlenül kicsiny szennyezőanyag fluxusok miatt nehéz, és gyakorlati szempontból a probléma így már értelmetlenné válik [35].

A egyenértékűség számítások során a legkedvezőtlenebb esetet szükséges feltételeznünk, hogy az ekvivalencia a vizsgált depónia minden pontján teljesüljék. Ilyen megfontolás alapján a csurgalékvíz túlnyomását 30 cm-nek tételeztük fel, mivel a lerakók drénrendszerének méretezésénél az a feltétel, hogy a csurgalékvíz nyugalmi nyomásszintjének mindig a kavics szűrőrétegen belül kell maradnia. Mivel a hazai gyakorlatban 30 cm vastag kavicsréteget szoktak alkalmazni, így a lehetséges maximális csurgalékvíz-nyomás a szigetelőrétegen 30 cm. Második feltételezésként az esetleges geomembrán-meghibásodást is ezen a legnagyobb hidraulikus gradiensekkel jellemzett területrészen tételeztük fel. A lyukon vagy varratszakadáson keresztül történő beszivárgás hatástávolsága nem haladja meg a fél métert, ezért a további egyenértékűség-számítások egy olyan 1x1m alapterületű hasábra vonatkoznak, ahol a meghibásodás a hasáb középpontjában van. Tekintettel a kis távolhatásra, valamit arra, hogy ezen meghibásodások - a maximum 2 db/ha gyakoriságnál fogva - feltételezhetően eléggé távol esnek egymástól, ezért a leírt megközelítés számottevő egyszerűsítést nem tartalmaz.

A veszélyes hulladéklerakóknál alkalmazott kétrétegű geomembrán szigetelés esetén csak az alsó membrán esetleges sérülése nem kritikus állapot. Amennyiben a felső membrán sérül, úgy a két szigetelőfólia közé az Oweis és Khera által megadott maximális csurgalékvíz-hozamok jutnak, amelyeket azonban a köztes drén elvezet. Mint kedvezőtlen állapotot azt tételeztük ebben az esetben fel, hogy a felső geomembránon keresztül történő beszivárgás eredményeképpen folyamatosan 1 cm magas csurgalékvíz-oszlop nyomás terheli az alsó geomembránt, amely a továbbiakban ugyanúgy viselkedik, mint bármely kommunális hulladéklerakó alatti geomembrán.

Valamennyi számítás során alapkövetelmény, hogy a hidraulikus gradiens nagyobb legyen a küszöbesésnél, hogy a szivárgás meginduljon.

5.1. táblázat: Szigetelőrétegek hidrodinamikai egyenértékűsége

| **Anyag** | **A [m]** | **B [m]** | **C [m]** |
|---|---|---|---|
| Épített agyagszigetelőréteg | 0.6 | 3.1 | 93 |
| 3% bentonit és homok keveréke | 300 | 1550 | 46500 |
| 5% bentonit és homok keveréke | 60 | 310 | 9300 |
| 10% bentonit és homok keveréke | 0.6 | 3.1 | 93 |
| 15% bentonit és homok keveréke | 0.048 | 0.248 | 7.44 |
| Geomembrán | 0.00048 | 0.00248 | 0.0744 |
| Geomembrán 5 mm átm. lyukkal | 0.00282 | 0.01457 | 0.4371 |
| Geomembrán 1 cm átm. lyukkal | 0.0057 | 0.02945 | 0.8835 |
| Geomembrán 2 cm átm. lyukkal | 0.0114 | 0.0589 | 1.767 |
| Bentonitszőnyeg | 0.015 | 0.0775 | 2.325 |
| Hidraulikus szigetelőaszfalt | 0.018 | 0.093 | 2.79 |

A. 60 cm vastag, $k=10^{-9}$ m/s agyagszigetelőréteggel egyenértékű vastagság [m]
B. geomembránnal fedett, 60 cm vastag, $k=10^{-9}$ m/s agyagszigetelő-réteggel egyenértékű vastagság [m] (kommunális hulladéklerakó)
C. kétrétegű geomembránnal fedett, 60 cm vastag, $k=10^{-9}$ m/s agyagszigetelő-réteggel egyenértékű vastagság [m] (veszélyeshulladék-lerakó)

A táblázatból jól látható, hogy pusztán hidraulikai szempontok alapján az erősen vízrekesztő geomembrán, bentonitszőnyeg és aszfaltszigetelések közel egyenértékűnek mutatkoznak.

### *5.3.2.2. A diffúzív egyenértékűség*

A hidrodinamikai egyenértékűséghez hasonlóan diffúzív egyenértékűség is definiálható. Akkor tekinthetünk két szigetelőréteget diffúzió szempontjából egyenértékűnek, amennyiben a diffúzió következtében a mentett oldalon kialakuló koncentrációk mindkét esetben, adott idő alatt azonos nagyságúak.

Tekintve Fick első törvényének egyik analitikus megoldását a homogén féltérre instacioner állapotban a koncentrációkat a $c_i(x,t) = c_{0i} erfc \frac{x}{2\sqrt{D_i t}}$ képlet alapján számíthatjuk, ahol $c_{0i}$ az i szennyezőanyag időben állandó koncentrációja, amely a diffúziót indukáló koncentrációkülönbségeket okozza, $D_i$ a közegnek az adott i szennyezőanyagra vonatkozó diffúzióállandója, $c_i$ a koncentráció x helyen t időpontban.

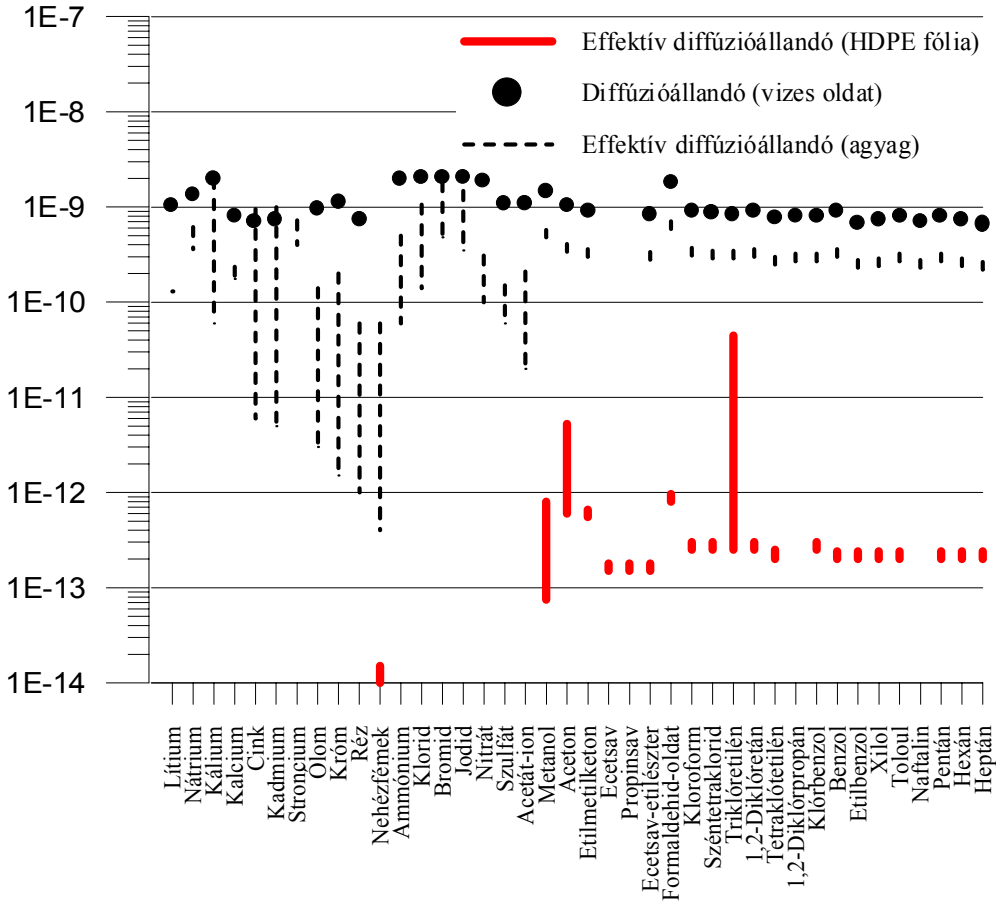
Annak érdekében hogy A és B szigetelőrétegnek a diffúzív egyenértékűségét kimondhassuk a $c_i$ koncentrációknak egyenlőnek kell lenniük azonos $c_{0i}$ koncentrációk, x távolságok és t idők esetén, azaz $\frac{x_A}{\sqrt{D_A}} = \frac{x_B}{\sqrt{D_B}}$. Így B szigetelőanyagnak az $x_A$ vastagságú A anyaggal való diffúzív egyenértékűsége akkor áll fenn, ha $x_B \geq \frac{x_A \sqrt{D_B}}{\sqrt{D_A}}$ [36].

Az 5.2 táblázat és az "A" melléklet néhány szerző által publikált, különböző szennyezőanyagokra vonatkozó diffúzióállandókat foglal össze, amely adatok - saját mérések hiányában - a diffúzív egyenértékűség tájékoztató számítására használhatók fel.

Lehetséges a diffúzív egyenértékűséget a diffúzív vezetőképességek alapján is meghatározni (5.2. táblázat). A diffúzív vezetőképességet a szennyezőanyagok és a víz mozgásának analógiájára definiálhatjuk. Az egységnyi felületen, egységnyi idő alatt keresztüláramló vízmennyiséget (fluxust) a hidraulikus gradiens és a vízvezető-képesség mérőszáma, a szivárgási tényező szorzata adja. Hasonlóképpen definiálhatjuk a szennyezőanyag-fluxust, azaz az egységnyi felületen, egységnyi idő alatt diffúzió miatt átáramló anyagmennyiséget, mint a koncentráció-gradiens és a diffúzív vezetőképesség szorzatát. Ennek alapján két szigetelőréteg a diffúzió szempontjából akkor egyenértékű, amikor a diffúzív vezetőképességük azonos[37].

Amennyiben például számítjuk a diffúzive 2 mm vastag HDPE fóliával egyenértékű agyagszigetelőréteg vastagságokat vagy fordítva, a 60 cm vastag agyaszigetelő-réteggel diffúzive egyenértékű fóliavastagságokat (5.3. táblázat), úgy kitűnik, hogy a geomembránok diffúzióval szembeni gátképessége mindösszesen 5-10 cm vastagságú agyagréteg hasonló képességének felel meg. Ha mindehhez, hozzávesszük azt a tényt, hogy a fóliaszigetelések esetén a fóliasérülésre és ezáltal a diffúzióállandónak a nagyságrendekkel való megnövekedésével lehet számolni (a HDPE fólia helyére az épített agyagszigetelés anyaga kerül), belátható a kombinált szigetelőrendszerek szükségessége.

Az egyes szennyezőanyagok diffúzív transzportját tehát egyértelműen a diffúzióállandók nagysága határozza meg. Összehasonlítva a vizes oldatban mért diffúzióállandót, az agyag-szigetelőrétegben, illetve a geomembránban mért effektív diffúziós együtthatóval (5.20 ábra) látható, hogy bár a HDPE fólián keresztül egységnyi vastagság esetén 1-2 nagyságrenddel kisebb szennyezőanyag fluxusok jutnak át. Megállapítható az is, hogy a nehézfémek diffúzióképessége kisebb, mint a szerves vegyületeké.




5.20 ábra: A vizes oldatban, az agyagszigetelőrétegben és a geomembránon mért diffúzióállandók nagyságrendje irodalmi adatok alapján

5.2 táblázat

Néhány szerves vegyület és a nehézfémek diffúzió állandói és diffúzív vízzárósága (Müller-Kirchenbauer, et. al. , 1997[38])

| Anyag-csoport | Anyag | Diffúzióállandó | | | Diffúzív vezetőképesség | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | Híg vizes oldat ($10^{-10}$ $m^2/s$) | A szig.rét. pórusvize ($10^{-10}$ $m^2/s$) | HDPE geo-membrán ($10^{-12}$ $m^2/s$) | Geo-mem-brán (m/s) | Ásv. Szig.réteg (m/s) | Kombinált szig.réteg (m/s) |
| Kationok | Zn,Cd,Hg,Pb, Ni,Cu,Mn,Na | | | | $<<1\cdot10^{-15}$ | $3{,}0\cdot10^{-10}$ | $<<1\cdot10^{-15}$ |
| Anionok | Klorid | | | | $<<1\cdot10^{-14}$ | $1{,}2\cdot10^{-10}$ | $<<1\cdot10^{-14}$ |
| Alkohol | Metanol | 14,5 | 4,8 | 0,8 | $1{,}5\cdot10^{-12}$ | $2{,}0\cdot10^{-10}$ | $1\cdot10^{-12}$ |
| Keton | Aceton | 10,2 | 3,4 | 0,6 | $8\cdot10^{-12}$ | $1{,}4\cdot10^{-10}$ | $8\cdot10^{-12}$ |
| | Etilmetilketon | 9,0 | 3,0 | 0,55 | $9\cdot10^{-11}$ | $1{,}2\cdot10^{-10}$ | $5\cdot10^{-11}$ |
| Szerves savak | Ecetsav | | | 0,15 | $1\cdot10^{-12}$ | $0{,}8\cdot10^{-10}$ | $1\cdot10^{-12}$ |
| | Propinsav | | | 0,15 | $5\cdot10^{-12}$ | | |
| Észter | Ecetsav-etilészter | 8,4 | 2,8 | 0,15 | $5{,}5\cdot10^{-11}$ | $1{,}1\cdot10^{-10}$ | $4\cdot10^{-11}$ |
| Aldehid | Formaldehid-oldat | 17,8 | 5,9 | 0,8 | $5\cdot10^{-12}$ | $2{,}4\cdot10^{-10}$ | $5\cdot10^{-12}$ |
| Klórozott Szénhid-rogének | Kloroform | 9,2 | 3,1 | 0,25 | $2{,}0\cdot10^{-9}$ | $1{,}2\cdot10^{-10}$ | $1{,}1\cdot10^{-10}$ |
| | Széntetraklorid | 8,7 | 2,9 | 0,25 | $2{,}5\cdot10^{-8}$ | $1{,}2\cdot10^{-10}$ | $1{,}2\cdot10^{-10}$ |
| | Triklóretilén | 8,4 | 2,9 | 0,25 | $2{,}0\cdot10^{-8}$ | $1{,}2\cdot10^{-10}$ | $1{,}2\cdot10^{-10}$ |
| | 1,2-Diklóretán | 9,1 | 3 | 0,25 | $2{,}0\cdot10^{-9}$ | $1{,}2\cdot10^{-10}$ | $1{,}1\cdot10^{-10}$ |
| | Tetraklótetilén | 7,6 | 2,5 | 0,25 | $2{,}0\cdot10^{-6}$ | $1\cdot10^{-10}$ | $1\cdot10^{-10}$ |
| | 1,2-Diklórpropán | 8 | 2,7 | | | | |
| | Klórbenzol | 8,1 | 2,7 | 0,25 | $5\cdot10^{-9}$ | $1{,}1\cdot10^{-10}$ | $1{,}1\cdot10^{-10}$ |
| Aromás Szénhid-rogének | Benzol | 9,0 | 3,0 | 0,2 | $4{,}5\cdot10^{-9}$ | $1{,}2\cdot10^{-10}$ | $1{,}2\cdot10^{-10}$ |
| | Etilbenzol | 6,8 | 2,3 | 0,2 | | | |
| | Xilol | 7,2 | 2,4 | 0,2 | $1\cdot10^{-7}$ | $1\cdot10^{-10}$ | $1\cdot10^{-10}$ |
| | Toloul | 8 | 2,7 | 0,2 | $2{,}0\cdot10^{-8}$ | $1\cdot10^{-10}$ | $1\cdot10^{-10}$ |
| | Naftalin | 7 | 2,3 | | | | |
| Alifás Szénhidrogének | Pentán | 8 | 2,7 | 0,2 | $3\cdot10^{-7}$ | $1{,}1\cdot10^{-10}$ | $1{,}1\cdot10^{-10}$ |
| | Hexán | 7,2 | 2,4 | 0,2 | $2\cdot10^{-6}$ | $1{,}0\cdot10^{-10}$ | $1{,}0\cdot10^{-10}$ |
| | Heptán | 6,6 | 2,2 | 0,2 | $1\cdot10^{-5}$ | $0{,}9\cdot10^{-10}$ | $0{,}9\cdot10^{-10}$ |

5.3.táblázat: Geomembrán és agyagszigetelőréteg diffúziv egyenértékűsége

| Anyag | Effektív diffúzió-állandó [$10^{-10}$ $m^2/s$] | Effektív diffúzió-állandó [$10^{-12}$ $m^2/s$] | 2mm HDPE fóliával egyenértékű agyag vastagsága | 60 cm agyag szigeteléssel egyenértékű fólia vastagsága |
|---|---|---|---|---|
| | Agyag | Geomembrán | [cm] | [mm] |
| Metanol | 4.8 | 0.8 | 4.9 | 0.00167 |
| Aceton | 3.4 | 0.6 | 4.8 | 0.00187 |
| Etilmetilketon | 3 | 0.55 | 4.7 | 0.00202 |
| Ecetsav | | 0.15 | | |
| Propionsav | | 0.15 | | |
| Ecetsav-etilészter | 2.8 | 0.15 | 8.6 | 0.00017 |
| Formaldehid-oldat | 5.9 | 0.8 | 5.4 | 0.00110 |
| Kloroform | 3.1 | 0.25 | 7.0 | 0.00039 |
| Széntetraklorid | 2.9 | 0.25 | 6.8 | 0.00045 |
| Triklóretilén | 2.9 | 0.25 | 6.8 | 0.00045 |
| 1,2-Diklóretán | 3 | 0.25 | 6.9 | 0.00042 |
| Tetraklótetilén | 2.5 | 0.25 | 6.3 | 0.00060 |
| 1,2-Diklórpropán | 2.7 | | | |
| Klórbenzol | 2.7 | 0.25 | 6.6 | 0.00051 |
| Benzol | 3 | 0.2 | 7.7 | 0.00027 |
| Etilbenzol | 2.3 | 0.2 | 6.8 | 0.00045 |
| Xilol | 2.4 | 0.2 | 6.9 | 0.00042 |
| Toloul | 2.7 | 0.2 | 7.3 | 0.00033 |
| Naftalin | 2.3 | | | |
| Pentán | 2.7 | 0.2 | 7.3 | 0.00033 |
| Hexán | 2.4 | 0.2 | 6.9 | 0.00042 |
| Heptán | 2.2 | 0.2 | 6.6 | 0.00050 |

### *5.3.2.3. A konvektív-diszperzív egyenértékűség*

A konvektív és diszperzív transzportfolyamatokat is tekintetbe vevő egyenértékűség-számítási módszert Shackelford[39] dolgozott ki. Az eljárás lényege, hogy az egydimenziós transzportegyenlet alapján a különböző szennyezőanyag komponensekre a szigetelőrendszeren való átjutás idejét számítjuk, és az egyenértékűség akkor áll fenn, ha az elérési idő a két egymástól eltérően felépített rendszerben azonos. A méretezés során választ tudunk adni arra, hogy adott csurgalékvíz-koncentráció esetén mekkora szigetelőréteg vastagságra van szükség ahhoz, hogy adott idő alatt az átjutó folyadék koncentrációja egy megkívánt érték (pl. szabvány) alatt maradjon. A vizsgálatot a csurgalékvízben előforduló, vagy várhatóan előforduló elemekre külön-külön kell elvégezni.

