

STUDIUL INFLUENȚEI NEOMOGENITĂȚILOR LOCALE ASUPRA PROCESELOR DE MIȘCARE ȘI TRANSPORT DIN ACVIFER

Teză destinată obținerii
titlului științific de doctor inginer
la
Universitatea "Politehnica" din Timișoara
în domeniul INGINERIE CIVILĂ
de către

Ing. Bakoș (Pișleagă) Mihaela Violeta

Conducător științific: prof.univ.dr.ing. Dipl. Mat. Ioan David
Referenți științifici: prof.univ.dr.ing. Ioan Bica
prof.univ.dr.ing. Nicu Cornel Sabău
prof.univ.dr.ing. Eugen Teodor Man

Ziua susținerii tezei: 4 mai 2011

Cuvânt înainte

Lucrarea de față prezintă rezultatele obținute în urma activității de cercetare desfășurate în cadrul Catedrei de Hidraulică, Inginerie Sanitară și Gospodărirea Apei a Facultății de Hidrotehnică din Timișoara.

Tema de cercetare abordată având ca obiectiv principal perfecționarea tehnicilor de modelare a curgerii și transportului poluanților în acvifere, prin realizarea unui studiu sistematic asupra influenței neomogenității parametrilor caracteristici, este deosebit de actuală și oportună, știut fiind că diferențele care apar între procesele de mișcare și transport reale și cele obținute prin modelare pot fi atribuite aproape integral variabilității spațiale a parametrilor hidrogeologici, iar în literatura de specialitate nu există în acest sens un studiu sistematic.

Strâns legat de aceasta se cercetează în teză, pe baza unor experimente numerice sistematice, condițiile de aplicabilitate a unor metode de modelare a proceselor de transport din acvifer, stabilind de exemplu pentru metoda Random Walk numărul minim de particule necesare în simularea transportului de poluanți, în vederea obținerii a unor rezultate corecte pentru distribuția concentrațiilor în spațiu și timp. Aceste rezultate sunt remarcabile și reprezintă o completare valoroasă a literaturii de specialitate cu aspecte noi, deosebit de utile pentru aplicații practice.

Destinatarii dedicației.

Mulțumiri deosebite se cuvin conducătorului de doctorat prof.dr.ing. Dipl. Mat Ioan David pentru generozitatea cu care m-a inițiat în munca de cercetare, pentru sprijinul acordat permanent în pregătirea și elaborarea tezei cât și pentru bogatul material bibliografic pus la dispoziție.

Exprim sincere mulțumiri domnilor prof. dr. ing. Ioan Bica, prof. dr. ing. Cornel Nicu Sabău și prof. dr. ing. Teodor Eugen Man pentru onoarea de a accepta să fie referenți în comisia de doctorat, pentru revizuirea atentă a lucrării și pentru sugestiile utile pe care le-au adus.

Mulțumesc domnului prof. dr. ing. Victor Doandeaș pentru prezidarea comisiei de doctorat.

Doresc să-mi exprim profunda stimă și considerație față de toți cei care m-au încurajat și mi-au fost aproape pe tot parcursul pregătirii mele pentru susținerea prezentei teze de doctorat: Conf. dr. ing. Șumălan Ioan, Conf. dr. ing. Carabeț Adrian și membrilor Catedrei de Hidraulică, Inginerie Sanitară și Gospodărirea Apei.

Nu în ultimul rând țin să mulțumesc familiei pentru sprijinul moral acordat. Celor dragi le dedic această lucrare.

Timișoara, mai 2011

Bakoș (Pișleagă) Mihaela Violeta

Bakos (Pişleagă) Mihaela Violeta

Studiul influenței neomogenităților locale asupra proceselor de mișcare și transport din acvifer

Cuvinte cheie: parametri hidrogeologici, ecuații cu derivate parțiale, modelare curgerii și transportului în acvifer, Metoda Diferențelor Finite, Metoda Random Walk

Rezumat,

Teza aduce o serie de contribuții, vizând perfecționarea tehnicilor de modelare a curgerii subterane și a transportului poluanților în acvifere.

Pe baza unei sinteze bibliografice privind stadiul actual al cercetării și fundamentarea teoretică a problemelor legate de influența variabilității (neomogenității) parametrilor caracteristici ai acviferelor asupra rezultatelor simulării se aduc o serie de contribuții dintre care se menționează în mod deosebit:

- Realizarea unui experiment numeric asupra condițiilor de aplicabilitate a unor programe (ex. ASWIN), respectiv a metodelor de modelare numerică a proceselor de transport din acvifer (ex.: MeDiFin, Random Walk) pe care se bazează aceste programe.

- Sistematizarea rezultatelor simulării și stabilirea pe această bază a unor recomandări concrete, de mare utilitate practică, pentru utilizatorii de programe de simulare cum ar fi numărul minim de particule necesar la aplicarea metodei RW pentru simularea evoluției concentrației poluanților

- Realizarea unor simulări sistematice pentru analiza influenței neomogenităților unor parametri caracteristici, care descriu curgerea și transportul în acvifere (porozitate, conductivitate hidraulică) evidențiind că diferențele care apar între procesele de mișcare și transport reale și cele obținute prin modelare pot fi atribuite aproape integral variabilității spațiale a parametrilor hidrogeologici.

- Aplicarea efectivă a metodelor de analiză a variabilității parametrilor pentru un studiu de caz (halda de cenușă Utvin)

CUPRINS

I. Introducere

I.1 Importanța și relevanța conținutului științific	7
I.2 Stadiul actual al cunoașterii în	8
I.3 Starea actuală a calității apelor subterane din România	12

II. Caracteristici generale și schematizarea mediului poros

II.1 Importanța apei subterane ca și componentă a ciclului hidrologic	16
II.2 Conceptul micro și macroscopic al proceselor din acvifer	18
II.3 Porozitatea	20
II.4 Porozitatea și granulozitatea	22
II.5 Permeabilitatea intrinsecă	24
II.6 Conductivitatea hidraulică	24
II.7 Anizotropia și neomogenitatea	29
II.8 Transmisivitatea	31
II.9 Noțiunea de acvifer	31

III. Modelarea matematică a curgerii și transportului în acvifer

III.1 Ecuații fundamentale ale curgerii în mediu poros	33
III.1.2 Scurtă istorie a modelării curgerii în medii poroase	33
III.1.3 Legea lui Darcy	34
III.1.4 Ecuația de continuitate	37
III.1.5 Ecuația generală a curgerii în acvifer	38
III.2 Aspecte ale transportului poluanților în mediu poros	39
III.2.1 Mecanisme de transport a fazei miscibile	40
III.2.2 Ecuația generală a transportului în acvifer	46

IV. Metode și soluții pentru rezolvarea ecuațiilor curgerii și transportului din acvifer

IV.1 Introducere în modelarea matematică	52
IV.2 Tipuri de modele în medii poroase	52
IV.3 Etape folosite în pregătirea și executarea unui model	54
IV.4 Prezentarea programului de calcul ASMWIN	65
IV.5 Metode de rezolvare a problemelor de transport din acvifer	68

V. Contribuții privind aplicarea modelelor de simulare a proceselor de transport din acvifer

V.1 Analiza comparativă între metodele Diferențe finite și Random Walk	79
V.2 Experimente numerice vizând analiza influenței neomogenității parametrilor hidrogeologici asupra proceselor din acvifer și asupra rezultatelor simulării	96
V.3 Experimente numerice asupra condițiilor de aplicabilitate a unor metode de modelare a proceselor de transport în acvifer	105

VI. Sinteza contribuțiilor personale, recomandări și perspective

Bibliografie	119
--------------------	-----

I. INTRODUCERE

„A înțelege natura înseamnă a înțelege viitorul, dar și a face ceva pentru salvarea naturii atât de amenințată astăzi, înseamnă a contribui la fericirea omenirii.”

acad.Eugen Pora

Justificarea temei de cercetare abordată

O varietate de sisteme naturale și artificiale pot fi descrise cu ajutorul proceselor de curgere și transport din medii poroase. Cererile variază de la domenii clasice cum ar fi cele petroliere, ingineria civilă și a mediului, la noi discipline inclusiv „sechestrarea” de dioxid de carbon în formațiuni geologice de adâncime sau studii privind migrația de metan emis de la minele de cărbune abandonate.

Diferențele care apar între procesele de mișcare și transport reale și cele descrise de ecuațiile fundamentale pot fi atribuite aproape integral variabilității spațiale a parametrilor hidrogeologici și în special conductivității hidraulice.