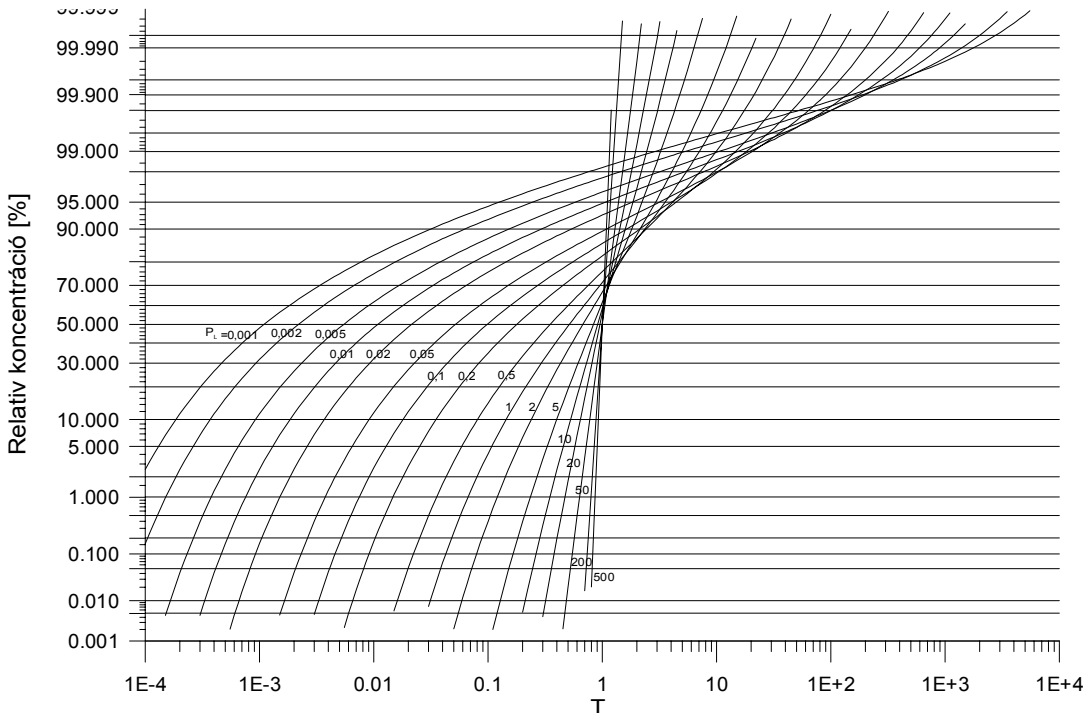
A módszer a telített porózus kőzetekben mozgó, oldott anyagra vonatkozó, egydimenziós advektív-diszperzív transzport egyenlet analitikus megoldásán alapul:

$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2}[\mathrm{erfc}(z_1) + \exp(z_2) \cdot \mathrm{erfc}(z_3)]$, ahol c az oldat koncentrációja a szigetelőbe való belépéskor, $\mathrm{erf}(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_o^z \exp(-\xi^2) d\xi$, $\mathrm{erfc}(z) = 1 - \mathrm{erf}(z)$, $z_1 = \frac{x - v_s t}{2\sqrt{D_{eff} \cdot t}}$, $z_2 = \frac{v_s . x}{D_{eff}}$ és $z_3 = \frac{x + v_s \cdot t}{2\sqrt{D_{eff} \cdot t}}$, ahol x a szigetelőréteg felszínétől mért távolság.

Bennünket az érdekel, hogy egy adott koncentráció (csökkenés) eléréséhez adott időtartam (a depónia szigetelőképességének megkívánt időtartama, mai gyakorlat szerint 30-50 év) alatt mekkora úthosszra van szükség, ami nem más, mint a szükséges szigetelőréteg vastagsága (L). A korábbi kifejezéseket dimenziónélküli paraméterekkel felírva kapjuk: $z_1 = \frac{1 - Co_R}{2\sqrt{Co_R / Pe_L}}$, $z_2 = Pe_L$, $z_3 = \frac{1 + T_R}{2\sqrt{T_R / Pe_L}}$, ahol $Co_R = \frac{v_s \cdot t}{R_d \cdot x} = \frac{v_R \cdot t}{x} = \frac{v_R \cdot t}{L}|_{x=L}$, $Pe_L = \frac{v_s \cdot x}{D_{eff}} = \frac{v_s \cdot L}{D_{eff}}|_{x=L}$.

Itt $Pe_L$ az egydimenziós traszportra vonatkozó Peclet-szám, $Co_R$ a Courant-szám a szorpciót is figyelembe véve. Az $R_d = \frac{v_s}{v_R}$ a retardációs (késleltetési) tényező, nem adszorbeálódó elemekre $R_d = 1$, egyébként $R_d > 1$. A késleltetésre vonatkozóan az 5.5 táblázat nyújt támpontot. A fentiek alapján a koncentráció változása a térben és az időben:

$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2}[\mathrm{erfc}(\frac{1 - Co_R}{2\sqrt{Co_R / Pe_L}}) + \exp(Pe_L) \cdot \mathrm{erfc}(\frac{1 + Co_R}{2\sqrt{Co_R / Pe_L}})]$ Ezt az összefüggést szemlélteti az 5.21 ábra, amit az agyagszigetelőrétegek méretezésénél lehet jól használni.




5.21 ábra: A relatív koncentráció ($C/C_0$) és a $Co_R$, $Pe_L$ speciális Courant- és Peclet-számok kapcsolata (Shackelford nyomán, 1990.)

A méretezés menete:

- becsüljük a szigetelőréteg vagy védőréteg vastagságát (L),
- meghatározzuk a $Pe_L = \frac{v_s . L}{D_{eff}}$ értékét,
- a $C/C_0$ és $Pe_L$ ismeretében az 5.21 ábrából megkapjuk $Co_R$ értékét,
- a $t_l = \frac{Co_R . R_d . L}{v_s}$ összefüggésből az átjutási idő számítható,
- összehasonlítjuk, hogy $t_l > t_{szüks.}$ fennáll-e, ha nem, az L újabb becsült értékével a számolást megismételjük.

5.5 táblázat : A késleltetés nagysága néhány szerző szerint[40]
Czurda-Wagner (1988), Wagner (1992), Shackelford (1990), Czurda-Wagner (1991), Eggloffstein-Burkhardt-Mainka (1996)

| A vizsgált anyag | A szennyezőkomponens | R |
|---|---|---|
| Karbonátmentes plasztikus agyag (Eisenberg) | Zn | 3-6 |
| Karbonátmentes plasztikus agyag, édesvízi molassz (Hinterschlagen) | Zn | 5-9 |
| Kvarter szalagos agyagmárga (Ravensburg) | Zn | 10-20 |
| Meszes, harmadidőszaki tengeri agyagmárga (Wiesloch) | Zn | 10-20 |
| Márga (Mühlacker) | Zn | ~ 10 |
| Márga (Mühlacker) | Cd | ~ 7 |
| Márga (Mühlacker) | Pb | ~ 70 |
| Illites-kaolinites agyag (Eisenberg) | Cd | 6 |
| Illites-kaolinites agyag (Eisenberg) | Cr | 23-35 |
| Illites-kaolinites agyag (Eisenberg) | Cu | 6 |
| Illites-kaolinites agyag (Eisenberg) | Pb | 15-22 |
| Illites-kaolinites agyag (Eisenberg) | Zn | 5,2-7,5 |
| Tömörített agyag (kaolinit) | Cl | 1 |
| Tömörített agyag (kaolinit) | K | 26,3 |
| Tömörített agyag (kaolinit) | Zn | 92,7 |
| Tömörített agyag (kaolinit) | Cd | 371 |
| Szalagos agyagmárga (Badener Tegel) | Sr | 95-145 |
| Szalagos agyagmárga (Badener Tegel) | Cs | 48-78 |
| Iszapos, agyagos talajok | Szervetlen és szerves kationok | 3-80 |
| Iszapos, agyagos talajok | Szervetlen és szerves anionok | 2-5 |
| Iszapos, agyagos talajok | Semleges, poláros szerves vegyületek | 1-5 |
| Iszapos, agyagos talajok | Semleges, apoláros szerves vegyületek | 1-2 |

Példaként határozzuk meg, hogy egy $k = 5\times10^{-11}$ m/s szivárgási tényezőjű, $n = 0,37$ hézagtérfogatú, 0,9 m vastag szigetelőrétegen a kloridkoncentráció mennyi idő múlva éri el a 250 mg/l megengedett értéket, ha a szennyezett oldali konentráció 3484 mg/l, a klorid agyagra vonatkozó effektiv diffúzióállandója $4,7\text{x}10^{-10}$ m/s$^2$ , a hidraulikus gradiens 1,33 és késleltetéssel nem számolunk.

Ekkor a klorid-ionra számított szivárgási sebesség a pórusokban:

$$v_s = \frac{k \cdot I}{n} = \frac{5 \cdot 10^{-11}\,\text{m/s} \cdot 1,33}{0,37} = 1,8 \cdot 10^{-10}\frac{\text{m}}{\text{s}}.$$

A dimenziónélküli $Pe_L$ tényező:

$$Pe_L = \frac{v_s \cdot L}{D^*} = \frac{1,8 \cdot 10^{-10}\,\text{m/s} \cdot 0,9\text{m}}{4,7 \cdot 10^{-10}\,\text{m}^2/\text{s}} = 0,35$$

Mivel $C/C_0 = 0,72$ és $Pe_L = 0,35$, a 5.21. ábrából $Co_R = 0,05$. Így

$$t_l^{Cl} = \frac{Co_R \cdot R_d \cdot L}{v_s} = \frac{0,05 \cdot 1,0 \cdot 0,9\text{m}}{1,8 \cdot 10^{-10}\,\text{m/s} \cdot 3,163 \cdot 10^7\,\text{s/év}} = 8,1\text{év}$$

A klorid-ion koncentrációja tehát - a szigetelőréteg túloldalán - 8,1 év múlva haladja meg az előírt értéket.[41]

### *5.3.2.4. Az általános egyenértékűség*

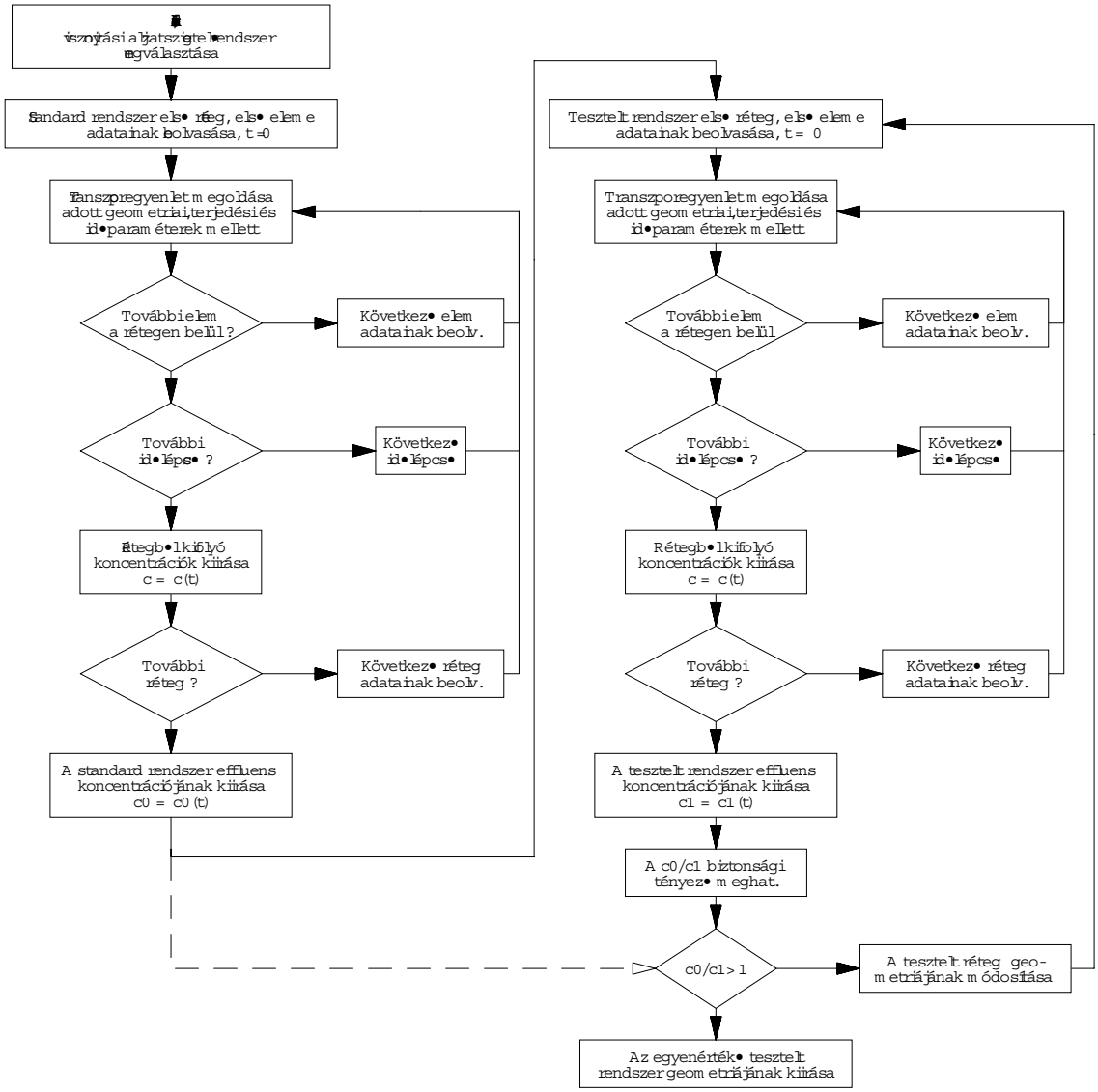
Mint az a konvektív-diszperzív egyenértékűség bemutatásánál is látszott a transzportegyenlet analitikus megoldásain alapuló egyenértékűség számítások még számos nemkívánatos megkötést tartalmaznak. Nagyon zavaró, hogy az eltérő anyagi tulajdonságú geomembrán, aszfalt, természetes, de tömörített agyag stb. rétegeket nem lehet figyelembe venni, ugyanakkor kedvező, hogy az egyszerűbb számítások esetén közvetlenül az egyenértékű rétegvastagságot kapjuk meg.

Az egyenértékűség számítások korábban meglévő korlátait kiküszöbölendő egy, a transzportegyenletnek a véges differencia elven való megoldásán alapuló egyenértékűség számítási módszert mutatok be. A módszer célja hogy tetszőleges számú, ugyanakkor egymástól jelentősen eltérő anyagi tulajdonságokkal jellemezhető rétegeken keresztüláramló szennyezőanyag-fluxusok számítása váljék lehetővé.

A számítás első lépcsőjében azonos tulajdonságokkal jellemezhető térrészekre bontjuk a vizsgált rendszert. Tekintettel arra, hogy az aljzatszigetelő rendszeren az átszivárgás uralkodóan függőleges , ezért egy 1x1 m alapterületű oszlopra történik a szennyezőanyag-mérleg elemeinek meghatározása. Bár egy ilyen kiválasztott hasábnak természetszerűen az oldalfalán keresztül is történik szennyezőanyag áramlás (diagonális diszperzív hozamok), ugyanakkor ezek a hozamok elhanyagolhatók tekintettel arra a feltételezésre, hogy a vizsgált térrész körül ugyanilyen transzportfolyamatokkal jellemezhető térrész található. Ebből a feltételezésből az következik, hogy amekkora szennyezőanyag mennyiség az oldalfalakon a transzverzális diszperzió miatti hozamokkal kikerül, ugyanakkora anyagmennyiség jut a szomszédos térrészből a vizsgált oszlopba. Horizontális irányban diffúzió nem következhet be, mivel ilyen irányban a részletezett peremfeltételek mellett koncentráció-gradiens nem alakul ki. Végül a konvektív egyenértékűség számításnál leírt indokok miatt egy lokális szennyezőanyag-forrásnak, úgymint egy geomembrán-sérülés a lyuk környezetétől oldalirányban számított 0.5 m-en belül a hatása elhanyagolhatóvá válik.

A megoldás célja egy olyan többcélú modul kialakítása, amely egy egységbe beérkező, időben tetszőlegesen változó koncentráció-eloszlású, de állandó sebességű folyadék esetén az adott

geometriájú egységből eltávozó folyadék koncentrációjának időbeli változását számítja a transzportegyenlet felhasználásával (5.22 ábra). Így egy influens koncentrációfüggvény esetén a vizsgált elem és a vizsgált folyadék transzportjellemzőinek függvényében számítja az effluens koncentrációt. Amennyiben egymáson több eltérő transzportjellemzőkkel leírható réteg fekszik, úgy a felső réteg effluens koncentrációi képezik az alsó réteg influens koncentrációit. Ezzel a valójában explicit véges differencia megoldással a problémát néhány programsor nagyszámú ismétlésével oldjuk meg.




5.22 ábra: A numerikus egyenértékűség-számítás menete

A véges differencia megoldás azonban csak a koncentrációnak az időbeli változását tudja megadni. Éppen ezért az egyenértékűség bizonyítására a számításokat a viszonyítási alapként használt standard rétegsorral (ld. az egyenértékűség viszonyítási alapjai) meg szükséges ismételni. Ezután definiálhatunk egy $\nu_c(t = \text{const}) = \frac{C_{\text{ki standard}}}{C_{\text{ki tervezett}}}$ koncentrációra értelmezett biztonsági tényezőt, ahol ha $\nu \geq 1$ vagy egy meghatározott biztonsági tényező, akkor az egyenértékűség biztosított. A számítás során természetesen különböző vastagságú réteggel szükséges a számításokat elvégezni, majd a az adott $\nu_c$ biztonsági tényezőhöz tartozó rétegvastagságot meghatározni.

Természetesen létezik egy időre vonatkoztatott biztonsági tényező, mikoris azt számítjuk, hogy egy megadott mentett oldali koncentrációt hányszor akkora idő alatt tesz lehetővé a vizsgált

szigetelőrendszer, mint a standard rétegoszlop. Ekkor tehát az időre vonatkoztatott biztonsági tényező $\nu_t(C = \text{const}) = \frac{t_{\text{ki tervezett}}}{t_{\text{ki standard}}}$.

### *5.3.2.5. Az általános és a konvektív-diszperzív egyenértékűségi számítások összevetése*

A konvektív-diszperzív egyenértékűség számítások előnye a gyorsaság és az egyszerűség, ugyanakkor csak egyféle terjedési tulajdonságokkal jellemzett rétegre történhet a számítás. Tekintettel arra, hogy az egydimenziós transzportegyenlet analitikus megoldását használjuk fel, a megoldás matematikai szempontból egzakt, pontos.

A numerikus megoldás ezzel szemben a transzportegyenlet közelítő megoldásán alapul, bármilyen terjedési, illetve kémiai folyamat, amely matematikai formában megfogalmazható követhető vele, azonnal szolgáltatja a koncentráció mélység és időbeli változásának karakterisztikáját, tetszőleges rétegoszlop modellezhető vele. A két megoldási mód összevetését az 5.6 táblázat foglalja össze:

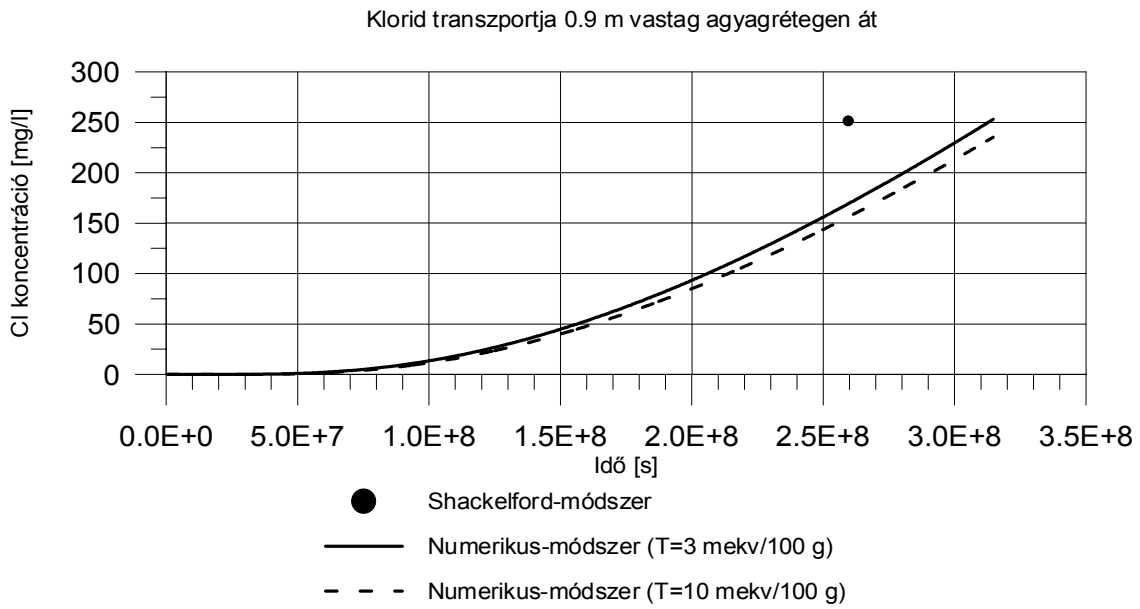
5.6.táblázat: Az analitikus és numerikus egyenértékűségszámítás jellemzői

| Jellemző | Analitikus (Shackelford-féle) számítás | Numerikus számítás |
|---|---|---|
| matematikai megoldás | egzakt | közelítő |
| rétegek száma | egy | tetszőleges |
| eredmény | adott mentett oldali koncentrációhoz tartozó idő | koncentráció változás a térben és az időben |
| advekció (konvekció) követése | igen | igen |
| diffúzió követése | igen | igen |
| hidrodinamikai diszperzió követése | részben (diffúzió állandó diszperziós tényezőre cserélésével) | igen (diszperzivitás figyelembevételével) |
| adszorpció követése | lineáris adszorpció | lineáris, nem lineáris: Langmuir, Freundlich izoterma alapján |
| bomlás, biodegradáció követése | nem lehetséges | igen (exponenciális bomlás) |
| kémiai reakciók követése | nem lehetséges | elvileg lehetséges, de a számításokat erősen lassítja |
| csapadékképződés számítása | nem lehetséges | elvileg lehetséges, de a számításokat erősen lassítja |

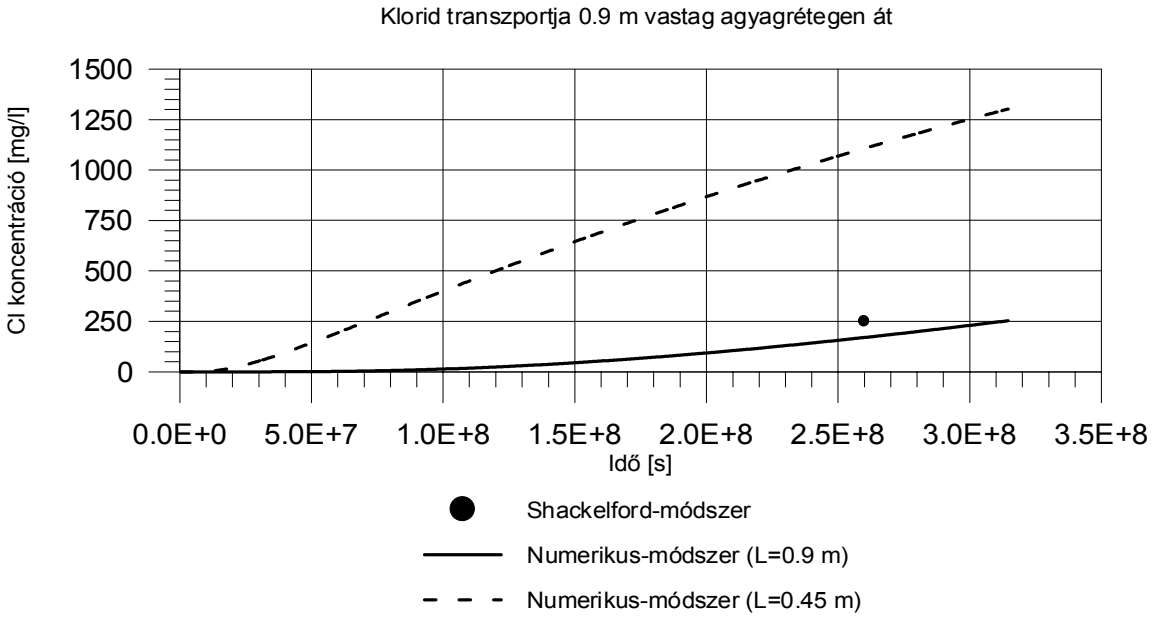
Amennyiben numerikusan is kiszámítjuk a Shackelford-módszer bemutatásakor vizsgált esetek közül pl. a klorid-ion transzportját, akkor a 5.23 ábrán látható eredményekre jutunk. Míg az analitikus megoldás szerint 8.1 év volt szükséges ahhoz, hogy adott paraméterek mellett a mentett oldalon 250 mg/l koncentráció alakuljon ki, addig a numerikus számítás során ehhez mintegy 9.5 év lenne szükséges. Ennek oka lehet, hogy a numerikus számítás során egy minimális mértékű nem lineáris adszorpciót figyelembe vettünk, de a még így is fennálló mintegy 10 %-os eltérés oka a grafikus meghatározás (a Shackelford-féle nomogramról való leolvasás) pontatlanságában kereshető. Itt jól domborodik ki ennek a módszernek a hibája, hogy a nomogram egy-

szerűsíti a megoldást, de 10-15 % leolvasási pontatlanság a $Co_R$ értékben és az áttörési időben is ugyanekkora pontatlanságot okoz.

A numerikus megoldás előnye, hogy számítás közben automatikusan egyéb mélységekben is számítjuk a koncentráció változását (5.24 ábra)




5.23 ábra A numerikus és analitikus egyenértékűség-számítás összevetése




5.24 ábra: A numerikusan számított koncentrációk a mélység függvényében

### *5.3.2.6. Az egyenértékűség kritériumai, egyes szigetelőrétegek hatékonyságának az összevetése*

A hulladéklerakók aljzatszigetelésének egymástól jelentősen eltérő transzportmechanizmusokkal szemben szükséges a hulladékot a környezetétől izolálnia, ezért általánosságban elmondha-

tó, hogy olyan kombinált szigetelő-rendszerek kialakítása kívánatos, amelyeknek egyes elemei transzportfolyamat-specifikusan fejtik ki védőhatásukat. Ennek megfelelően minden szigetelő-rendszernek olyan elemekből szükséges állniuk, amelyek jelentős gáthatással bírnak részben az advektiv és részben diffúzív transzportra, ezen kívül jelentős felületi megkötőképességgel rendelkező elemeket is tartalmaznak. Tekintettel arra, hogy a diszperzív transzport részben a diffúzió, részben a szivárgási sebességgel arányos mértékű mechanikai diszperzió révén alakul ki, az advektiv és a diffúzív egyenértékűség egyidejű teljesülése a diszperzív egyenértékűséget is feltételezi.

Az advektiv transzport elleni szigetelés hatékonyságát a mentett oldali koncentrációk nagysága alapján határozhatjuk meg. A mentett oldali koncentráció nagysága arányos az $\alpha = \frac{k}{m}$ fajlagos hidraulikus vezetőképességgel, ahol k a szivárgási tényező és m a szigetelőréteg vastagsága. Az $\alpha = \frac{k}{m}$ fajlagos hidraulikus vezetőképesség alapján a következő hatékonysági sor állítható fel:

- 2 mm vastag HDPE geomembrán
- 1 cm vastag bentonitszőnyeg
- 2-6 cm vastag speciális aszfalt, aszfaltbeton szigetelés
- 20 cm aktivált Na-montmorillonit tartalmú agyagszigetelőréteg
- 20 cm aktivált Ca-montmorillonit tartalmú agyagszigetelőréteg
- 20 cm közönséges sovány agyagból épített agyagszigetelőréteg
- 20 cm természetes Ca montmorillonit vagy kaolinit tartalmú agyagszigetelőréteg
- 20 cm in situ kevert bentonit-homok, bentonit-homokliszt keverékek

A diffúzióval szembeni gáthatás mértékét a $\beta_1 = \frac{\sqrt{D_{eff}}}{m}$ fajlagos diffúzióképesség mutatja meg, ahol $D_{eff}$ az effektív diffúzió-állandó. Analógia alapján a diszperzióval szembeni gáthatás mértéke is hasonlóan számítható: $\beta_2 = \frac{\sqrt{D^*}}{m}$, ahol $D^*$ a diszperziós együttható.

Az adszorpció mértékét egyrészt az R retardáció (késleltetés) mértékének ismeretében hasonlíthatjuk össze: ekkor kiindulva abból, hogy a retardáció miatt a v valós migrációs sebesség, $v = \frac{v_{H_2O}}{R}$, ezért a mentett oldali koncentráció nagysága - csupán az advektiv folyamatokat tekintve - a $\gamma_1 = \frac{k}{mR}$ tényezővel arányos.

A gátnak az adszorpció miatti izolálóképességének mértékére a kationcserélő kapacitás alapján választ kaphatunk. Elméleti alapokon kationcserélő kapacitás alatt értjük az egységnyi felületű talaj által adszorbeált összes negatív töltés mennyiségét $C/m^2$ egységben. A gyakorlati talajtanban ugyanakkor a kationcserélő kapacitáson 100 g száraz talaj által megkötött összes kation milligramm-egyenértékben kifejezett mennyiségét értjük (mekv/100g talaj), amit T értéknek is hívnak.[42].

Tekintettel a kationcserélő kapacitásnál a 100 g száraz talajra, mint vonatkoztatási rendszerre: az adott kationcserélő kapacitású réteg mentett oldalán kialakuló koncentrációk nagysága arányos mértékét a $\gamma_2 = \frac{\rho_d}{T' m}$ hányadossal, ahol $\rho_d$ a száraz állapot térfogatsűrűsége, T' a kationcserélő kapacitás [mekv/100 g] és m a vastagság. Természetesen a kationcserélő kapacitás segítségével történő összehasonlítás is csak egy becslés, mivel a kationcserélő kapacitás értéke függ az alkalmazott mérési módszertől, a telítő ion anyagi minőségétől, a mérendő és a telítő ionoknak, a talajban található vízben oldódó sóknak a mennyiségétől és minőségétől stb.

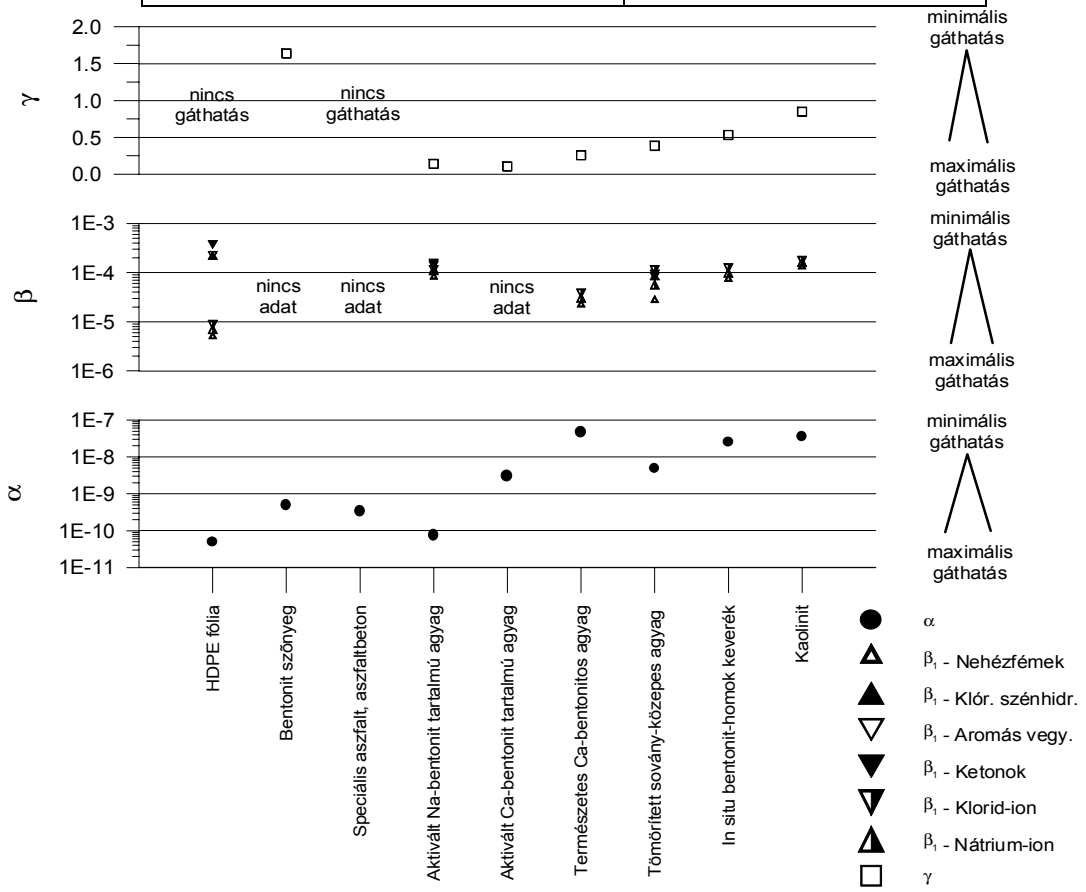
Az egyes szigetelőanyagok gáthatásának mértékéről - a szakirodalomban felkutatott átlagos, jellemző adatok alapján (5.7 és 5.8. táblázat) az 5.25. ábra ad tájékoztatást.