În literatura de specialitate nu există în acest sens un studiu complet, care să analizeze în mod sistematic influența variabilității (neomogenității) parametrilor caracteristici asupra rezultatelor simulării.

Cercetările întreprinse în teză răspund unei asemenea necesități, vizând efectuarea unei analize sistematice a influenței neomogenităților unor parametri caracteristici ai acviferului, urmărind ca rezultatele obținute prin simulări să fie cât mai apropiate de cele reale, în condițiile unui mediu real eterogen.

Neomogenitatea sistemelor naturale duce la incertitudini în modelarea curgerii și transportului din acvifer. (Carrera 1993)

Dacă sistemul geologic ar fi omogen, dacă proprietățile rocilor ar fi constante în spațiu, și / sau ușor de determinat, hidrogeologia ar fi o disciplină extrem de plictisitoare. Din fericire, sistemul geologic este eterogen (fig.1), cu proprietăți ce variază în spațiu, ceea ce face din hidrogeologie o disciplină fascinantă.

Cu toții am auzit de experimente realizate în domeniu, în care s-a făcut omogenizarea sistemului prin amestecare orizonturilor superficiale, în caz contrar „sistemul ar fi prea complex și nu s-ar putea înțelege și descrie procesele prezente”.

Există două aspecte importante care se pierd prin omogenizarea sistemului: fascinația dată de studiul eterogenității spațiale și faptul că rezultatele sunt, în cea mai mare parte, inutile, pentru ca mediu real este eterogen.

Cuvântul „hidrogeologie” poate fi înțeles ca o combinație de „hidraulică” și „geologie” .

Putem spune că hidraulica este o știință relativ simplă, în care știm, cel puțin în principiu, ecuațiile care guvernează procesele hidraulice și le putem rezolva, analitic sau numeric, având în vedere geometria sistemului, condițiile la limită, etc. Geologie este mult mai complexă. Ea se referă la descrierea și istoria formării sistemului geologic, deoarece geologii au fost instruiți să accepte succesiunea de procese complexe implicate în crearea și modificarea de-a lungul timpului a unui sistem. Pentru a înțelege această complexitate, geologii au un număr limitat de indicii sau date, a căror interpretare prevede mai multe ipoteze și poate duce la soluții alternative. (De Marsily, 2005)

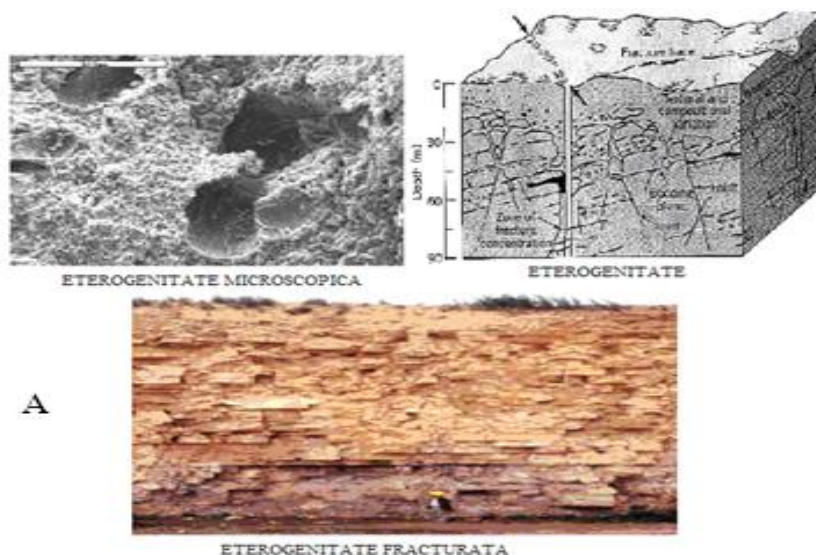


Fig. 1.1 Sistemul geologic real
(concept microscopic, macroscopic și neomogenitatea fracturată)

„Hidrogeologie” este știința în care cele două discipline sunt combinate pentru a găsi soluții în procesele de curgere și transport, într-un mediu complex - sistemul geologic.

I.1 Importanța și relevanța temei de cercetare abordată

Eterogenitatea spațială a conductivității hidraulice, este una din problemele principale cu care se confruntă hidrogeologii și specialiștii în domeniu.

Obiective urmărite în teză sunt:

- Realizarea unei sinteze bibliografice privind stadiul actual al cercetării și fundamentarea teoretică a problemelor legate de influența variabilității (neomogenității) parametrilor caracteristici ai acviferelor asupra rezultatelor simulării proceselor de mișcare și transport

- Realizarea unor experimente numerice asupra condițiilor de aplicabilitate a unor metode de modelare a proceselor de transport din acvifer (ex. MEDIF, Random Walk)

- Efectuarea unor simulări vizând analiza influenței neomogenităților unor parametri caracteristici care descriu curgerea și transportul în acvifer (ex. porozitate, conductivitate hidraulică) asupra rezultatelor simulărilor

- Aplicarea metodelor de modelare pe un caz real – Halda de cenușă Utvin

Într-un mediu real conductivitatea hidraulică variază de la un loc la altul foarte puternic. Această variabilitate are efect semnificativ asupra distribuției poluantului și poate fi redusă, nu neapărat prin studiu pe zone mai largi, deoarece și neomogenitatea macroscopică a acviferului este variabilă (exemplu lentilele de argila).

O constatare empirică (și o abordare stohastică) arată că nu k , ci $\ln(k)$ urmează o distribuție normală (fig. 1.2). Valorile reprezentate grafic sunt obținute prin măsurători în teren.

8 Introducere - I

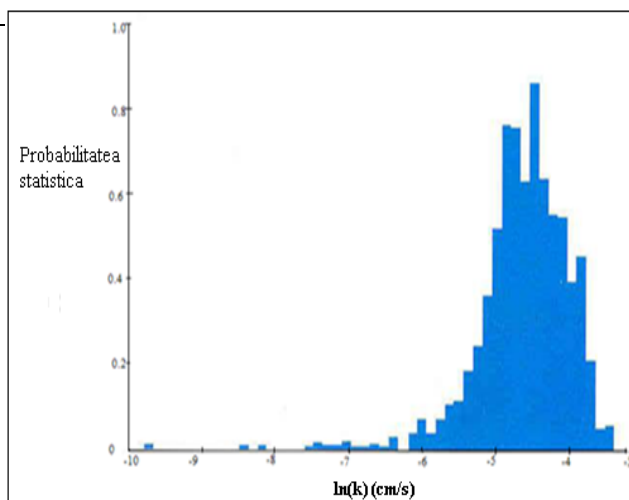


Fig.1.2 Distribuția conductivității hidraulice în diferite punct ale unui acvifer

Sursa: Werner Aeschbach-Hertig, 2006

Conductivitatea hidraulică variază cu câteva mărimi de ordine, și aceasta este principala dificultate în descrierea proceselor din acvifer.

I.2 Stadiul actual al cunoașterii în domeniu

Pentru cercetător (sau inginerul hidrotehnician) este important să cunoască care sunt limitele în acest domeniu și în același timp să știe unde poate merge mai departe cu studiul.

O scurtă trecere în revistă a principalilor hidrogeologi care au încercat să localizeze și să studieze mediul eterogen va fi prezentată mai jos.

În secolul XIII Brunetto Latini a descris mediul subteran prin comparație cu corpul uman, explicând că apa circulă în amonte și aval, așa cum venele "alimentează" cu sânge, corpul uman. În 1856 Paramelle, un hidrogeolog celebru a folosit cunoștințele sale geologice pentru a studia neomogenitatea și a descoperi acvifer.

Darcy H. (1856) descrie cu lux de amănunte dinamica apelor subterane formulând legea mișcării apei prin mediul poros omogen. El a folosit noțiunea de secțiune a unui acvifer, făcând diferența între un acvifer și un strat impermeabil.

Primul care a încercat să aplice legea Darcy pentru medii neomogene a fost Dupuit (1857, 1863), un matematician care a dezvoltat ecuația debitului la stare de echilibru și a încercat să găsească soluții analitice pentru diferite situații, cum ar fi soluția Dupuit-Forscheimer.

În 1935 Theis a realizat primul instrument pentru estimarea directă a proprietăților unui acvifer. Au putut fi măsurate proprietăți variabile ca permeabilitatea sau coeficientul de înmagazinare.