5.7 táblázat: Szigetelőrétegek reprezentativ hidraulikai és diffúziós tulajdonságai

| Szigetelőréteg | Jellemző | | Jellemző effektiv diffúzióállandó [m2/s] | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | Vastag-ság [cm] | k-tényező [m/s] | Nehéz-fémek | Klóro-zott CH | Aromás vegyül. | Ketonok | Klorid | Nátrium |
| HDPE fólia | 0.2 | 1.0E-13 | 1.0E-16 | 2.0E-13 | 2.0E-13 | 5.5E-13 | 3.0E-16 | 2.0E-16 |
| Bentonit szőnyeg | 1 | 5.0E-12 | | | | | | |
| Speciális aszfalt, aszfaltbeton | 6 | 2.0E-11 | | | | | | |
| Aktivált Na-bentonit tartalmú agyag | 20 | 1.5E-11 | 2.7E-10 | 5.5E-10 | 5.3E-10 | 9.8E-10 | 7.7E-10 | 5.0E-10 |
| Aktivált Ca-bentonit tartalmú agyag | 20 | 6.2E-10 | | | | | | |
| Természetes Ca-bentonitos agyag | 20 | 9.5E-09 | 2.0E-11 | | | | 5.6E-11 | 3.8E-11 |
| Tömörített sovány-közepes agyag | 20 | 1.0E-09 | 3.0E-11 | 3.0E-10 | 2.8E-10 | 3.5E-10 | 5.0E-10 | 1.3E-10 |
| In situ bentonit-homok keverék | 20 | 5.0E-09 | 2.2E-10 | | | | 6.0E-10 | 4.0E-10 |
| Kaolinit | 20 | 7.0E-09 | 7.0E-10 | | | | 1.2E-09 | 1.1E-09 |

5.8 táblázat: Szigetelőrétegek mértékadó kationcserélő kapacitása

| Szigetelőanyag | Kationcserélő képesség [mekv/100g] |
|---|---|
| HDPE fólia | ~0 |
| Bentonit szőnyeg | 110 |
| Speciális aszfalt, aszfaltbeton | ~0 |
| Aktivált Na-bentonit tart. agyag | 60 |
| Aktivált Ca-bentonit tart. agyag | 80 |
| Természetes Ca-bentonit tart. agyag | 33 |
| Tömörített sovány-közepes agyag | 22 |
| In situ bentonit-homok keverék | 15 |
| Kaolinit | 10 |




5.25 ábra: A különböző szigetelőrétegek fajlagos izolálóképessége (α - konvektiv transzporttal szemben, β - diffúzív transzporttal szemben, γ - a felületi megkötődést is figyelembe véve)

Az 5.25. ábráról jól látható a geomembránok, a speciális vízzáró bentonitos agyagok és szigetelőpaplanok az advektiv transzporttal szembeni gáthatásukban kiemelkedők, ugyanakkor látható, hogy ettől eltérő a diffúzióval szembeni viselkedésük. A diffúzióval szemben a természetes agyagásványokat tartalmazó szigetelőrétegek (kaolinitek, bentonitok, montmorillonitos agyagok - szennyezőkomponenstől függetlenül - hasonló visszatartó képességgel rendelkeznek. Ez nem igaz ugyanakkor a geomembránokra, ahol a diffúzióval szembeni ellenállóképessége a HDPE fóliának nagyságrendekkel különbözhet a szennyezőanyag anyagi minőségétől függően. A legkisebb a gáthatás a szerves vegyületekkel, a legnagyobb a különféle disszociálódó ionokkal

szemben. A szorpciós folyamat kimutathatatlan nagyságú a geomembránok, illetve az aszfaltszigetelőrétegek esetében, ugyanakkor minden agyagásványtartalmú egyéb szigetelőrétegben fellépnek. Természetszerűleg magasabb a szennyezőanyag-visszatartó hatás a speciális aktivált-bentonit tartalmú szigetelőrétegekben.

### *5.3.2.7. Javaslat az egyenértékűségi vizsgálatok menetére*

A korábbiakban összefoglaltak alapján a hulladéklerakók aljzatszigetelésének egyenértékűség-vizsgálatának menetével kapcsolatosan a következő megállapítások tehetők:

A hulladéklerakó aljzatszigetelésének egyenértékűség vizsgálatát megelőzően meg kell határozni a mértékadó csurgalékvíz-összetételt. A mértékadó csurgalékvíz-összetétel maghatározása alapulhat:

- egy a területen korábban üzemeltetett másik, korábbi hulladéklerakó csurgalékvizének kémiai analízisén,
- ennek hiányában egy másik hazai, hasonló környezetben épült, hasonló összetételű hulladékot befogadó, üzemelő hulladéklerakó csurgalékvizének vegyelemzésén,
- végső esetben pedig szakirodalmi adatokon: pl. Szabó (1995), Gaeke és szerzőtársai (1977), Münk és szerzőtársai (1989) munkái[43] alapján meghatározott értékeken.

Az egyenértékűség vizsgálatnak a következő kémiai anyagcsoportokra, illetve szennyezőkomponensekre kell kiterjedniük:

- 1.csoport: alkáli fémek és alkáli földfémek kationjai ($Na^+$, $K^+$, $Ca^{++}$, $Mg^{++}$, $Ba^{++}$, stb.)
- 2.csoport: halogenidek ionjai (elsősorban $Cl^-$, $I^-$)
- 3.csoport: nehézfémek (Ni, Cu, Zn, Fe, Mn, Cr, Cd)
- 4.csoport: klórozott szénhidrogének (diklór-etán, triklór-etilén, tetraklór-etilén, diklór-propán, klórbenzol, széntetraklorid, kloroform, stb)
- 5.csoport: alkoholok vagy alkohol-származékok (metanol, etanol, glicerin, aldehidek, ketonok, esetleg éterek)
- 6.csoport: aromás vegyületek (benzol, toluol, xilol)

A felsorolt anyagcsoportokból mindig csak a transzportfolyamatok szempontjából legkedvezőtlenebb komponensre szükséges a számítást elvégezni, ahol a kedvezőtlenség mértékét a csurgalékvízben várható koncentráció maximumának és a mentett oldalon 30 vagy 50 év múltán megengedhető koncentráció hányadosa adja (ez a mérőszám megfelel a Shackelford módszernél használt $C/C_0$ mennyiségnek).

Az egyenértékűség-számítás első fázisában az adott hulladéklerakóra előírt, szabványos, hatóság által elfogadott aljzatszigetelés-felépítésre szükséges a számításokat elvégezni. Ezen számítások során az 5.9. táblázat szerinti, mértékadó paraméterek alkalmazása javasolható.

A hasonlítandó anyag esetén a kiválasztott hat legveszélyesebb komponensre laboratóriumban szükséges meghatározni a szorpciós izotermákat és annak paramétereit, a diffúzióállandót. Amennyiben a javasolt aljzatszigetelő-rétegnek geomembrán és/vagy tömörített természetes agyagszigetelőréteg is a részét képezi, úgy ezekben az esetekben a 5.7.és 5.8. táblázatok adatai is felhasználhatók a számításokhoz, geomembrán esetén a gyártó minőségtanúsításában szereplő értékek mellett.

Az elérési időre értelmezett biztonsági tényezőnek ($\nu_t = \frac{t(c_{megengedhető})}{t_{standard}(c_{megengedhető})}$) - konvergens numerikus megoldás esetén - az 1-3. csoportok mindegyike esetén minimálisan 1.2-nak, a 4-6. csoportok esetén 1.3-nak szükséges lennie, a hatóságok által megkívánt 30 vagy 50 éves idő-szakra vonatkozóan.

5.9. táblázat: Mértékadó hidraulikai és transzport-jellemzők

| Jellemző | Mértékadó érték | | | |
|---|---|---|---|---|
| | geomembránra | agyagszigetelőrétegre | altalajra[1] | szűrőrétegre vagy vízvezető rétegre[2] |
| szivárgási tényező [m/s] | $10^{-13}$ | $10^{-9}$ | $10^{-8}$ | $10^{-4}$ |
| Effektív diffúzióállandó [$m^2/s$] | | | | csak ha telített |
| 1.csoportra | $2\cdot10^{-16}$ | $10^{-10}$ | $10^{-10}$ | $5\cdot10^{-9}$ |
| 2.csoportra | $3\cdot10^{-16}$ | $5\cdot10^{-10}$ | $5\cdot10^{-10}$ | $7\cdot10^{-9}$ |
| 3.csoportra | $10^{-16}$ | $3\cdot10^{-11}$ | $3\cdot10^{-11}$ | $5\cdot10^{-10}$ |
| 4.csoportra | $2\cdot10^{-13}$ | $3\cdot10^{-10}$ | $3\cdot10^{-10}$ | $6\cdot10^{-10}$ |
| 5.csoportra | $6\cdot10^{-13}$ | $2\cdot10^{-10}$ | $2\cdot10^{-10}$ | $10^{-9}$ |
| 6.csoportra | $2\cdot10^{-13}$ | $3\cdot10^{-10}$ | $3\cdot10^{-10}$ | $6\cdot10^{-10}$ |
| Diszperzivitás [m] (a réteg vastagsága [m]) | 0,0001 (0,002) | 0,01(0,2) 0,025(0,6) | 0,08 (3) | vastagságtól függően[3] |
| Langmuir izoterma "A" paramétere [mg/kg] | T=0,001 mekv/100g[4] | T=10 mekv/100g [4] | T=5 mekv/100g [4] | T=2 mekv/100g [4] |
| Langmuir izoterma "K" paramétere [$m^3/g$] | 0,1 | 0,03 | 0,1 | 0,01 |
| λ bomlási együttható [1/s] | 0 | 0 | 0 | 0 |
| n hézagtérfogat [-] | 0.000001 | .5 | 0.45 | 0.33 |
| $n_0$ szabad hézagtérfogat [-] | 0.000001 | 0.02 | 0.04 | 0.33 |

1. csak I. és II. osztályú veszélyes hulladékok esetén
2. csak szigetelőrétegek közötti szűrőréteg esetén
3. a diszperzivitás értékét célszerű a vastagság függvényében szakirodalmi adatok alapján pl. Szabó-Kovács (1995) meghatározni
4. A paraméter az 1., 2., 3. csoportok esetén a kationcserélő kapacitás (T[mekv/100g]) alapján számítandó. A[mg/kg]=M*10*T[mekv/100 g], ahol A a számítandó izotermaparaméter és M a relatív atomtömeg. A 4., 5. és 6. csoportok esetében az értékeket korábbi izotermamérések alapján vehetjük fel.

### *5.3.2.8. A javasolt egyenértékűség-vizsgálati módszer alkalmazása*

Az egyenértékűség-vizsgálat menetének bemutatására hasonlítsuk össze néhány ország hulladéklerakóinál előírt aljzatszigetelő-rendszerek hatékonyságát. A tíz vizsgált ország aljzatszigetelő-rendszerének adatait az 5.10 táblázat és az 5.26.ábra foglalja össze[44].

A vizsgált komponenseket az átlagos csurgalékvíz-összetétel alapján határoztuk meg:

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| 1. csoport: $K^+$ | 700 mg/l | 2.csoport: $Cl^-$ | 1400 mg/l | 3. csoport: $Pb^{++}$ | 1 mg/l |
| 4. csoport: diklór-metán | 0.23 mg/l | 5. csoport: metil-etil-keton | 8.3 mg/l | 6. csoport: toluol | 0.15 mg/l |

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| diklór-metán | | etil-keton | | luol | |

Valamennyi bemutatott aljzatszigetelő-rendszer esetén 50 éves időtartamra számítottuk a mentett oldalon kialakuló koncentrációkat, majd a csurgalékvíz belépő koncentrációjára normáltuk a kapott értékeket (ezen értékekre a továbbiakban relatív koncentrációként hivatkozom). Amennyiben összehasonlítjuk a lerakó mentett oldalán a hat kiválasztott komponens relatív koncentrációit (5.27.ábra), úgy láthatjuk, hogy azok közül a leggyorsabban a klorid és a szerves komponensek juthatnak át. Egy jól működő szigetelőrendszer esetén is még 50 év alatt 10-15%-os relatív koncentrációk kialakulása lehetséges abban az esetben, amennyiben a szigetelőréteg alatt intenzív anyagtranszport lehetőségét kizárjuk.

Összevetve a vizsgált országok lerakóinak hatékonyságát két komponensre (klorid és toluol) látható (5.28-29. ábrák), hogy a geomembránt nem tartalmazó rendszerek (Belgium, Svájc és Egyesült Királyság) kevésbé hatékonyak. Itt meg kell jegyezni, hogy a svájci lerakókba csak égetőművi hulladékok kerülhetnek, így a csurgalékvizek összetétele - kedvező módon - jelentősen eltér az átlagos lerakók csurgalékvizétől.

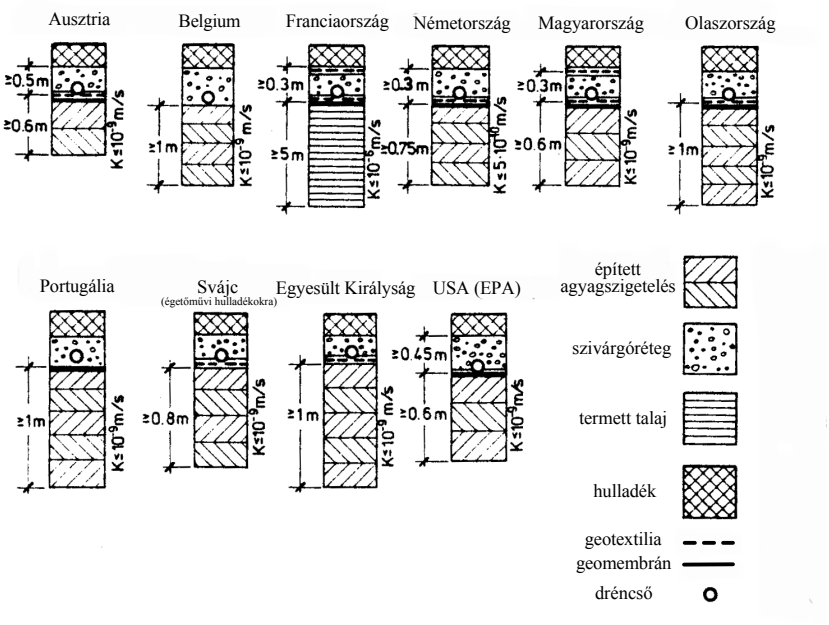
5.10. táblázat

| **Ország** | **D [m]** | **G [mm]** | **A [m]** | **$k_A$ [m/s]** | **$k_{átl}$ [m/s]** | **$I_{max}$ [-]** | **$v_{átl}$ [m/s]** |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **Ausztria** | 0.5 | 2 | 0.6 | $1\cdot10^{-9}$ | $2.9\cdot10^{-11}$ | 0.83 | $2.4\cdot10^{-11}$ |
| **Belgium** | 0.75 | 0 | 1 | $1\cdot10^{-9}$ | $1\cdot10^{-9}$ | 0.75 | $7.5\cdot10^{-10}$ |
| **Egyesült Királyság** | 0.3 | 0 | 1 | $1\cdot10^{-9}$ | $1\cdot10^{-9}$ | 0.3 | $3\cdot10^{-10}$ |
| **Franciaország** | 0.3 | 2 | 5 | $1\cdot10^{-6}$ | $2.5\cdot10^{-10}$ | 0.06 | $1.5\cdot10^{-11}$ |
| **Magyarország** | 0.3 | 2 | 0.6 | $1\cdot10^{-9}$ | $2.9\cdot10^{-11}$ | 0.49 | $1.5\cdot10^{-11}$ |
| **Németország** | 0.3 | 2 | 0.75 | $5\cdot10^{-10}$ | $3.5\cdot10^{-11}$ | 0.4 | $1.4\cdot10^{-11}$ |
| **Olaszország** | 0.4 | 2 | 1 | $1\cdot10^{-9}$ | $4.8\cdot10^{-11}$ | 0.4 | $1.9\cdot10^{-11}$ |
| **Portugália** | 0.4 | 2 | 1 | $1\cdot10^{-9}$ | $4.8\cdot10^{-11}$ | 0.4 | $1.9\cdot10^{-11}$ |
| **Svájc** | 0.3 | 0 | 0.8 | $1\cdot10^{-9}$ | $1\cdot10^{-9}$ | 0.38 | $3.75\cdot10^{-10}$ |
| **USA** | 0.45 | 2 | 0.6 | $1\cdot10^{-9}$ | $2.9\cdot10^{-11}$ | 0.75 | $2.2\cdot10^{-11}$ |

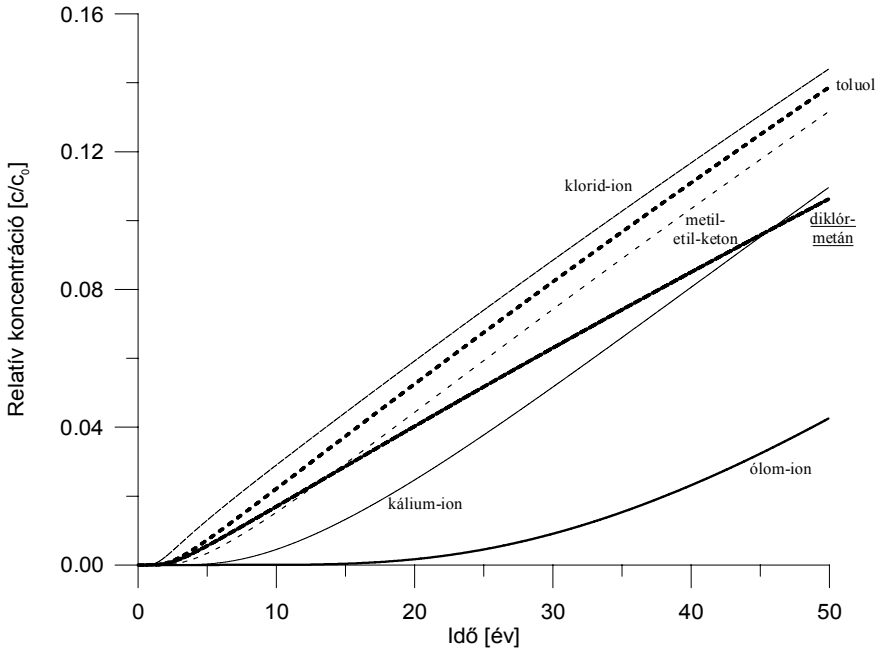
D: A szivárgóréteg vastagsága [m]
G: A HDPE geomembrán vastagsága [mm]
A: A tömörített agyag-szigetelőréteg vastagsága [m]
$k_A$: A tömörített agyag-szigetelőréteg megkívánt minimális szivárgási tényezője [m/s]
$k_{átl}$: A teljes szigetelőrendszer átlagos szivárgási tényezője [m/s]
$I_{max}$: A maximálisan megengedhető hidraulikus gradiens nagysága
$v_{max}$: A szivárgás maximális függőleges sebessége [m/s]

Jól látható eltérés tapasztalható a francia és a további vizsgált országok előírásai között: A francia előírásoknak megfelelő hulladéklerakó, 5 m-nél vastagabb termett talaja alatti koncentrációk - 50 év elteltével - gyakorlatilag zérusnak tekinthetők a nagy vastagság miatt. Amikor azonban a szennyezőanyag frontja eléri az 5 m-es mélységet, akkor hirtelen koncentrációnövekedés várható. Hátránya a megoldásnak, hogy nem teszi lehetővé a környezet károsodásának észlelését csak azután, hogy egy jelentősebb térrész elszennyeződött.

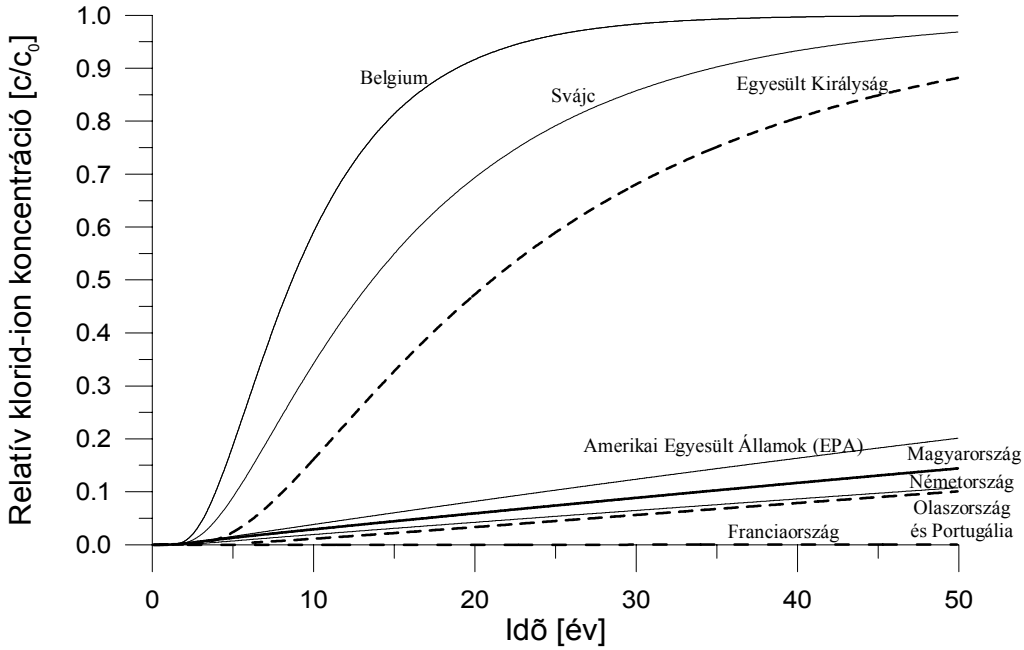
A bemutatott ábrák alapján a Magyarországon érvényes előírásoknak megfelelő kommunális hulladéklerakókat - a számítások alapján - a megbízhatóan szigeteltek közé sorolhatjuk, előírásainkat pedig a tíz vizsgált rendszer alapján közepesen szigorúnak minősíthetjük.



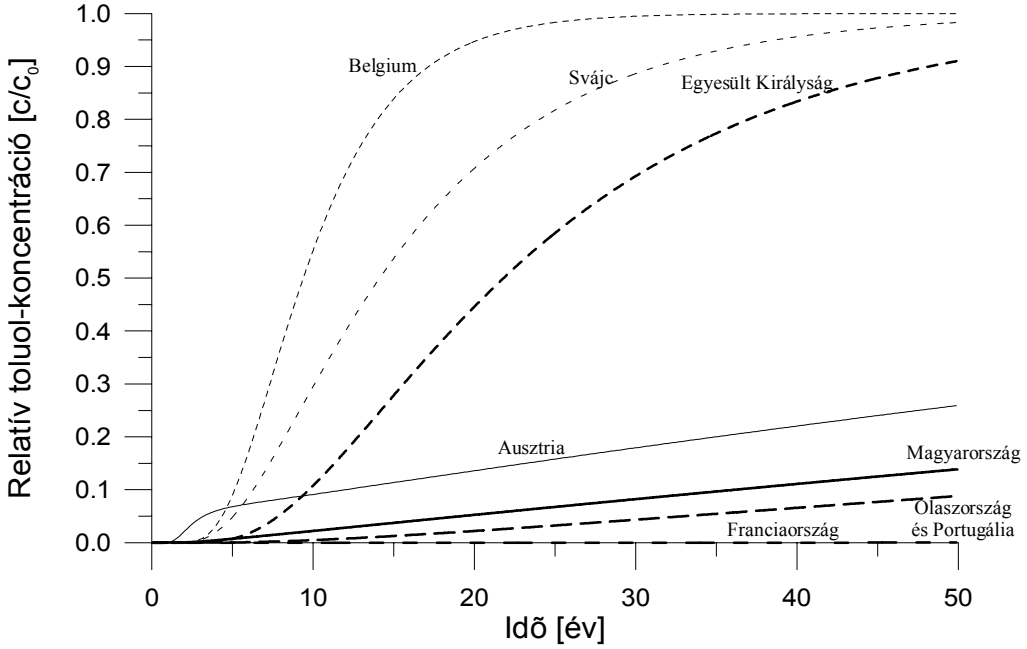

5.26. ábra: Kommunális-hulladék lerakók előírt aljzatszigetelő-rendszere néhány országban[45]




5.27. ábra: A vizsgált hat szennyezőkomponens áttörési görbéi kommunális hulladéklerakók aljzatszigetelésén a magyarországi ajánlást figyelembe véve




5.28. ábra: A klorid-ionra vonatkoztatott áttörési görbék néhány ország előírásainak, ajánlásainak megfelelő kommunális hulladéklerakók aljzatszigetelő-rendszerén keresztül




5.29. ábra: A toluol áttörési görbék néhány ország előírásainak, ajánlásainak megfelelő kommunális hulladéklerakók aljzatszigetelő-rendszerén keresztül

[1]M.S. Beljin - P.K.M.van der Heijde: Testing, Verification, and Validation of Two-dimensional Solute Transport Models, 1989, Groundwater Modeling: The Use of Models in Decision-Making, Kluwer Academic Publ., pp. 121-137.

[2]P.S. Huyakorn et. al.: A Simple and Efficient Flow and Transport Code, (1984)GeoTrans Inc, Reston, Virginia

[3]L.F. Konikow - J.D. Bredehoeft: Computer Model of Two-dimensional Solute Transport and Dispersion in Groundwater, 1978, TWRI, Book 7., US Geological Survey, Virginia

[4]T.A. Prickett - T.G. Naymik - C.G. Lonnquist: A Random-walk Solute Transport Model for Selected Groundwater Quality Evaluations. 1981, Illinois State Water Survey, Bulletin 65, Champaign, Illinois

[5]Szabó I.-Kovács B.: Számítógépes modellvizsgálat a …… Vegyipari Vállalat által lerakott veszélyes hulladék átdeponálással történő ártalmatlanításához, 1993, Szakvélemény, Kézirat

[6]Kovács B.: A BVM Illatos úti és Kén utcai telepeinek környezeti hatása, 1992, Szakvélemény, Kézirat

[7]Kovács B. - Szabó I.: Kiegészítő szakvélemény a MOL Rt. kisvárdai volt közbenső tárolótelep talavíz-szennyezésének kárelhárítási tervéhez, 1994, Szakvélemény, Kézirat

[8]Kovács B.: Hidraulikai szakvélemény a HM …… repülőtér CZT telepén történt kerozinszennyezés mentesítéséhez, 1994, Szakvélemény, Kézirat

[9]Juhász J.: Áramlástan - Hidrogeológia, 1981, Egyetemi jegyzet, pp. 113-114.

[10]Kovács B.-Szabó I: A kardoskúti NaCl infiltráció vizsgálata véges differencia modell segítségével, 1991, Szakvélemény, Kézirat

[11]Kovács B. - Szabó I.: A BVM garéi átmeneti hulladéktároló klórbenzol-szennyezésének vizsgálata számítógépes szimuláció segítségével, 1993, Szakvélemény, Kézirat

[12]Szabó I.- Kovács B.: A BVM Garéi Átmeneti Hulladéktároló klórbenzol-szennyezésének vizsgálata számítógépes szimuláció segítségével , 1993, Szakvélemény, Kézirat

[13]Szabó I.- Pénzes E.-Kovács B.: A Rotary Kft. zsanai fűrási iszaplerakójának környezeti hatásvizsgálata, 1994, Szakvélemény, Kézirat

[14]Kovács B.: A BVM Illatos úti és Kén utcai telepeinek környezeti hatása, 1992, Szakvélemény, Kézirat

[15]Szabó I.-Márk E.: Agyagok szivárgási tényezőjének meghatározása klórbenzollal, 1994, Szakvélemény, Kézirat

[16]Szabó I.- Kovács B.: A BVM Garéi Átmeneti Hulladéktároló klórbenzol-szennyezésének vizsgálata számítógépes szimuláció segítségével , 1993, Szakvélemény, Kézirat

[17]Kovács B. - Szabó I.: Számítógépes szennyezőanyag-terjedési szimulációs modellvizsgálat a D&D Kft. felsőzsolcai zagytároló résfalas határolásához, 1995 március, Szakvélemény, Kézirat

[18] Szabó I: Hulladékelhelyezés I., 1995, Ipar a környezetért Alapítvány, p.311.

[19]Kovács B. - Szabó I.: Számítógépes szennyezőanyag-terjedési szimulációs modellvizsgálat a D&D Kft. felsőzsolcai zagytároló résfalas határolásához, 1995 március, Szakvélemény, Kézirat

[20]Németh G.: Matematikai-statisztikai módszerek alkalmazása rézsűállékonysági vizsgálatokhoz, 1978, Mélyépítéstudományi Szemle, 6.sz.

[21]Rétháti L.: Valószinűségelméleti megfontolások a geotechnikában, 1985, Akadémiai Kiadó, Budapest

[22] Szabó I: Hulladékelhelyezés II., Tervezés-méretezés, Kialakítás, 1995, Ipar a környezetért Alapítvány, p.223.

[23] Lakatos I. - Szabó I.: A környezetvédelemben alkalmazható vertikális és horizontális szigetelőgátak egyenértékűségének feltételei, 1997, Közl. és Mélyépítéstudományi Szemle, XLVII. Évf. 11. Szám, pp.423-431.

[24] Chapuis, R. P.: Sand - bentonite liners: predicting permeability from laboratory tests, 1990, Can. Geotech. J. 27, pp.47-57.

[25] Schababerle, R. - Wagner, J-F. - Czurda, K.A.: Der Einfluß von Frost-Tau-Zyklen auf das Gefüge von Tonen, 1988, AGK Schriftenreihe 4, pp. 247-273.

[26] Oberdorfer, D.- Czurda K.: EG Forschungsprojekt, Entwicklung neuer Abdichtungsmaterialen auf der Basis organophilierter Bentonite und Zeolithe für den Deponiebau, 1996, MBS Seminar, AGK Schriftenreiche 44

[27] von Maubege, K. - Dürbaum, A.: Alternative Dichtungssysteme mit geosynthetischen Tondichtungsbahnen, 1996, MBS Seminar, AGK Schriftungreiche 44

[28] Folkes, D.: Control of Contaminant Migration by the Use of Liners, 1982, Can. Geotech. J. Vol. 19, pp.320-344.

[29] Burkhardt, G. - Eggloffstein Th.: Stand der Entwicklung von Deponieabdichtungssystemen in der Bundesrepublik Deutschland, Das Multibarrierensysteme in der Deponiebautechnik, AGK Schriftenreiche 44, pp.6-1÷6-59

[30] Schönian, E: Asphaltbeton - Dichtungen im Deponiebau, Müll und Abfall, 1/91, pp. 12-19.

[31] Münk, G. - Hegler R.P. - Mennig, G.: Abdichtung von Mülldeponien, 1989, Kunstaffe 79(1989) pp.352-358.

[32] Müller-Kirchenbauer, H. - Rogner, J. - Friedrich, W.: Einfluß der Versuchsrandbedingungen auf die Ergebnisse von Dichtmassenuntersuchungen, 1991, Bautechnik 68, pp. 421-424.

[33] Rowe et al.: Diffusion of Chloride and Dichloromethane through HDPE-Geomembrane, Geosyntethics International, 2(1995) pp. 507-536.

[34] Oweis, - Khera, : Geotechnology of Waste Management, 1990, Butterworth, p.273.

[35] Szabó I.-Kovács B.: Számítógépes modellvizsgálat a Pertemartoni Vegyipari Vállalat által lerakott veszélyes hulladék átdeponálással történő ártalmatlanításához I., 1993, Szakvélemény, Kézirat

[36] Kohler, E.E. - Heimerl, H.: Untersuchungen zur Bewertung der Gleichwertigkeit von Deponieabdichtungsmaterialien, 1995, Sanierung von Altlasten (Hrsg. Jessberger), pp. 127-135.

[37] Müller-Kirchenbauer, H. - Rogner, J. - Friedrich, W.: Einfluß der Versuchsrandbedingungen auf die Ergebnisse von Dichtmassenuntersuchungen, 1991, Bautechnik 68, pp. 421-424

[38] Müller-Kirchenbauer, H. - Rogner, J. - Friedrich, W.: Einfluß der Versuchsrandbedingungen auf die Ergebnisse von Dichtmassenuntersuchungen, 1991, Bautechnik 68, pp. 421-424

[39] Shackelford, Ch.: Transit Time Design of Eearthen Barriers, 1990, Engineering Geology, 29. pp.79-94.

[40] Czurda, KA.- Wagner, J-F.: Verlagerung und Festlegung von Schwermetallen in tonigen Barrieregesteinen, 1988, Tone in der Umwelttechnik, AGK Schriftenreiche 4, pp.225-247.
Wagner, J-F.: Verlagerung und Festlegung von Schwermetallen in tonigen Deponieabdichtungen. Ein Vergleich von Labor und Geländestudien, 1992, AGK Schriftenreiche 22.
Shackelford, Ch.: Transit Time Design of Earthen Barriers, 1990, Engineering Geology, 29. Pp.79-94.
Czurda, KA.- Wagner, J-F.:Migration and Retention Phenomena of Radionucleides in Clay Barrier Systems, Applied Clay Science, 6 (1991), pp- 195-214.
Eggloffstein, Th. - Burkhardt, G. - Mainka, A.: Geotechnische Apekte bei der Standortsuche und Standorterkundung für Abfalldeponien, MBS Seminar, AGK Schriftenreiche 44, 1996,4-1 - 4-63.

[41] Szabó I: Hulladékelhelyezés II., Tervezés-méretezés, Kialakítás, 1995, Ipar a környezetért Alapítvány, p.223.

[42] Szerk. Búzás I.: Talaj- és Agrokémiai vizsgálati módszerkönyv 2. , Mezőgazdasági Kiadó, 1988 Budapest, pp. 103-106.

[43] Gaeke,A.K. - Foster, S.S.D.: Unsaturated Zone Pollutant Transport beneath Low Technology Waste Water Reuse Facility, Proc. Int. Conf. Vulnerability of Soil and Ground Water Pollutants, The Hague, pp. 1011-1025.
Münk, G. - Hegler R.P. - Mennig, G.(1989): Abdichtung von Mülldeponien, 1989, Kunststoffe 79(1989) pp.352-358.
Szabó, I: Hulladékelhelyezés III., „Ipar a környezetért" Alapítvány, Budapest, 1995

[44] Czinkota, I.- Kovács, B - Lakatos, I.- Szabó, I: Practical Application of Contaminant Transport Modeling - The Equivalence of Barrier-Systems, 1998, AGK Schriftenreihe (Megjelenés alatt)

[45] Ed. Jessberger, H.L.: Environmental Geotechnics, 1997, Report of the ISSMFE TC5, Ruhr Universität, Bochum

## 6. ÖSSZEFOGLALÁS. AZ ÉRTEKEZÉS TÉZISEI

Az ember a környezetbe való beavatkozása során olyan anyagokat is létrehoz, amelyeket - az adott kor technikai szinvonalán - hasznosítani nem tud. Ezeket a hulladék-anyagokat részben újrahasznosítja, de részben deponálja is, ami lehetőséget nyújt a hulladék-környezet, azaz a művi és természetes környezet közötti kapcsolat kialakulására. Az említett kapcsolat - valójában egymásrahatás - folyamán egyrészt megváltoznak a hulladék fizikai-kémiai tulajdonságai, másrészt a hulladék hatására a környezet állapota is megváltozik. Ez a változás többnyire romlást jelent, azaz a hulladékból a környezetre káros anyagok jutnak ki. Mivel a környezetünk védelme napjainkban súlyponti kérdés, ezért szükségszerűen alakultak ki azok a módszerek, amelyek segítségével a természetidegen anyagok természetes környezetben történő mozgását követni lehet, és amelyeket - összefoglaló néven - szennyezőanyag-terjedés- vagy transzportmodellezésnek nevezünk.