În 1906 Thiem face măsurători ale permeabilității in - situ, prin extracții din foraje de observație, sau prin teste de injecție, valorile obținute prin cele doua metode fiind apropiate.

Morris Muska, constată că variația aleatoare a permeabilității este imposibil de determinat și propune medierea ei, iar în 1945 Cardwell și Parsons stabilesc limitele de mediere ale permeabilității.

O primă recunoaștere a eterogenității, dar sub o formă simplă, a fost studiată în 1778 de geologul britanic Whitehurst și în 1789 de chimistul francez Lavoisier. Aceasta a fost și cauza pentru care mult timp s-a utilizat transmisivitatea în locul permeabilității, clasificarea straturilor în semipermeabile sau impermeabile făcându-se abia în 1960 de Paul Witherspoon.

Despre medierea eterogenității s-a discutat în detaliu în 1967 de către Matheron, deși problema fusese abordată anterior în alte domenii precum fizica în 1960 de Landau și Lifschitz. El a arătat că pentru o curgere bidimensională, cu straturi paralele și invariabile, medierea corectă este chiar media geometrică.

Testele de pompare rămân modul cel mai util folosit pentru a investiga proprietățile acviferelor. Cu alte cuvinte, testele în foraje au încă o viață lungă, fiind folosite la găsirea de noi soluții analitice, cum ar fi cele descoperite de Barker (1988) sau Chang și Yortsos (1990), Acuna și Yortsos (1995), pentru un mediu fracturat, dar cu aplicabilitate și în medii poroase.

Neomogenitatea conduce la incertitudini cu privire la valorile proprietăților acviferelor și, prin urmare, la incertitudini în estimările fluxului apelor subterane și în distribuția poluanților.

Stadiul actual al cunoașterii în domeniu este concretizat prin cărți, lucrări științifice, programe și modele ce descriu în detaliu procesul de poluare din mediu neomogen, folosind conceptul determinist (Sivakumar, 2000, 2004) sau stohastic. (Dagan, 1984, Gelhar, 1993; Zhang, 2002)

Comparații între previziunile hidrologice utilizând tehnicile deterministe și altele (de exemplu, metoda stohastica sau rețelele neuronale) au indicat obținerea unor rezultate mai bune în cazurile deterministe.

Un exemplu pentru modul de reprezentare a neomogenității este zona Sohag din Egipt (fig.1.3) cunoscută pentru prezența lentilelor de argilă. Lucrările anterioare executate în zonă utilizau modele pentru unu sau două straturi și foloseau ipotezele simplificatoare. (mediu omogen cu grosime uniformă).

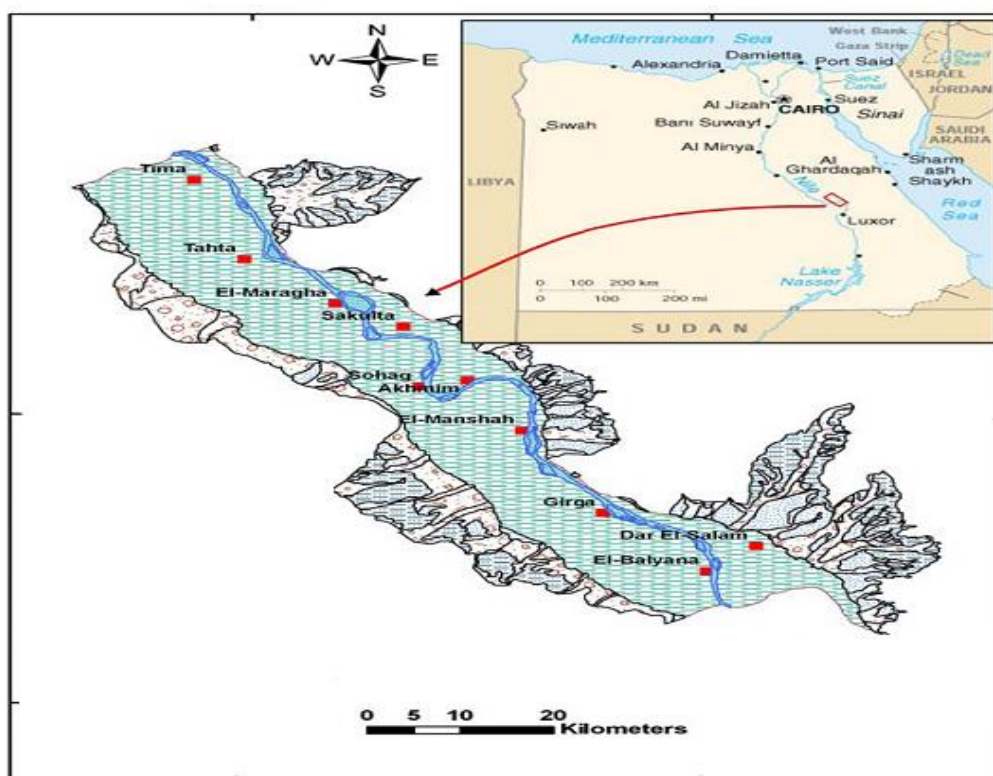


Fig. 1.3 Zona Sohag, Egipt

Sursa: Ayman A. Ahmed, 2009

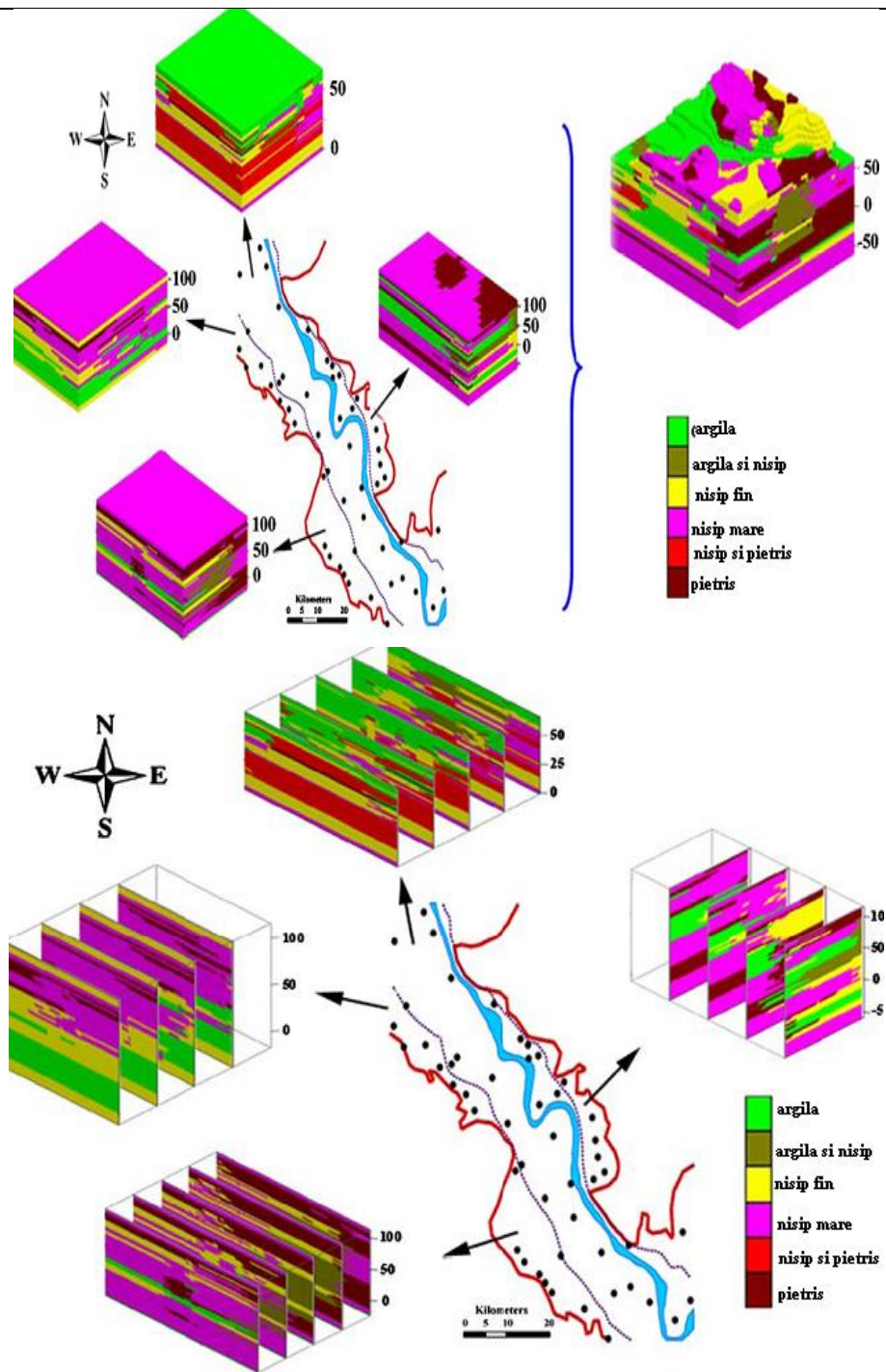


Fig. 1.4 Reprezentare litologică folosind programul RockWorks

Sursa: Ayman A. Ahmed, 2009

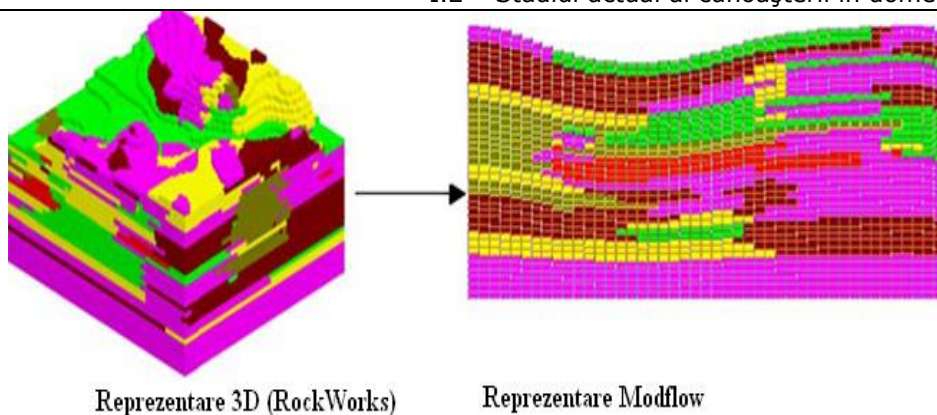


Fig1.5 Discretizarea rezultatelor spre a fi modelate cu Modflow

Sursa: Ayman A. Ahmed, 2009

Softul RockWorks (RockWare2002) este folosit pentru descrierea acviferului (fig. 1.4), rezultatele obținute fiind discretizate cu MODFLOW (fig. 1.5).

Un alt exemplu pentru reprezentarea și schematizarea neomogenității în acvifer este redat în fig. 1.6.

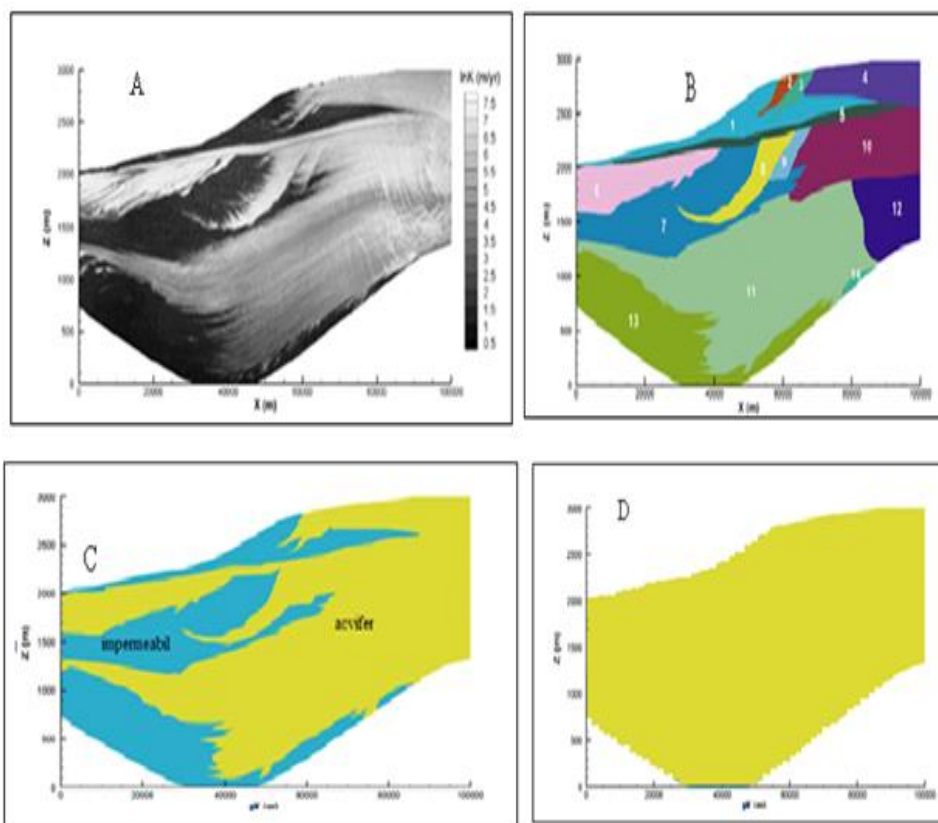


Fig. 1.6 Neomogenitatea în acvifer

Sursa: Zhang, 2007

I.3 Starea actuală a calității apelor subterane din România

Apa subterană face parte din circuitul închis al apei în natură, de aceea studiul poluării în acvifer este indispensabil într-un sistem de analiză a calității mediului. Caracterizarea poluării din acvifer presupune o bună cunoaștere a sistemului hidrogeologic, deci informații despre tipul și alcătuirea acviferului, stabilirea nivelului piezometric și identificarea direcției de curgere, relațiile acvifer - râu sau acvifer - acvifer, aportul ploii, delimitarea zonei afectate, etc.

Înțelegerea și evaluarea corectă a fenomenului de curgere și transport în acvifer este foarte importantă pentru:

- estimarea reîncărcării naturale și bilanțul hidric
- estimarea nivelurilor și debitelor apelor subterane
- gestionarea relației acvifer - râu
- evaluarea impactului probabil datorat poluării
- stabilirea de criterii pentru localizarea, proiectarea și desfășurarea

activităților de depozitare a deșeurilor

- dezvoltarea de tehnici de remediere eficiente pentru protecția și reabilitarea calității acviferului

Apele subterane sunt resurse naturale pentru care prevenirea poluării, monitoringul și reabilitarea sunt mult mai dificile decât pentru apele de suprafață, datorită inaccesibilității lor.

În acvifer este dificilă atât localizarea și caracterizarea adecvată a poluării cât și înțelegerea impactului produs de poluare, având adesea ca rezultat o lipsă de conștientizare sau o lipsă a evidenței extinderii poluantului.

“Calitatea apelor subterane din România se află încă la un nivel necorespunzător, ca urmare a ritmului lent de autoepurare, iar peste jumătate (58%) din suprafața României este vulnerabilă la poluarea cu nitriți”, potrivit unui raport prezentat de Administrația Națională Apele Române la sfârșitul anului 2009.

Calitatea apelor subterane este studiată la nivelul marilor bazine hidrografice, pe unități morfologice, iar în cadrul acestora, pe structuri acvifere subterane, prin intermediul stațiilor hidrogeologice, fiind alcătuite din unul sau mai multe foraje de observație.

Fig 1.7 prezintă posibile surse de poluarea ale apei subterane (cu roșu) și măsurile de prevenire a poluării (cu verde).

În funcție de factorii care produc poluarea apei subterane, din analiza datelor existente la nivelul fiecărui bazin hidrografic, cele mai frecvente cauze de poluare a apelor subterane, la nivelul țării noastre, sunt: poluarea cu produse petroliere, cu produse rezultate din procesele industriale (halde de steril), cu produse chimice utilizate în agricultură, cu produse menajere (depozite de deșeuri) și rezultate din zootehnie.

Produsele petroliere (lichide nemiscibile cu apa) sunt o cauză importantă de poluare a acviferelor, în special în zona operațiunilor de forare. O estimare arată că o tonă de petrol se pierde pentru fiecare milion tonă de petrol transportat.

Haldele de steril sunt una din cele mai importante surse de poluare. Ca și în cazul depozitului de deșeuri, levigatul este generat de dizolvare materialelor solide de către precipitații. Deșeuri din exploatarea de cărbune, minereuri de cupru pot genera acid sulfuric și levigatul devine acide. Levigatul mai poate conține metale grele sau radionuclizi.