Maga a transzportmodellezés határterületi tudomány, elméleti alapjait a szivárgáshidraulika, a kolloidika és fizikai kémia törvényszerűségei képzik. Tekintettel arra, hogy a vizsgált jelenségek az említett természetes környezetben zajlanak le, fontos a vizsgált tér megfelelő ismerete, amelyet földtani, vízföldtani (hidrogeológiai) és mérnökgeológiai alapokon vizsgálhatunk. Ismeret- vagy adathiány esetén megfelelő számú és minőségű alapadat birtokában matematikai-statisztikai, illetve geostatisztikai módszerek segíthetnek a legjellemzőbb paramétereloszlás meghatározásában, így a számítások mind pontosabb alapadatrendszerének megalkotásában. A szennyezőanyagok mozgása során a pórusfolyadék kölcsönhatásba kerül a kőzetkörnyezettel, amelynek vizsgálatával a talajtan és talajkémia tudományágak foglalkoznak. Végül a mozgás követésére legtöbbször alkalmazott numerikus módszerek az alkalmazott matematika tárgykörébe tartoznak. Az említett interdiszciplinaritás miatt jelen értekezés merít a felsorolt tudományágak ismereteiből, ugyanakkor ez problémákat is felvet. Egyfelől a dolgozatban igyekeztem egységes egészként bemutatni a transzportmodellezés témakörét, másfelől igyekeztem konzekvensen alkalmazni az egyes tudományágak területén hagyományosan kialakult nyelvezetet és jelölésrendszert. Igy fordulhat elő, hogy a dolgozat különböző részein egy adott jel esetleg más és más jelentéssel bír. Az értelmezésbeli nehézségeket a szövegkörnyezetben történő magyarázattal, illetve a B jelű mellékletben található jelölések jegyzékével kívántam kiküszöbölni.

A vizsgált jelenség megismerésének érdekében először a szennyezőanyag-terjedés jelenségét mutattam be, annak törvényszerűségeit és a mozgás következtében kialakuló koncentrációváltozások matematikai számítási módjait is beleértve. Ezt követően a rendelkezésre álló alkalmazott matematikai eszköztár elemeit, az ismertetett problémára vonatkozó analitikus és numerikus megoldási módszereket ismertetem. Mivel a dolgozat további részében számos utalás történik a numerikus megoldási lehetőségek egyes lépéseire, illetve azok következményeire, ezért a módszerek bemutatásától nem tekinthettem el. Ugyanakkor igyezkeztem a lehető legtömörebben és legérthetőbben bemutatni a módszereket annak érdekében, hogy ez a fejezet ne legyen túlsúlyos a többi fejezethez képest. Felismerve, hogy a numerikus transzport-számítások – mind matematikai, mind elméleti és gyakorlati értelemben - csak közelítő jellegűek, szükségesnek véltem a számítás hibáit külön fejezetben összegezni. Ebben a fejezetben az alkalmazott matematikai módszerek korábban ismetetett numerikus hibáin túl a paraméterhibák hatását, a pontszerűen rendelkezésre álló adatok más területekre történő inter- vagy extrapolációjának következményeit mutatom be. A dolgozat záró részében a transzportmodellezés gyakorlati alkalmazási lehetőségeit, valamint a gyakorlatban felmerült problémákat és azok elkerülésének, illetve megoldásának lehetséges módjait tárgyalom.

Az említettek alapján kitűnik, hogy munkám egyrészt a transzportmodellezés fiatal interdiszciplináris tudományterületének összefoglaló rendszerezése, az alkalmazott eljárások kritikai elemzése, amely kiterjed a gyakorlati alkalmazás során feltárt problémák beható vizsgálatára és azok lehetséges elkerülésére, kivédésére is, másrészt – főképpen a természetes és mesterséges anya-

gú szigetelőrendszerek hatékonyságának vizsgálata terén – új eredmények bemutatása is. Ezek az eredmények a Miskolci Egyetem hidrogeológus-mérnökgeológus, illetve környezeti mérnök hallgatóinak képzésébe beépültek, kibővítve a hallgatók alkalmazott számítástechnikai ismereteit, érzékeltetve a numerikus módszerek, valamint az elméleti és gyakorlati hidraulikai számítások előnyeit és korlátait.

A transzportmodellezés gyakorlati megvalósítási lehetőségeinek vizsgálatán alapuló kutatási munkám új tudományos eredményeit és részeredményeit az alábbiakban foglalom össze:

a) Feldolgoztam és rendszereztem a szennyezőanyagok porózus közegbeli terjedésének törvényszerűségeit, beleértve a transzportmodellezés során általában elhanyagolt, de a szigetelőrendszerek egyenértékűségének vizsgálatánál nagy jelentőségű szorpciós folyamatok matematikai leírását is. Ezzel végső soron a későbbiekben tárgyalt egyenértékűségvizsgálatok elméleti alapjait foglaltam össze. A fejezeten belül

   – *a longitudinális diszperzivitás meghatározására – saját és szakirodalmi adatok felhasználásával – új empirikus formulát vezettem be (2.10. ábra, 2.2.11 egyenlet) (1.tézis)*,

   – *a korábban alkalmazott Henry-izoterma egyszerűsítő közelítése helyett a szorpciós folyamatok szimulációja során során a Langmuir- és Freundlich izoterma alkalmazását honosítottam meg, amivel a késleltetés meghatározásának pontatlanságából eredő hibát kiküszöböltem (2.2.4. fejezet) (2. tézis).*

b) A 3. fejezetben összefoglaltam és részletes összehasonlító, kritikai elemzését adtam a transzport-egyenlet analitikus, numerikus és szemi-analitikus megoldási lehetőségeinek.

c) A 4. fejezetben részleteztem a modellezés szakaszait, az egyes anyagok adatigényét. Tekintettel a valós ismerethalmaz és a numerikus modellek alapadatigénye közötti gyakori eltérésre, bemutattam a leggyakrabban használt az inter- és extrapolációs módszereket, valamint a zóna-alkotás lehetőségét. Ehhez szorosan kapcsolódva elemeztem a paraméterhibák jellegzetességeit, azok átöröklődésének folyamatát, lépéseit. Analitikus megoldásokon keresztül vizsgáltam, hogy az egyes alapadatokban elkövetett hiba milyen mértékben jelenik meg a végeredményben. A fejezeten belül elvégeztem a szennyeződésterjedési számítások - analitikus megoldáson alapuló – alapadat-érzékenységi vizsgálatát (4.2.4.2. fejezet), amelynek eredményeképpen megállapítottam, hogy

   – *a transzverzális és longitudinális diszperzivitás arányának téves megválasztása modellezési eredmények jelentős hibáját eredményezi, mivel a longitudinális és transzverzális diszperzivitás arányának csökkenése a koncentrációk jelentős csökkenését okozza (4.12.ábra). A valóságban az történik, hogy a diszperzív transzport 3.2. ábrán bemutatott diagonális hozamait változtatjuk a transzverzális diszperzivitáson keresztül és a diagonális hozamok növelésével a szennyezőanyag szóródása a szivárgás irányára merőleges irányban jelentősen megnő, ami – az anyagmegmaradás elvének megfelelően - a koncentrációmaximum csökkenéséhez vezet (3. tézis).*

     A megállapítás következménye, hogy nem elhanyagolható hibát vétünk, amikor az egyszerűbb egydimenziós számítást alkalmazzuk a megfelelőbb kétdimenziós helyett. Az egydimenziós számítás implicit módon tartalmazza azt a feltevést, hogy a diagonális diszperzív hozamok elhanyagolhatók, ami az esetek jelentős részében nem igaz. Az 1D megoldás leginkább ott állja meg a helyét, ahol a szomszédos térrészekben is hasonló folyamat zajlik le. Ilyenkor ezek a vizsgált térből a diagonális diszperzív hozamok miatt eltávozó szennyezőanyag fluxusa kompenzálódik a környezetből a vizsgált térbe irányuló fluxussal, így a peremhatás nem érvényesül.

   – *az egyszerűbb modell-alkotása érdekében történő dimenziószám csökkentés okozta hiba abszolút nagysága a 0 időpillanattól számított időtartam növekedésével arányosan csökken (4. tézis).*

– *a szivárgási sebességben, illetve a lineáris adszorpció mértékére utaló késleltetés meghatározásának vagy becslésének során elkövetett hiba a koncentrációeloszlás jellegét mind az időben, mind a térben megváltoztatja. A diszperzivitás, a szabad hézagtérfogat, illetve a bomlási együttható, mint paraméter hibája ugyanakkor csak a koncentrációk abszolút nagyságát változtatja meg a térbeli eloszlás jellegét és az áttörési görbe alakját (a koncentráció változását az időben) nem befolyásolja (4.17. ábra) (5. tézis).*

  Ezen megállapítást alátámasztotta a peremartoni veszélyes hulladék tároló vizsgálata is, ahol egy egydimenziós konvektiv-diszperzív-adszorpciós modellel végzett számítások eredményei alapján megállapítottam, hogy eltérő R késleltetési értékek mellett a koncentrációnak mind időbeli, mind térbeli (esetünkben mélységbeli) változása jelentősen eltér egymástól (4.16.ábra).

A modellek kalibrációjának lehetőségeit vizsgálva bemutattam és értékeltem az inverz számításokon alapuló trial-and-error kalibrációt és az autokalibrációt, valamint a Kalman-algoritmus és a GIS alkalmazási lehetőségeit a kalibrálás során. Megállapítottam, hogy

– *a trial-and-error kalibrációval jó eredményt csak nagymértékben megkutatott, hidraulikai szempontból egyszerű felépítésű területeken lehet elérni (6. tézis).*

  Ezt bizonyította a Sajóládi Vízmű környezetére kialakított modell, ahol éppen a modell kalibrálása mutatott rá a Hernád folyón található, korábban figyelmen kívül hagyott, bőcsi duzzasztás számottevő hidraulikai hatására. A közvetett közelítés alkalmazásával az évekkel korábban analitikus úton és a modellel számított elérési idők közötti eltérés a kalibráció előtti 15-20%-ról a trial-and-error módszer alkalmazásával 5% alá süllyedt.

– *a trial-and-error módszer hatékonysága - rétegzett tárolók esetében - nagyon kisfokú. Ilyen esetekben egyes korrekciók hatása nemcsak az adott rétegben, hanem a környezőkben is változásokat indukál, amelynek kihatásai nehezen követhetők (7. tézis).*

  Példaképpen bemutattam a Gyöngyös-Atkári vízmű védőidomának meghatározásához kialakított 9 réteges hidrodinamikai modellt, ahol a fennálló hidraulikai helyzet szimulációja kalibrációs nehézségek miatt lassult le. A modellezés tanulsága szerint a többrétegű tárolók esetén a trial-and-error kalibráció hatékonysága exponenciálisan lecsökken.

d) Az 5. fejezetben a transzportmodellezés gyakorlati problémáival foglalkozom.

Először a 3. fejezetben bemutatott analitikus, numerikus és szemi-analitikus megoldások elvi korlátait vizsgáltam meg. Bemutattam, hogy elvi síkon bármilyen megoldását választhatjuk a transzportegyenletnek, ha a módszer által megkövetelt egyszerűsítések, elhanyagolások a vizsgált folyamatok szempontjából nem lényegesek. Példaképpen vázoltam egy dunántúli esetet, ahol még az Ogata-Banks-féle 1D megoldás is alkalmazható volt.

A vizsgált esetben egy nagykiterjedésű, meghibásodott szigetelésű tárolótérből egy adott, kb. 5 m vastagságú agyagrétegen keresztül a csurgalékvizek függőleges irányú, szabad szivárgással jutottak a fedett karsztképződményekbe. Az agyagréteg a fedő humuszos részt leszámítva homogénnek volt tekinthető. Megállapítottam, hogy az analitikus megoldás alkalmazásának feltétele ebben az esetben a talajvíz hiánya, a homogén agyagréteg miatt állandó sebességűnek feltételezhető, uralkodóan függőleges szivárgás, a nagy oldalirányú kiterjedés, ami miatt az 1D megoldás során elhanyagolt diagonális diszperzív hozamok a horizontális koncentráció-gradiens jelentéktelen nagysága miatt valóban elhanyagolhatóvá váltak. (5.2.1. fejezet)

A modellgeometria megválasztásának problémáját egy egydimenziós modell, egy horizontális síkmodell, egy vertikális szelvénymodell és egy térmodell ismertetésén keresztül vázoltam.

Amennyiben egy vizsgálandó terület csak néhány szelvény mentén van fúrással feltárva, akkor a síkmodellek alkalmazása változatos földtani felépítésű területeken - az ismeretesség alacsony foka miatt – kockázatos, a háromdimenziós modell felépítése - a síkmodellekét sokszorosan meghaladó adatigény miatt - lehetetlen. Áthidaló megoldásként - a gyakorlatban ritkán alkalmazott függőleges síkmodell, azaz szelvénymodell alkalmazását vezettem be. Ez a módszer a gyakorlatban alig elterjedt, mivel ilyen kész program az alkalmazás időpontjában nem létezett, és a legismertebb háromdimenziós, hidraulikai és traszportmodellezésre szolgáló programok 1 elem szélességű térrészek kijelölését nem engedik meg.

*Az említett esetekre saját fejlesztésű, explicit véges differencia elven működő, a konzervativ szennyezőanyagok konvektív-diszperzív transzportjának számítását lehetővé programot fejlesztettem ki IBM PC kompatibilis platformra. A program mind egyedi értékek felvételét, mind zónák kialakítását támogatja (8. tézis).*

A programot munkáim során többször felhasználtam, így például a bemutatott, alföldi NaCl infiltráció diszperziójának számításánál, a 2.Számú Regionális Hulladékégetőmű szuhogyi lerakója mintaszelvényeinek vizsgálatánál, valamint a garéi klórbenzol szennyezés környezeti hatásának megállapításánál.

A garéi klórbenzol-szennyezéshez készített szelvénymodell kapcsán az ismeretlen szennyezőanyag-minőség főbb okait a következőkben foglalom össze:

– A deponált anyag ismeretlen. Elsősorban vadlerakók esetében jellemző, hogy titokban vagy engedély nélkül ellenőrizetlen minőségű hulladékokat deponálnak. Sokszor még a hulladék eredete is ismeretlen, esetleg a lerakás pontos helye sem azonosítható az időközben végrehajtott tereprendezés miatt.

– A deponált anyag ismert, ugyanakkor annak összetétele változó. A deponálandó anyagok többnyire gyártási melléktermékek. Ezek a hulladék-anyagok annyira változatos összetételűek, hogy más iparágakban történő további feldolgozásuk, hasznosításuk egyenlőre technikailag nem megoldott vagy gazdaságtalan. Szerves hulladékok esetében gyakori, hogy bár a hulladékanyag lehetséges komponensei ismertek, azonban azok mennyiségaránya nem, erre példaképpen a garéi esetet mutattam be. A hulladékanyagok összetétele az adott iparág technikai fejlődésével megváltozhat, erre egy alföldi fúrási iszaptároló vizsgálatát mutattam be példaképpen, ahol a mélyfúráshoz használt fúróiszap minősége - környezetvédelmi célú technológiaváltás következtében - jelentősen megváltozott.

– A deponált anyag terjedési tulajdonságai erősen megváltoznak a környezet hőmérséklete, pH-ja, egyes a környezetben előforduló egyéb anionok, kationok mennyiségétől. A szénhidrogén-szennyezések esetén számolni kell a viszkozitás hőmérsékletfüggésétől, ami a szivárgási tényező értékét befolyásolja. A környezet pH-jának értéke főként ipari területek esetén okozhat jelentős gondokat, mivel egyes nehézfémek mobilizációja erősen pH függő. Ilyen esetekben előfordulhat, hogy a szennyezőanyag transzportját nem a hidraulikai viszonyok, hanem a környezet kémiai jellemzői határozzák meg.

*Megállapítottam, hogy ha a felsorolt bármely okból eredően ismeretlenek a pontos terjedési jellemzők, és emiatt becsült értékekkel dolgozunk, akkor az alapelv mindig a biztonság javára történő tévedés, azaz mindig az elméletileg kialakuló legmagasabb koncentráció számítása az előforduló legveszélyesebb szennyezőanyag esetére. A legveszélyesebb szennyezőanyag kiválasztásának során a szennyezőanyag terjedés sebességét, környezetben észlelt maximális koncentráció és a határérték arányát, valamint hidraulikai szempontokat kell figyelembe venni (9. tézis).*

A transzportmodellek speciális alkalmazásai közül először a stochasztikus modellezést mutattam be egy felsőzsolcai hulladéklerakó példáján. A sztochasztikus modellezés statisztikai alapon kezeli a hidrodinamikai és transzportfolyamatokat. Ilyen megközelítés esetén a kü-

lönböző hidraulikai, vízföldtani és transzportjellemzőket vagy azok egy részét olyan statisztikai változóknak tekintjük, amelyeknek valamilyen ismert diszkrét matematikai eloszlásuk van. Ezt a diszkrét eloszlást egy folytonos eloszlásfüggvénnyel közelítve generálható tetszőleges számú olyan modell-adatrendszer, amelyben a kiválasztott paraméterek statisztikai eloszlása megfelel a tapasztalt diszkrét eloszlásra fektetett folytonos eloszlásfüggvénynek. Amennyiben ezen alapadatrendszer sorozattal elvégezzük a hidrodinamikai és transzportszámításokat, úgy a korábban kapott determinisztikus eredmény helyett egy olyan eredményhalmazhoz jutunk, ahol az eredményeket is mint valószínűségi változókat kezelhetjük. Ilyen módon pl. egy laboratóriumi oszlopkísérlet során egy adott kiindulási koncentráció és geometriai elrendezés mellett, egy adott időpontra nem egy koncentráció értéket, hanem a szimulációk számától függő koncentrációsereget kapunk, amelynek ezután meghatározható az statisztikai eloszlása. Így végülis pl. egy adott koncentrációnál magasabb effluens koncentrációérték megjelenését pl. a szivárgási tényező, vagy a szemeloszlás stb. függvényében egy adott valószínűségi szinttel jellemezhetjük.