Depozitele de deșeuri reprezintă unul din cele mai importante surse de poluare cu impact major asupra mediului. Aspectele negative generate de aceste surse de poluare rezultă din eterogenitatea deșeurilor depozitate. Depozitele de deșeuri sunt sisteme proiectate și create pentru a stoca deșeuri industriale și menajere, Substanțele solide eliminate în depozitele de deșeuri sunt dizolvate de precipitații și amestecate cu deșeuri lichide, formând levigatul. Deși depozitele sunt proiectate cu sisteme de drenaj, garnituri și impermeabile, se poate infiltra levigatul care poluează apele subterane. Levigatul este extrem de concentrat, acesta conține metale (Fe, Cu, Mn, Zn, Hg), nitrați, amoniac și mai mult de 40 de compuși organici. Prin

procesul de biodegradare se descompun multe substanțe organice în substanțe anorganice. Ele provoacă daune atât asupra solului pe care sunt amplasate, cât și asupra aerului, apelor de suprafață și subterane, ecosistemelor existente în zonă. Depozitele de deșeuri sunt surse potențiale de contaminare care trebuie studiate în detaliu pentru a caracteriza și evalua corect impactul produs asupra mediului, în consecință pentru a aplica măsurile de reabilitarea a zonei afectate.

Agricultura este o sursă diferită de poluare a apei. În multe cazuri, este folosită apă în exces pentru irigare, având ca efect o creștere generală a suprafeței piezometrice și modificarea condițiile de debit. Apa va dizolva și transporta substanțele chimice folosite ca pesticide, îngrășăminte sau erbicide generând astfel poluarea.

Deși pesticidele prezente azi sunt biodegradabile, unele dintre acestea pot contamina apa. Din cele trei componente principale de nutrienți utilizate ca îngrășăminte, adică azot, fosfor și potasiu, azot sub formă de NO_3 este considerat ca fiind cea mai importantă sursă de poluare a apelor subterane. Utilizarea excesivă a îngrășămintelor, gunoiului de grajd și pesticidelor, în agricultură, a dus la apariția unor importante cantități de nitrați în apele subterane cu nivel liber. Modificări ale calității apei subterane reprezintă un motiv de îngrijorare în zonele rurale unde acviferele de mică adâncime sunt folosite ca surse de apă potabilă. Spre deosebire de sursele industriale sau domestice, sursele agricole sunt extinse pe o suprafață mare având ca efect poluarea la scara regională.

O sursă importantă de poluare a acviferelor o reprezintă *apele uzate menajere*. Timp de mulți ani, obiectivul principal în tratarea apelor uzate menajere a fost de a reduce conținutul de substanțe solide în suspensie, compuși anorganici dizolvați și bacteriile dăunătoare. În ultimii ani, s-a pus accent pe îmbunătățirea metodelor de eliminare a reziduurilor solide din procesele de tratare. După o evaluare globală la nivelul bazinelor hidrografice rezultă o situație critică a calității apei subterane din numeroase zone ale țării, influențată de impactul antropic, chiar dacă în prezent s-a produs o reducere a cantității de substanțe poluante evacuate în receptorii naturali.

Rezultate ale impactului antropic sunt creșteri importante ale nivelurilor piezometrice (în special în perioadele bogate în precipitații), fenomen legat de sistemele de irigații incorect proiectate, executate și exploatate, scăderi importante ale nivelurilor piezometrice datorită prelevărilor excesive de apă subterană prin captări, efectul fiind atragerea accelerată de ape poluate spre zonele depresionare și scăderea drastică a debitelor exploatate ale captărilor din zonele afectate.

Fenomenul de poluare al acviferelor este aproape ireversibil și depoluarea extrem de anevoioasă cu consecințe grave asupra folosirii apei în scopuri potabile.

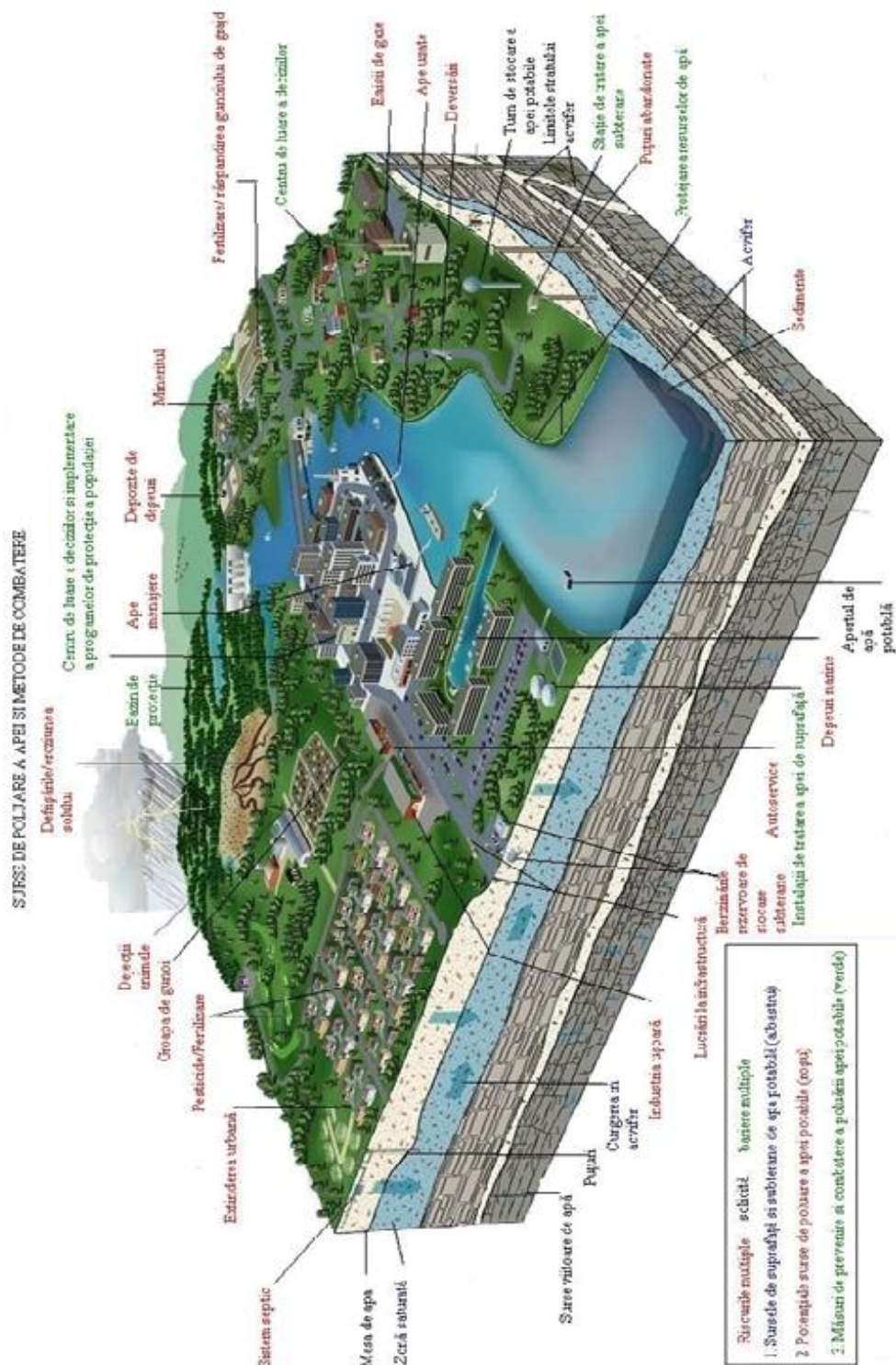


Fig. 1.7 Surse de poluare și metode de combatere
 Sursa: <http://oceanworld.tamu.edu/resources/environment-book/groundwatercontamination.html>

Acest lucru a dus la condamnarea unor captări din acvifer și la căutarea și punerea în funcțiune a unor noi fronturi de captare, ceea ce a implicat eforturi și cheltuieli apreciabile, de aceea, în cadrul politicii de gospodărire a calității apelor, trebuie să primeze măsurile de prevenire a proceselor de degradare calitativă, de fapt a tuturor resurselor de apă.

II. CARACTERISTICI GENERALE ȘI SCHEMATIZAREA MEDIULUI POROS

“Dacă vrei să conversăm, întâi trebuie să definim termenii”

Voltaire

Curgerea prin mediu poros este un subiect des întâlnit în multe ramuri ale ingineriei cum ar fi hidrologia apelor subterane, mecanica sau ingineria chimică a solului.