Ez az elgondolás konform a hulladék-elhelyezés földtani követelményrendszerének megalkotásánál megfogalmazott optimális kockázat elvével, amely kimondja, hogy gyakorlatilag minden emberi tevékenység (így pl. egy hulladéklerakó megépítése is) bizonyos kockázattal jár. Ezt a kockázatot megszüntetni nem lehet, ugyanakkor feltétlenül ezt egy - az optimálishoz közelítő - minimális szintre kell csökkenteni. Ugyanakkor a kockázat csökkentése egyre nagyobb ráfordításokkal jár, éppen ezért egy minimális kockázatot tudatosan vállalni kell. A stochasztikus modellezési megközelítéssel már egy-egy szigetelőréteg mentett oldalán kialakuló koncentrációérték bekövetkezéséhez matematikai valószínűségi szinteket tudunk rendelni, így a számítási eredmények kiértékelése során meghatározható a tevékenység során vállalt kockázat nagysága.

A bemutatott stochasztikus modellezési példa esetén egy pannóniai rétegbe bekötött, szennyezett területet körülzáró résfal környezetében kialakuló hidraulikai helyzetet szimuláltunk. A modellben valószinűségi változóként kezeltem a pannóniai képződményeket, mivel az említett rétegösszlet a Pannon-tenger partszegélyi fáciesében alakult ki és ezért néhány cm vastag, 1—10 m, ritkán 50 m nagyságrendű horizontális kiterjedésű kőzettestek komplexuma, amelynek anyaga agyag, iszap, valamint sokszor jó vízvezető képességgel rendelkező homok. Ezt az összletet általában egy - pannon agyagos-iszapos - összletbe vonják össze, valamilyen átlagos tulajdonságokkal felruházva, azonban az ilyen rétegsort leginkább egy véletlen módon egymásra települt kisméretű kőzettest sorozatnak kell tekinteni, ahol az egyes képződmények tulajdonságai megfelelnek a valóságban tapasztalt tulajdonságoknak. Ez a meggondolás vezetett el a pannóniai képződmények szivárgási tényezőjének valószínűségi változónak tekintéséhez. A számítás során 250 különböző irányítottan véletlenszerű eloszlású szivárgási tényező-halmazt generáltunk (5.13. ábra), ahol minden adathalmaz közel 15 000 elemet tartalmazott. Elvégezve a számításokat a résfal alatt kialakult koncentrációkat, is mint valószínűségi változókat kaptuk meg.

A sztochasztikus modellekkel kapcsolatosan megállapítottam, valamint a bemutatott esettanulmánnyal bizonyítottam, hogy

– *a stochasztikus modellek alkalmazása során kiválaszthatók a reálisan előforduló (adott gyakorisági szinthez kötött) legkedvezőbb és legkedvezőtlenebb eset, illetve az ahhoz rendelhető koncentrációértékek,*

– *ez a megközelítés a számított koncentrációértékeknek egy valószínűségi szinthez kötését jelenti, aminek meghatározása ugyan a számítási időt növeli, de az eredményeknek egy minőségében mélyebb értelmezését teszi lehetővé. (10. tézis)*

A transzportszámítások közül kiemelten foglalkozom a hulladéklerakók aljzatszigetelésének egyenértékűségi vizsgálatával. Ez a téma jelenleg különösen aktuális, hiszen Magyarországon jelenleg csak a veszélyes hulladékok deponálására vonatkozó törvény készült el. Az egyéb hulladékok tekintetében az egyes hatóságok saját gyakorlatuk, illetve országosan el-

fogadott irányelvek alapján hozzák meg döntéseiket. A meglévő standardok azonban nem minden esetben alkalmazhatók. Hazánk egyes területein gondot jelent pl. a megfelelő minőségű épített agyagszigeteléshez szükséges alapanyag beszerzése. Ilyen esetekben azonnal felmerül egy másmilyen, mesterséges vagy természetes anyagokból épített szigetelőrendszer megépítésének lehetősége. Ezzel együtt felvetődik a kérdés, hogy vajon a tervezett rendszer hatékonysága legalábbis azonos-e a másutt megkívánt szigetelőrendszer hatékonyságával, illetve, hogy milyen hatásokkal szemben szükséges a hatékonyságot, vagyis az egyenértékűséget bizonyítani.

Az egyes országok gyakorlata eltérő a kérdésben, hiszen néhány ország csak a vízvezető képesség alapján, azaz az advektív transzport szempontjából követeli meg az egyenértékűséget. Ez a megközelítés elvében hibás, hiszen a hulladékok elszigetelését környezetétől nemcsak az advektív, hanem a diffúziv-diszperzív transzportfolyamatokkal szemben is biztosítani kell, továbbá az egyes szigetelőrétegek pufferképessége sem lehet közömbös.

Magyarországon még nincs gyakorlata az egyenértékűség vizsgálatoknak, ugyanakkor a szakmai-beruházói igény megvan alternatív szigetelőrendszerek beépítésére, ezért célszerűnek látszott egy, a transzportmodellezésen alapuló egyenértékűség-vizsgálati metodikát kidolgozni.

Az egyenértékűség meghatározásához viszonyítási alapot jelentenek a törvényekben rögzített előírások, és a hazai szakmai gyakorlatban követett irányelvek. Elsőként ezeket ismertettem, majd bemutattam az egyenértékűség lehetséges fajtáit: az advektív, a diffúzív, a konvektív-diszperzív végül az általános vagy numerikus egyenértékűséget. A bemutatott egyenértékűség-típusok alapján értékeltem a jelenleg alkalmazott szigetelőrendszer elemeket, azokat egymással is összevetve.

Végül javaslatot tettem az egyenértékűségi vizsgálatok menetére, és ennek alapján néhány fejlett ország standard szigetelőrendszerének hatékonyságát hasonlítottam össze.

Összefoglalva: az 5. fejezeten belül

- *esettanulmány segítségével bizonyítottam a stochasztikus modellek alkalmazásának előnyeit a hulladéklerakók optimális kockázat elvének megfelelő tervezése, valamint a hátrahagyott szennyezések kármentesítése terén (5.3.1.fejezet, 5.13-5.15 ábrák) (11.tézis),*
- *definiáltam a numerikus egyenértékűség fogalmát, illetve kidolgoztam a numerikus egyenértékűség számításának elméleti alapjait és gyakorlati, számítástechnikai megvalósítását (12.tézis),*
- *meghatároztam helyszini mérésekkel a Magyarországon épülő kommunális hulladéklerakók, természetes anyagú, aljzatszigetelésén mért szivárgási tényezők gyakoriságát, mint a további egyenértékűség-számítások egyik kiindulási adatát (5.16. ábra), és ezáltal megteremtettem a numerikus egyenértékűség-számítások stochasztikus modellszámítással való elvégzésének lehetőségét, az épített agyagszigetelőrétegek szivárgási tényezőjének, mint valószinűségi változónak felhasználásával (13.tézis),*
- *elvégeztem a fejlett országokban alkalmazott szigetelőréteg-komponensek advektív (hidrodinamikai) egyenértékűségének összehasonlító meghatározását (5.1. táblázat) (14.tézis),*
- *elvégeztem a 3x20 cm-es tömörített agyagszigetelőréteg és a 2 mm vastagságú geomembrán diffúziv egyenértékűségének meghatározását különböző szerves vegyületekkel szemben (5.3. táblázat) (15.tézis),*
- *meghatároztam a fejlett országokban alkalmazott szigetelőkomponenseknek az advektív, diffúziv transzporttal szembeni, illetve a szorpció miatti puffrehatása mértékét a leggyakoribb szerves szennyezők és nehézfémekkel szemben, aminek alapján az egyes*

*szigetelőkomponenseknek az adott transzportfolyamattal szembeni izoláló képessége összevethető (5.25. ábra) (16.tézis),*

- *meghatároztam az általánosan alkalmazott szigetelőkomponensek reprezentatív advektív, diszperzív transzport-, valamint szorpciós jellemzőit, aminek segítségével a numerikus egyenértékűség-meghatározás standard szigetelőrendszer-oldali alapadatigényét lehet kielégíteni (5.7 - 5.9. táblázatok) (17.tézis),*
- *kidolgoztam a numerikus egyenértékűség-vizsgálatok metodikáját és ezzel kapcsolatosan a gyakorlatban alkalmazott szigetelőanyagokkal szemben a hat jellemzően eltérő viselkedésű anyagcsoport különítettem el, amely anyagcsoportok legjellemzőbben előforduló klpviselőjével az egyenértékűség-számítás elvégzendő (18.tézis),*
- *elvégeztem a Magyarországon gyakorlatban általánosan alkamazott kommunális hulladéklerakó-aljzatszigetelő rendszer összevetését a fejlett országok hasonló rendszereivel, aminek alapján megállapítottam, hogy a magyar előírások és a hatósági gyakorlat a közepesen szigorú kategóriába sorolható be (5.26-5.29. ábrák, 5.10. táblázat) (19.tézis).*

# TARTALOMJEGYZÉK

1.Bevezetés ..... 1
2. Szennyezőanyagok terjedésének törvényszerűségei porózus közegben ..... 3
2.1. A kémiai anyagmérleg ..... 3
2.2. A transzportfolyamat elemei ..... 4
2.2.1. Az advektiv (konvektív) anyagáramok ..... 5
2.2.2. A diffúzió ..... 5
2.2.3. A mechanikai diszperzió ..... 7
2.2.4. Az adszorpció ..... 13
2.2.5. A bomlás ..... 15
2.3. A porózus közegben mozgó konzervatív szennyezőanyagokra érvényes transzportegyenlet általános alakja ..... 16
2.3.1. A szivárgás iránya párhuzamos az egyik koordináta-tengellyel ..... 16
2.3.2. Általános irányú szivárgás esete ..... 17
3. A transzport-egyenlet néhány ismert megoldási módja ..... 19
3.1. Analitikus megoldások ..... 19
3.2. Néhány numerikus megoldás ..... 20
3.2.1. A véges differencia módszer ..... 20
3.2.1.1. A szennyezőanyag-mérleg elemei ..... 20
3.2.1.2. A kezdeti és peremfeltétlek megadása ..... 23
3.2.1.3. A megoldás során fellépő hibák ..... 24
A megoldás instabilitása ..... 24
A numerikus diszperzió ..... 25
Az "Undershoot-Overshoot" jelenség ..... 26
3.2.2. Végeselem módszer ..... 26
3.2.2.1. A módszer alapgondolata ..... 26
3.2.2.2. A hálókiosztás elvei ..... 26
3.2.2.3. A transzportegyenlet végeselemes megoldása GALJORKIN-módszerrel ..... 27
3.2.2.4. Peremfeltételek megadása ..... 31
3.2.2.5. Az időintegrálásos eljárás stabilitási problémái ..... 31

3.3. Részecskeszemléletű szimulációs eljárások ... 33
3.3.1. Karakterisztika módszere ... 33
3.3.2. A véletlen bolyongás módszere ... 34
3.3.2.1. A véletlen bolyongás egydimenziós esetben ... 35
3.3.2.2. A véletlen bolyongás módszerének kiterjesztése síkfeladatokra ... 36
3.3.2.3. A véletlen bolyongás módszerének hibái ... 37
4. Szennyezés-terjedési számítások folyamata, a számítási alapadatok felvétele, a modellek kalibrációja ... 40
4.1. A szennyezés-terjedés modellezésének szakaszai ... 40
4.1.1. A modellezés lépései ... 40
4.1.2. A modellszámítás első szakaszának (a hidrodinamikai szakasz) adatigénye42
4.1.3. A modellszámítás második szakasza, a szennyezőanyag-terjedés számításának adatigénye ... 43
4.2. A modellszámítások adatigényének kielégítése ... 43
4.2.1. Lokális értékek meghatározásának megbízhatósága, az adatrendszer értékelésének szempontjai ... 43
4.2.2. A lokális értékek kiterjesztése a modellezett térre (diszkretizálás) ... 45
4.2.3. A modell-adatrendszer hibáinak okai és jellegzetességei ... 48
4.2.4. A számítási eredmények érzékenysége a nem reprezentatív adatokra ... 51
4.2.4.1. A felszín alatti vizek mozgását befolyásoló tényezők hatása ... 52
4.2.4.2. A szennyezőanyag-terjedés jellemzőinek hatása a modell-eredményekre ... 54
4.3. Modellek kalibrációja ... 59
4.3.1. Inverz számítási eljárásokkal végzett kalibráció ... 60
4.3.1.1. A közvetlen közelítés (autokalibráció) és hibái ... 60
4.3.1.2. A közvetett közelítés (trial-and-error) módszere és hibái ... 63
4.3.1.3. Az autokalibráció és a trial-and-error módszer összevetése ... 64
4.3.1.4. Inverz módszerek gyakorlati alkalmazásai a transzport-modellezésben ... 64
4.3.2. A Kalman algoritmus alkalmazása ... 66
4.3.3. A Geográfiai Információs Rendszerek (GIS) alkalmazási lehetőségei a kalibráció során ... 66
5. Transzportmodellezés gyakorlati problémái és alkamazási lehetőségei a környezetvédelemben ... 72
5.1. A szennyezőanyag-terjedési modellek gyakorlati alkalmazásának lehetőségei ... 72
5.2. A gyakorlati transzportmodellezés néhány problémája ... 73
5.2.1. Analitikus vagy numerikus módszerek alkalmazásának dilemmája ... 73
5.2.2. A modellgeometria megválasztásának dilemmája ... 74

5.3. A transzportmodellek speciális alkalmazási lehetőségei ..... 81
5.3.1. Sztochasztikus modellek gyakorlati alkalmazása ..... 81
5.3.2. A hulladéklerakók aljzatszigetelésének egyenértékűsége ..... 85
5.3.2.1. Az egyenértékűség meghatározási módjai ..... 85
5.3.2.1.1. Az egyenértékűség viszonyítási alapjai ..... 85
5.3.2.1.2. Az advektív egyenértékűség (hidrodinamikai egyenértékűség) ..... 86
5.3.2.2. A diffúzív egyenértékűség ..... 91
5.3.2.3. A konvektív-diszperzív egyenértékűség ..... 94
5.3.2.4. Az általános egyenértékűség ..... 97
5.3.2.5. Az általános és a konvektív-diszperzív egyenértékűségi számítások összevetése ..... 99
5.3.2.6. Az egyenértékűség kritériumai, egyes szigetelőrétegek hatékonyságának az összevetése ..... 100
5.3.2.7. Javaslat az egyenértékűségi vizsgálatok menetére ..... 104
5.3.2.8. A javasolt egyenértékűség-vizsgálati módszer alkalmazása ..... 105
6. Összefoglalás. az értekezés tézisei ..... 111

A. melléklet: Néhány jellegzetes szennyezőanyag diffúzióállandója
B. Melléklet: Jelölések jegyzéke

## A. MELLÉKLET

Néhány jellegzetes szennyezőanyag effektiv diffúzióállandója

| $D_{eff}$ [$m^2/s$] | Vizsgált közeg | Megjegyzés, szerző[12] |
|---|---|---|
| **Komponens : $Cl^-$** | | |
| $3\cdot10^{-10}$ | Átlagérték jó agyagszigetelőrétegekre | Burkhardt és Eggloffstein, 1995 |
| $1.4\text{-}1.6\cdot10^{-10}$ | Agyagpala (Queenstone shale) | Barone, Rowe, Quigley, 1990 |
| $4.7\text{-}10.6\cdot10^{-10}$ | Kaolinit | Shackelford és Daniel, 1991 |
| $4.7\cdot10^{-10}$ | Agyag (Lufkin clay) | Shackelford és Daniel, 1991 |
| $6.4\text{-}8.3\cdot10^{-12}$ | Rétegzett agyag (Badener Tegel) | Bartl és Czurda, 1991 |
| $5\text{-}7\cdot10^{-10}$ | Glaciális agyag (till) | Rowe és szerzőtársai, 1993 |
| **Komponens : $I^-$** | | |
| $3.5\text{-}14.7\cdot10^{-10}$ | Kaolinit | Shackelford és Daniel, 1991 |
| $5.3\cdot10^{-10}$ | Agyag (Lufkin clay) | Shackelford és Daniel, 1991 |
| **Komponens : $Br^-$** | | |
| $4.9\text{-}9.9\cdot10^{-10}$ | Kaolinit | Shackelford és Daniel, 1991 |
| $1.82\cdot10^{-9}$ | Agyag (Lufkin clay) | Shackelford és Daniel, 1991 |
| **Komponens: $Na^+$** | | |
| $5\cdot10^{-10}$ | Kezelt Na-bentonit pogácsák (átlag) | Lai és Mortland, 1962 |
| $6.15\cdot10^{-10}$ | Na-bentonitos pogácsák 7.8% bentonit tartalommal | Lai és Mortland, 1962 |
| $5.7\cdot10^{-10}$ | Na-bentonitos pogácsák 8.9% bentonit tartalommal | Lai és Mortland, 1962 |
| $4.47\cdot10^{-10}$ | Na-bentonitos pogácsák 12.9% bentonit tartalommal | Lai és Mortland, 1962 |
| $3.6\cdot10^{-10}$ | Na-bentonitos pogácsák 15.2% bentonit tartalommal | Lai és Mortland, 1962 |
| **Komponens: $K^+$** | | |
| $1.17\text{-}1.77\cdot10^{-9}$ | Kaolinit | Shackelford és Daniel, 1991 |
| $1.96\cdot10^{-9}$ | Agyag (Lufkin clay) | Shackelford és Daniel, 1991 |