II.1 Importanța apei subterane ca și componentă a ciclului hidrologic

O estimare relativă a volumului de apă de pe Pământ, (Maidement, 1993), indică importanța apei subterane, ca sursă principală de apă potabilă.

Tabelul 1

Repartiția apei pe Glob (Sursa: Delleur, 2007)

Sursa	Volumul km ³	% din totalul de apa	% din totalul de apa dulce
Oceane	1.338.000.000	96.50	
Apa subterană			
Dulce	10.530.000	0.76	
Sărată	12.870.000	0.93	30.10
Apa din sol	16.500	0.0012	0.05
Apa din gheata polara	24.063.500	1.7	68.6
Apa din alte surse de gheață și zăpadă	340.600	0.025	1.0
Lacuri			
Dulci	91.000	0.007	0.26
Sărate	85.400	0.006	
Mlaștini	11.470	0.0008	0.03
Râuri	2.120	0.0002	0.006
Apa biologică	1.120	0.0001	0.003
Apa atmosferică	12.900	0.001	0.04
Total apă	1.385.984.610	100	
Total apă dulce	35.029.210	2.5	100

În tabelul 1 se observă că din totalul de 1.385.984.610 km³ de apă existenți pe glob, doar 35.029.210 km³, reprezintă apa dulce, adică 2.5%. Dar nici acești 2.5% nu sunt disponibili în totalitate pentru a fi utilizați ca sursă posibilă de apă, o parte fiind acumulați în ghețari, în sol și în mlaștini. Apa disponibilă o reprezintă 10.530.000 km³ apă subterană, 91.000 km³ apa din lacurile dulci și 2120 km³ apa din râuri. Rezultă un total de 10.623.120 km³ apă dulce, din care aproximativ 99% este reprezentată de apa din acvifer.

În tabelul 2 este redat timpul de reînnoire pentru principalele surse de apă existente pe glob.

Tabelul 2

Timpul de reînnoire pentru principalele surse de apa

Sursa	Timpul de reînnoire după (Jacques, 1996)	Timpul de reînnoire după (Gleick, 1993)
Oceane	2500 ani	3100 ani
Calote glaciare	1000-10.000 ani	16000 ani
Apa subterana	1500 ani	300 ani
Apa din sol	1 an	280 zile
Lacuri	10-20 ani	1-100 ani pentru cele de apa dulce 10-1000 ani pentru cele de apa sărată
Apa din atmosfera	8 zile	9 zile

Timpul de refacere a rezervei de apă din oceane este de 3000 de ani, iar pe continent durata de refacere este de 300 ani cu diferențe mari între râuri, lacuri, apa subterană și ghețari. Apa din atmosferă are o durată de refacere de 9 zile.

Ciclul hidrologic este esențial pentru a înțelege apariția, dezvoltare și management de furnizare al apei.

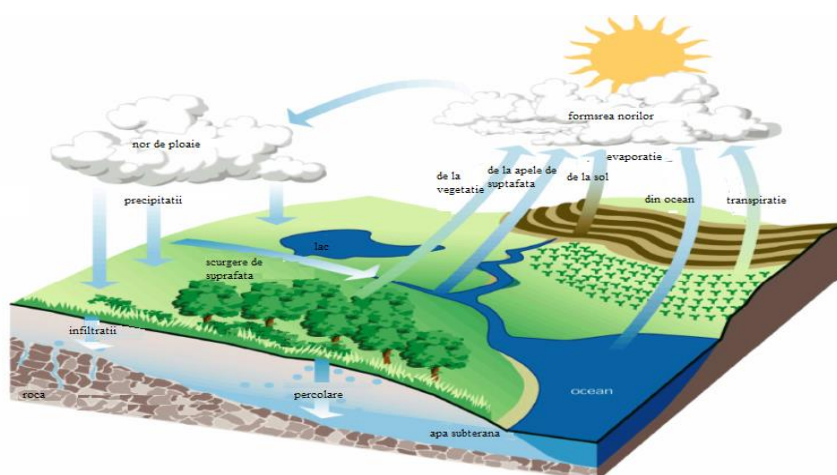


Fig.2.1 Schematizarea ciclului hidrologic

Sursa: O. Zayed, 2007

18 Caracteristici generale și schematizarea mediului poros – II

În fig. 2.1 este prezentat ciclul hidrologic anual al apei cu totalitatea proceselor ce participă la formarea lui. Mișcarea este elementul cheie în conceptul de ciclul hidrologic.

Apele subterane sunt parte a ciclului hidrologic. Cantități foarte mici de apă pot intra în ciclul hidrologic din alte surse (apele magmatice). Precipitațiile se infiltrează în zona rădăcinilor și în anumite condiții, o parte percolează la straturile mai profunde. Percolarea reprezintă principala contribuție la reîncărcare naturală a acviferelor.

II.2 Conceptul micro și macroscopic al proceselor din acvifer

O problema importantă în modelarea curgerii și transportului în acvifer este aceea a scării de modelare, care este un proces dificil. Există mai multe scări de modelare, prezentate în fig.2.2.

- Scara moleculară are dimensiunile cuprinse între 10^{-11} și 10^{-9} m, procesele sunt descrise de ecuațiile Boltzman;
- Scara porilor sau micro scara în care procesele sunt descrise la dimensiuni între 10^{-5} și 10^{-3} m și sunt reprezentate de ecuațiile Navier – Stokes;
- Scara de laborator sau macro scara cu dimensiuni cuprinse între 10^{-2} și 10^0 m și folosirea REV în descrierea proceselor;
- Mega scara descrie procesele la dimensiuni de 10^1 și 10^3 m, iar giga scara la dimensiuni cuprinse între 10^3 - 10^5 m sau chiar mai mari. Procesele de la nivelul scării de laborator, mega și giga scării sunt descrise de ecuațiile Darcy.

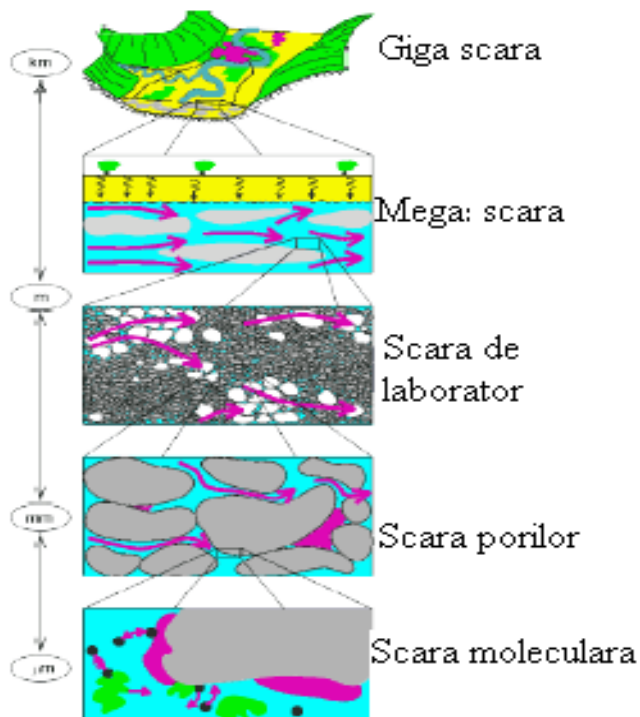


Fig.2.2 Tipurile de scări folosite pentru studiu în acvifer

Sursa: Grundwasser Modul 269

Când facem referire la legea lui Darcy, mediu microscopic este înlocuit cu REV, derivat dintr-un concept macroscopic. Legea Darcy oferă astfel o descriere globală a comportamentului microscopic, debitul obținut având o valoare medie a debitelor microscopice.