| | | |
|---|---|---|
| **Komponens: $Ca^{2+}$** | | |
| $2.36 \cdot 10^{-10}$ | Na-bentonitos pogácsák 17.9% bentonit tartalommal | Lai és Mortland, 1962 |
| $1.95 \cdot 10^{-10}$ | Na-bentonitos pogácsák 23.9% bentonit tartalommal | Lai és Mortland, 1962 |
| $1.75 \cdot 10^{-10}$ | Na-bentonitos pogácsák 28% bentonit tartalommal | Lai és Mortland, 1962 |
| **Komponens: $Cs^{+}$** | | |
| $10.4\text{-}6.3 \cdot 10^{-12}$ | Rétegzett agyag (Badener Tegel) | Bartl és Czurda, 1991 |
| **Komponens: $Sr^{2+}$** | | |
| $6.1\text{-}4.4 \cdot 10^{-12}$ | Rétegzett agyag (Badener Tegel) | Bartl és Czurda, 1991 |
| $7.25 \cdot 10^{-10}$ | Na-bentonitos pogácsák 9.8% bentonit tartalommal | Lai és Mortland, 1962 |
| $5.81 \cdot 10^{-10}$ | Na-bentonitos pogácsák 12% bentonit tartalommal | Lai és Mortland, 1962 |
| $4.62 \cdot 10^{-10}$ | Na-bentonitos pogácsák 14.6% bentonit tartalommal | Lai és Mortland, 1962 |
| $4 \cdot 10^{-10}$ | Na-bentonitos pogácsák 16.6% bentonit tartalommal | Lai és Mortland, 1962 |
| **Komponens: $Co^{2+}$** | | |
| $8.2\text{-}7 \cdot 10^{-12}$ | Rétegzett agyag (Badener Tegel) | Bartl és Czurda, 1991 |
| **Komponens: $Cr^{2+}$** | | |
| $2 \cdot 10^{-11}$ | Karbonátmentes plasztikus agyag (Eisenberg) | Czurda, Böhler és Wagner, 1989 |
| $1 \cdot 10^{-12}$ | Meszes, harmadidőszaki, tengeri agyag-márga (Wiesloch) | Czurda, Böhler és Wagner, 1989 |
| $1.5 \cdot 10^{-13}$ | Kvarter, szalagos agyagmárga (Ravensburg) | Wagner, 1992 |
| **Komponens: $Cd^{2+}$** | | |
| $2 \cdot 10^{-11}$ | Karbonátmentes plasztikus agyag (Eisenberg) | Czurda és Wagner, 1988 |
| $4.8\text{-}7.6 \cdot 10^{-10}$ | Kaolinit | Shackelford és Daniel, 1991 |

| | | |
|---|---|---|
| $10^{-9}$ | Agyag (Lufkin clay) | Shackelford és Daniel, 1991 |
| $5 \cdot 10^{-12}$ | Kvarter, szalagos agyagmárga (Ravensburg) | Wagner, 1992 |
| $10^{-11}$ | Meszes, harmadidőszaki, tengeri agyag-márga (Wiesloch) | Wagner, 1992 |
| **Komponens: $Zn^{2+}$** | | |
| $10^{-11}$ | Karbonátmentes plasztikus agyag (Eisenberg) | Czurda és Wagner, 1988 |
| $2 \cdot 10^{-11}$ | Karbonátmentes agyagos iszap, édesvizi molassz (Hinterschlagen) | Czurda és Wagner, 1988 |
| $2\text{-}6 \cdot 10^{-12}$ | Kvarter, szalagos agyagmárga (Ravensburg) | Czurda és Wagner, 1988 |
| $0.9\text{-}1.2 \cdot 10^{-11}$ | Meszes, harmadidőszaki, tengeri agyag-márga (Wiesloch) | Czurda és Wagner, 1988 |
| $8.2\text{-}10.3 \cdot 10^{-10}$ | Kaolinit | Shackelford és Daniel, 1991 |
| $2.54 \cdot 10^{-9}$ | Agyag (Lufkin clay) | Shackelford és Daniel, 1991 |
| $7\text{-}9.8 \cdot 10^{-12}$ | Rétegzett agyag (Badener Tegel) | Bartl és Czurda, 1991 |
| $2 \cdot 10^{-11}$ | Illites-szmektites öntésagyag | Wagner, 1992 |
| **Komponens : $Cu^{2+}$** | | |
| $6.3 \cdot 10^{-11}$ | 26% illit és 27% montmor. tartalmú agyag | Kohler és Heimerl, 1995 |
| $2.5 \cdot 10^{-11}$ | Illites-kaolinites agyag | Kohler és Heimerl, 1995 |
| $10^{-12}$ | Kaolinites-szmektites agyagmárga | Kohler és Heimerl, 1995 |
| $4 \cdot 10^{-13}$ | Szmektites agyagmárga | Kohler és Heimerl, 1995 |
| $2.5 \cdot 10^{-11}$ | Karbonátmentes plasztikus agyag (Eisenberg) | Wagner, 1992 |
| $10^{-12}$ | Kvarter, szalagos agyagmárga (Ravensburg) | Wagner, 1992 |
| $4 \cdot 10^{-13}$ | Meszes, harmadidőszaki, tengeri agyag-márga (Wiesloch) | Wagner, 1992 |
| **Komponens : $Pb^{2+}$** | | |
| $4 \cdot 10^{-11}$ | Illites-kaolinites agyag | Kohler és Heimerl, 1995 |

| | | |
|---|---|---|
| $8.5 \cdot 10^{-12}$ | Kaolinites-szmektites agyagmárga | Kohler és Heimerl, 1995 |
| $3.5 \cdot 10^{-12}$ | Szmektites agyagmárga | Kohler és Heimerl, 1995 |
| $10^{-12}$ | Illites-szmektites öntésiszap | Kohler és Heimerl, 1995 |
| $4 \cdot 10^{-12}$ | Karbonátmentes plasztikus agyag (Eisenberg) | Czurda és Wagner, 1988 |
| $0.7\text{-}1 \cdot 10^{-11}$ | Kvarter, szalagos agyagmárga (Ravensburg) | Czurda és Wagner, 1988 |
| $0.6\text{-}4 \cdot 10^{-11}$ | Meszes, harmadidőszaki, tengeri agyag-márga (Wiesloch) | Czurda és Wagner, 1988 |
| $10^{-12}$ | Illites-szmektites öntésagyag | Wagner, 1992 |
| **Komponens : nehézfémek általában** | | |
| $6.3\text{-}0.04 \cdot 10^{-11}$ | Átlagérték jó agyagszigetelőrétegekre | Burkhardt és Eggloffstein, 1995 |
| $1 \cdot 10^{-16}$ | Geomembrán | 5 mm vastagságú fólián vizsgálva, Kohler és Heimerl, 1995 |
| **Komponens : tetraklór-etilén** | | |
| $2 \cdot 10^{-13}$ | Geomembrán | Burkhardt és Eggloffstein, 1995 |
| **Komponens : diklór-metán** | | |
| $8\text{-}8.5 \cdot 10^{-10}$ | Glaciális agyag (till) | Rowe és szerzőtársai, 1993 |
| **Komponens : metanol** | | |
| $7.5 \cdot 10^{-14}$ | Geomembrán | Burkhardt és Eggloffstein, 1995 |
| **Komponens : apoláros szerves szennyezőanyagok általában** | | |
| $>\cdot 10^{-10}$ | Megfelelő agyagszigetelőrétegek | Burkhardt és Eggloffstein, 1995 |
| $1\text{-}0.01 \cdot 10^{-14}$ | Geomembrán | Poláros szennyezőanyagokra is, Burkhardt és Eggloffstein, 1995 |

[1] Bartl, U. - Czurda, K.U.: Migration and retention phenomena of radionucleides in clay barrier systems, 1991, Applied Clay Science, 6 (1991) pp.195-214.
Czurda, KA.- Böhler, U.- Wagner, J-F.: Clay basins as especially suitable areas for hasardous waste repositoires, 1989, Proc. Of Int. Symp. On Intermontane Basins: Geology ans Resources, Thaiföld, pp.146-160.
Wagner, J-F. - Czurda, K.A.: Sorption of radionucleides by tertiary clays, 1989, Proc. Of the 9th Int. Clay Conf., Strasbourg, pp. 149-158.
Burkhardt, G. - Eggloffstein Th.: Stand der Entwicklung von deponieabdichtungssystemen in der Bundesrepublik Deutschland, Das Multibarrierensysteme in der Deponiebautechnik, AGK Schriftenreiche 44, pp.6-1÷6-59
Shackelford, Ch.D. - Daniel, D.E.: Diffusion in saturated soil I., J. of Geotechnical Engineering, 1991, Vol. 117, pp. 467-506.
Czurda, KA.- Wagner, J-F.: Verlagerung und Festlegung von Schwermetallen in tonigen Barrieregesteinen, 1988,

Tone in der Umwelttechnik, AGK Schriftenreiche 4, pp.225-247.
Kohler, E.E. - Heimerl, H.: Untersuchungen zur Bewertung der Gleichwertigkeit von Deponieabdichtungsmaterialien, 1995, Sanierung von Altlasten (Hrsg. Jessberger), pp. 127-135.
Wagner, J-F.: Verlagerung und Festlegung von Schwermetallen in tonigen Deponieabdichtungen. Ein Vergleich von Labor und Geländestudien, 1992, AGK Schriftenreiche 22.
Rowe, R.K. - Caers, Ch.J. - Chan, C.: Evaluation of a compacted till liner test pad constructed overa granular subliner contigency layer, 1993, Can. Geotechnical J. (30) pp. 667-689
Lai, T.M. - Mortland, M.M.: Self Diffusion of Exchangeable cations in bentonite, Clay and clay minerals, 1962. Vol.9. pp. 227-247.

2

# B.MELLÉKLET

ALKALMAZOTT JELÖLÉSEK:

| A jelölés | A jelölés jelentése |
|---|---|
| $A^{(e)}$ | egy felületelem területe (FEM) |
| $[A^{(e)}]$ | az adott elemre vonatkozó szorpciós mátrix |
| $[A^{(gl)}]$ | globális szorpciós mátrix |
| $a, b, a^{(e)}, b^{(e)}$ | a végeselem módszer téglalapeleme oldalainak félhosszúsága |
| C, COV | kovariancia |
| C(t) | koncentráció időbeli változásának függvénye |
| $C, C_i$ | koncentráció az oldatban |
| $\left\{\dot{C}\right\}$ | koncentráció idő szerinti első deriváltjaiból képzett vektor |
| {C} | koncentráció-vektor |
| $C'_{ij}$ | a véges differencia háló által kijelölt elemen belüli átlagkoncentráció értéke a karakterisztika módszerénél |
| $C_0$ | koncentráció a kezdeti $t_0$ időpillanatban |
| $C_{kut,i,j}$ | koncentráció a kútba beinjektált vizben az i,j hasábelemben |
| $Co, Co_x, Co_{y,}\ Co_R$ | Courant-szám |
| $[D^{(e)}]$ | az adott elemre vonatkozó konvekciós(advekciós)-diszperziós mátrix |
| $[D^{(gl)}]$ | globális konvekciós(advekciós)-diszperziós mátrix |
| $D_0$ | vizes közegben mért diffúzióállandó |
| $D_{eff}$ | effektiv diffúzióállandó |
| $D_x, D_y, D_z$ | diszperziós koefficiens értékei x, y, z irányokban |
| $D_{xx}, D_{yy}, D_{zz}, D_{xy}, D_{xz}, D_{yx}, D_{yz}, D_{zy}, D_{zx}$ | diszperziós tenzor elemei |
| d | mértékadó szemcsátmérő |
| $\{F^{(gl)}\}$ | globális szennyezőanyag-hozam (fluxus) -vektor |
| $\{F\}, F_x, F_y, F_z$ | szennyezőanyag vagy koncentráció hozam(fluxus) vektor és komponensei |
| f(t) | az időben változó f függvény általános jelölése |
| f'(x,y,z) | f függvényt közelítő függvény általános alakja |
| h | piezometrikus nyomásszint<br>két pont távolsága a térben |
| H | hatástávolság a krigelésnél |
| i, j ,k, l... | a végeselem csúcspontjainak jele |
| \| J \| | Jacobi-mátrix determinánsa |
| [ J ], $J_{ij}$ | Jacobi -mátrix és elemei |

ALKALMAZOTT JELÖLÉSEK (FOLYTATÁS):

| A jelölés | A jelölés jelentése |
|---|---|
| $[J^{-1}]$ | Jacobi- mátrix inverze |
| $[J]^T$ | Jacobi-mátrix transzponáltja |
| $J_d$ | diszperziv szennyezőanyag-hozam |
| $J_{degr}$ | elbomló szennyezőanyagok hozama |
| $J_k$ | konvektiv szennyezőanyag hozam |
| $J_q$ | források és nyelők szennyezőanyag hozama |
| k | szivárgási tényező |
| K | a Krige-mátrix |
| $K_d$ , $K_d^{(e)}$ | a megoszlási együttható |
| $L^{(e)}$ | egy vonalelem hossza (FEM) |
| M | a szennyezőanyag teljes tömege a vizsgált rendszeren belül |
| $M_t$, $M_{t,i,j}$ | a hasábelemben tárolt szennyezőanyag tömege |
| m | a háló csomópontjainak száma a modellezett térben<br>a zárttükrű víztartó réteg vastagsága |
| m, $m_{i,j}$ | hasábelem magassága<br>telített viztartó réteg vastagsága |
| N | a részecskék száma a véletlen bolyongás módszerénél |
| $N_i$, $N_i(x,y,z)$, $N_i^{(e)}$ | a végeselem módszer interpolációs- (vagy bázis-) függvénye |
| n | csomópontok darabszáma egy-egy elemen belül<br>hézagtérfogat<br>a tapasztalati variogram számításához felhasznált pontpárok száma |
| $n_0$ | szabad hézegtérfogat |
| P | egy végeselem élén elhelyezkedő pont általános jele (FEM) |
| Pe, $Pe_x$, $Pe_y$, $Pe_L$ | Peclet-szám |
| $q_{i,j}$ | a vizkivétel, -betáplálás hozama az i,j hasábelem egységnyi felületére vetítve |
| Q | kút vízhozama |
| R, R(x,y,z), $R_i^{(e)}$ | a közelitőfüggvény alakalmazása okozta hiba- vagy maradékfüggvény (FEM) |
| R | késleltetési tényező (retardációs faktor) |
| $S_0$ , $s_{i,j}$ | a súlyozott átlagszámításnál alkalmazott súly |
| S | tárolási tényező |
| $S_{belsõ,i,j}$ | a depónia aktivitásának értéke a hasábelem egységnyi területére vonatkoztatva [mg/s/m$^2$] |
| $S_i^{(e)}$ | alaki függvény (FEM) |
| s, t | lokális sikbeli koordinátarendszer kitüntetett irányai |

ALKALMAZOTT JELÖLÉSEK (FOLYTATÁS):

| A jelölés | A jelölés jelentése |
|---|---|
| $T$ | transzmisszibilitás<br>felezési idő |
| $t$ | idő |
| $t_0$ | kezdeti időpont |
| $\Delta t$ | időlépcső |
| $V^{(e)}$ | az egyes elemek térfogata |
| $v_x, v_y, v_z$ | áramlási sebesség a közegben x, y, z irányokban |
| $\bar{v}_x, \bar{v}_y, \bar{v}_z$ | a szivárgás sebessége a pórusokban |
| $W(x,y,z)$, $W_i^{(e)}$ | a maradékok minimalizálásához felhasznált súlyfüggvény (FEM) |
| $w$ | egydimenziós áramlási tér infinitezimális szélessége |
| $x, y, z$ | a globális koordinátarendszer kitüntetett irányai |
| $x^{(e)}$ | x általános változó értéke a modellezett tér e elemében (pl. $\Theta^{(e)}$ vagy $N_i^{(e)}$ ) |
| $x_i$ | x általános változó értéke az adott elemhez tartozó i rácspontban (pl. $N_i$ ) |
| $x_i^{(e)}$ | x általános változó értéke a modellezett tér e elemének i rácspontjában (pl. $N_i^{(e)}$ ) |
| $Z$, $Z'$ | paraméterbecslés során becsült érték<br>normális eloszlású véletlenszámok a véletlen bolyongás módszerénél |
| $Z_P$ | A P pontban mért vagy észlelt érték |
| $\alpha$ | numerikus oszcilláció elemmérettől függő tényezője (FEM)<br>viszkozitási faktor |
| $\alpha_L$ | longitudinális diszperzivitás |
| $\alpha_T$ | transzverzális diszperzivitás |
| $\gamma$ | negativ adszorpciós tényező |
| $\gamma(h)$ | variogram-függvény |
| $\varepsilon$ | a vízmérleg felállítása során elkövetett hiba<br>az adott időlépcsőn belül egy tetszőleges időpillanat |
| $\varepsilon, \eta, \zeta$ | lokális térbeli koordinátarendszer kitüntetett irányai |
| $\{\}$ | mezőváltozó vektor |
| $i$ | a mezőváltozó ismeretlen értékei a csomópontokban |
| $\phi(x,y,z)$ | a diffrerenciálegyenlet valódi megoldásfüggvényének általános alakja (FEM) |
| $\hat{\phi}(x,y,z)$ | a differenciálegyenlet közelítő megoldásfüggvényének általánaos alakja (FEM) |
| $\lambda$ | a bomlási együttható. |
| $\mu$ | a megoszló szennyezőanyag-terhelés mértéke egységnyi felületre vetítve |
| $\rho_b$, $\rho_b^{(e)}$ | a porózus közeg test- vagy halomsürüsége |
| $\sigma$ | A Gauss-féle hibafüggvény szórása |

ALKALMAZOTT JELÖLÉSEK (FOLYTATÁS):

| A jelölés | A jelölés jelentése |
|---|---|
| $\tau$ | tortuozitás (labirintus-faktor) |
| $\Theta$, $\Theta^{(e)}$ | víz mennyisége térfogategységenként ($cm^3/cm^3$ közeg), megfelel fázisos összetétel v méröszámának |
| $\omega$ | dimenzió nélküli időtényező a véges differencia módszer alkalmazásakor |
| $\Omega$ | a vizsgált domén: szakasz, felület vagy térfogat általános jele |