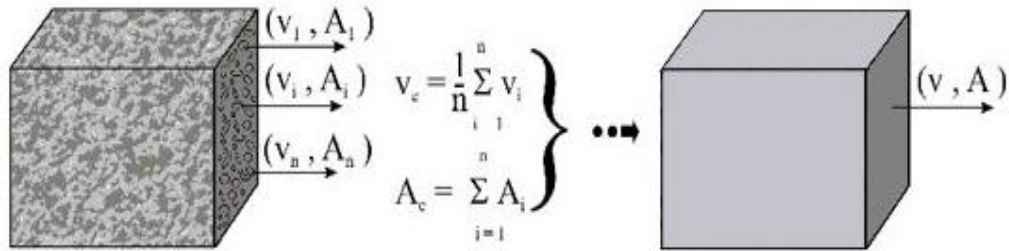


Fig.2.3 Conceptul microscopic și macroscopic al curgerii în mediu poros
Sursa: Freeze & Cherry, 1979

Conceptul microscopic implică utilizarea unor viteze microscopice. În practică, este imposibil să se măsoare vitezele microscopice și se acceptă o valoare medie. Această valoare este calculată luând în considerare suprafața efectivă care permite curgerea și care reprezintă o fracțiune din suprafața totală.

$$A_e = n_e \tag{2.1}$$

$$v_e = Q/A_e = Q/n_e A = q/n_e = v/n_e \tag{2.2}$$

Totuși, v_e nu reprezintă viteza medie care trece prin spațiile porilor, adevăratele viteze microscopice fiind mai mari decât v_e , deoarece căile reale sunt mai mari decât cele liniarizate de v_e (Freeze & Cherry, 1979). Ca urmare, v_e este menționată ca viteza liniară medie.

În modelarea microscopică se poate utiliza un scanner care redă imaginea 3D a unui eșantion de rocă foarte mic. (Micro CT Scanning fig. 2.4) Acest aparat scanează probele de dimensiuni mici (4-10 micrometri) și le transformă în rețele spre a fi modelate. (fig.2.5)



Fig.2.4 Micro CT Scanning
Sursa: Anwar Al-Kharusi, 2010

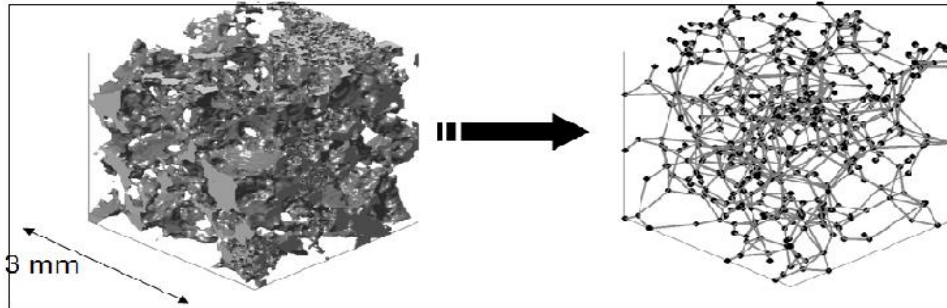


Fig. 2.5 Scanarea unei probe și transformarea ei în rețea.

Sursa: Anwar Al-Kharusi, 2010

Volum Elementar Reprezentativ

În general prin mediu poros înțelegem un material care are goluri interioare ce pot comunica între ele. Mediile poroase sunt: nisipurile, gresiile, calcarele, dolomitele, argilele și marnele. Rocile eruptive și rocile metamorfice sunt considerate impermeabile, cu excepția situațiilor în care au fisuri.

Proprietățile locale ale mediului poros pot fi definite prin: Volum Elementar Reprezentativ (REV) și funcții aleatoare.

Modelarea într-un mediu poros real se bazează pe ipoteza unui mediu poros echivalent, perfect continuu. Pentru a face această echivalență în bune condiții, este foarte important să se stabilească porozitatea teoretică a acestui mediu, care simulează fluxul real. Dacă această porozitate este stabilă pe baza unor eșantioane de volum mic, este foarte posibil să selectăm aleatoriu o porozitate fie prea mică sau prea mare și volumul de probă nu este reprezentativ pentru a caracteriza porozitatea solului. Un eșantion mai mare este necesar. Volumul minim selectat aleatoriu, care păstrează caracteristicile porozității totale a solului, este numit volum elementar reprezentativ (REV). La creșterea volumului eșantionului peste REV porozitatea trebuie să rămână aproape constantă.

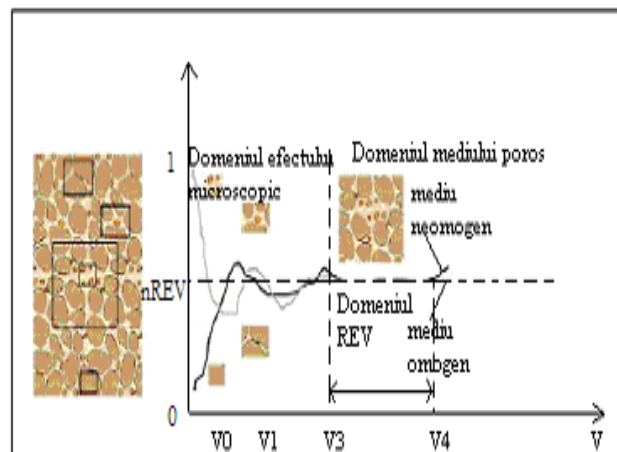


Fig.2.6 Alegerea și reprezentarea REV

Sursa: Bear 1979

R.E.V (Volum Elementar Reprezentativ) este o unitate de spațiu conceptuală (fig.2.6), și reprezintă o medie între volumele mici, considerate omogene (V_0 , V_1) și volumele aflate la

limita superioară, care sunt neomogene. REV este alcătuit din mai multe componente (apa, aer, sol, ulei) și mai multe faze (gaz - lichid, solid - lichid, solid - gaz).

II.3 Porozitatea

Este un parametru foarte important în studiul mișcării apei subterane deoarece influențează caracteristicile de stocare și drenare a tuturor tipurilor de acvifere. (fig.2.7)

Conținut apei din sol depinde de porozitate și permeabilitate.



Fig.2.7 Mediul poros

Sursa: Jakson 2008

Porozitatea este o mărime adimensională, ce se exprimă în procente (tabelul 3). Are valori cuprinse între 0 pentru mediul solid și 1 pentru mediul fluid.

Tabelul:3

Diferite tipuri de porozități ale pământului.

Tip roca	Porozitate (%)	Porozitate efectivă (%)
Pământ	50-60	40-50
Pietriș	25-40	15-25
Nisip	25-40	15-25
Argilă	40-70	5-10
Bazalt fisurat	5-50	
Gresii	5-30	2-20
Roci cristaline fisurate	0-10	

Sursa: Choquette & Pray 1970

Porozitatea este o noțiune globală, deoarece în realitate mulți pori sunt închiși.

22 Caracteristici generale și schematizarea mediului poros – II

Se notează cu „ n ” și este definită ca raportul între volumul porilor unei probe de pământ și volumul total al probei respective. Golurile poartă denumirea de interstii, spații poroase sau pori.

$$n = \frac{V_p}{V_t} \quad (2.3)$$

În practică se folosește porozitatea efectivă, care reprezintă raportul dintre volumul efectiv al porilor prin care fluidul se mișcă și volumul total al probei.

$$n_e = \frac{V_e}{V_t} \quad (2.4)$$

Se mai folosește și noțiunea de indice al porilor, e , care reprezintă raportul dintre volumul porilor și volumul scheletului solid.

$$e = \frac{V_p}{V_s} \quad (2.5)$$

Relația între e și n are expresia:

$$n = \frac{e}{e + 1} \quad (2.6)$$

Porozitatea poate avea o serie de componente, cu semnificație hidrogeologică distinctă, dependente în primul rând de textura pământului sau a rocii.

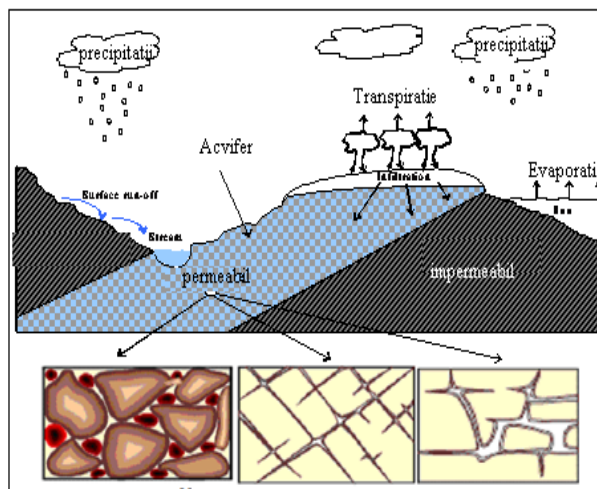


Fig.2.8 Reprezentarea schematică a tipurilor de porozități

Sursa: David 1998

Astfel întâlnim mediu poros, mediu carstic sau mediu fracturat (Fig.2.8)

II.4 Porozitatea și granulozitatea

Pentru un mediu poros ideal (teoretic), format din sfere de același diametru, se poate demonstra că există șase cazuri posibile de aranjare a sferelor învecinate, obținându-se porozitățile 26%, 30%, 40%, 48%. Vom ilustra doar două situații: pentru porozități de 26% și 48%.

a) cazul în care proba este alcătuită din particule sferice și uniforme, porozitatea este 47.65 % și centrul a patru particule formează nodurile unui cub (fig. 2.9).

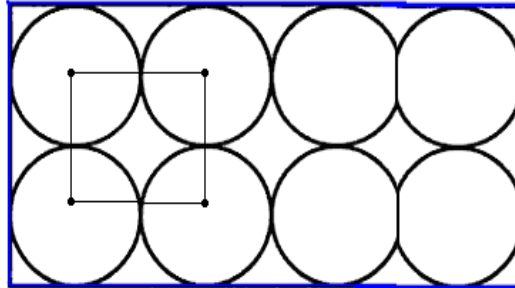


Fig.2.9 Particule uniforme ce formează un cub

Sursa: Delleur, 2007

b) cazul în care proba este alcătuită din particule sferice și uniforme, porozitatea este 25.95 % și centrul a patru particule formează nodurile unui romb (fig.2.10).

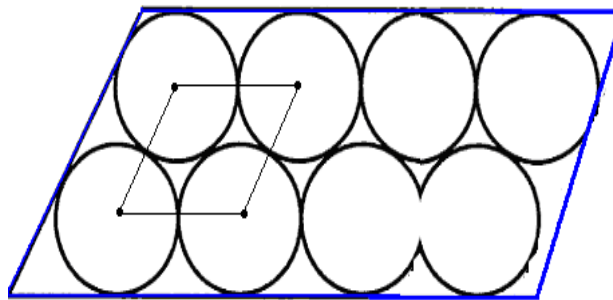


Fig.2.10 Particule uniforme ce formează un romb

Sursa: W Delleur, 2007

Cele două situații sunt considerate ideale deoarece în realitate particulele din probele analizate nu au nici formă sferică și nici nu sunt uniform distribuite. Pentru particule nesferice, tendința de scădere a porozității este compensată de neregularitățile particulelor.



Fig 2.11 Neuniformitatea din sol

Sursa: Bedient, 2005

24 Caracteristici generale și schematizarea mediului poros – II

În cazul în care particule mici vor ocupa spațiul dintre particulele mari, porozitatea va fi mai mică (fig.2.11), lucru demonstrat de coeficientul de uniformitate (atribuit lui Hazen Allen). În practică este de preferat măsurarea porozității mediului fără perturbarea structurii solide. Porozitatea depinde de așezarea particulelor, deci de consolidarea și tasarea mediului.

Pentru o secțiune a mediului poros se poate defini porozitatea de suprafață totală care reprezintă raportul dintre suprafața porilor și suprafața totală a rocii.

$$n_s = \frac{S_p}{S_t} \quad (2.7)$$

Pentru situațiile în care distribuția mărimii porilor este aleatoare, porozitatea de suprafață este independentă de orientarea suprafeței studiate și are aceeași valoare cu porozitatea de volum. Pentru mediile poroase neconsolidate se poate analiza, prin cernere, compoziția granulometrică a materialului respectiv.

Prin curba granulometrică se înțelege graficul care reprezintă variația procentului din particulele care traversează o sită cu ochiuri de diametru dat. (fig.2 12)

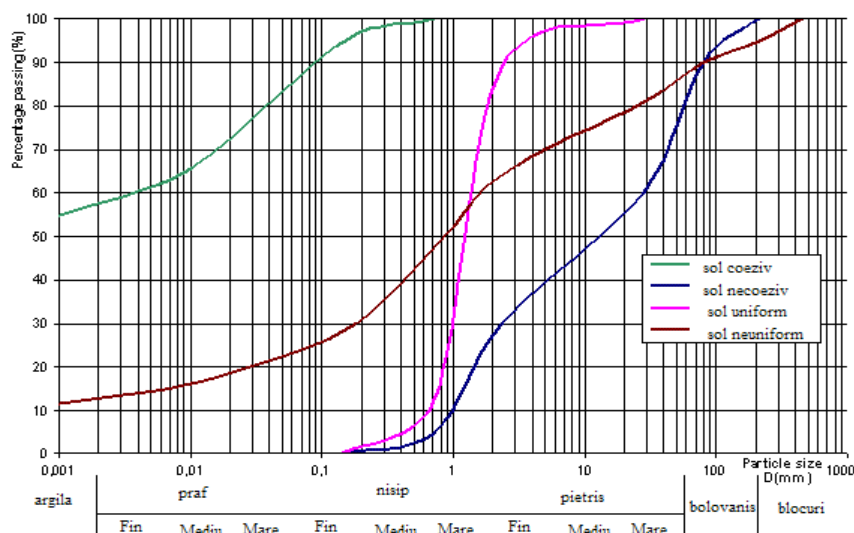


Fig.2.12 Curba granulometrică pentru diferite tipuri de sol

Sursa: http://echo2.epfl.ch/VICAIRE/mod_3/chapt_1/main.htm

Distribuția granulometrică a particulelor solului poate fi realizată prin metoda cernerii. Întreaga cantitate de sol este trecută prin mai multe site, cu dimensiuni din ce în ce mai mici. Procentul cumulativ care a trecut prin fiecare sită se calculează față de dimensiunea ochiurilor de sită.

Mărimea particulelor de distribuție a unui sol cu granulație fină, poate fi determinată prin metoda de sedimentare. Principiul metodei se bazează pe viteza de sedimentare a particulelor diferite, în funcție de mărimea lor. Viteza de sedimentare este proporțională cu dimensiunea particulelor.

Curba granulometrică se obține pe baza acestor două analize și reprezintă mărimea particulelor din sol pe abscisă, la scara logaritmică, iar pe ordonată, procentajul de greutate a particulelor solului, la scara aritmetică. Curbele de distribuție mai plate reprezintă particulele dintr-un sol neuniform și curba abruptă caracterizează o gamă îngustă de particule, adică un sol uniform.(fig.2.12)

II.5 Permeabilitatea intrinsecă

Prin permeabilitate intrinsecă K (m^2) se înțelege proprietatea unui pământ sau a unei roci de a lăsa să treacă prin el un fluid.

$$K = \frac{k_f \mu_d}{\rho g} \quad (2.8)$$

μ_d reprezintă vâscozitatea dinamică (10^{-3} kg/m/s)

ρ densitatea apei (1000 kg/m³)

g accelerația gravitațională (9.81 m/s²)

Permeabilitate intrinsecă nu depinde de temperatură, presiune, sau alte proprietăți ale fluidului. Se măsoară în cm^2 sau m^2 .

Exprimarea cantitativă a permeabilității se face cu ajutorul coeficientului de permeabilitate.

II. 6 Conductivitatea hidraulică

Conductivitatea hidraulică (fig.2.13) sau permeabilitatea hidrogeologilor reprezintă volumul de lichid, care străbate în unitatea de timp o secțiune transversală, a cărei arie este egală cu unitatea, sub un gradient hidraulic unitar.

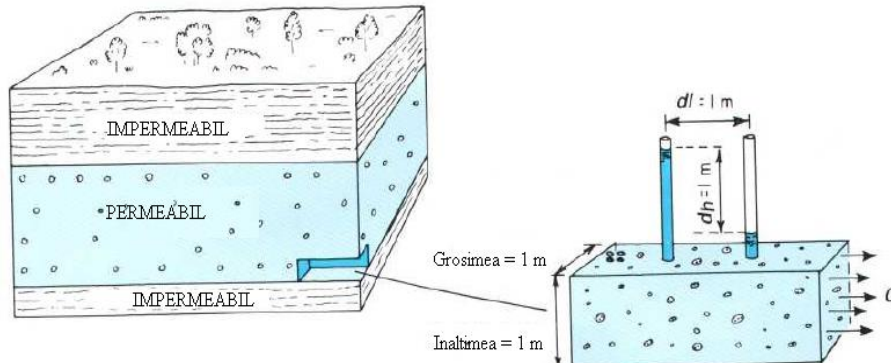


Fig. 2.13 Conductivitatea hidraulică

Sursa: Heath 1983

Unitatea de măsură folosită de hidrologi pentru conductivitatea hidraulică este m/zi, sau cm/sec. În S.I unitatea de măsură pentru conductivitatea hidraulică este m/s.

În cazul rocilor fisurate, conductivitatea hidraulică depinde în mare măsură de densitatea fracturii (crăpăturii) și de lățimea deschiderii lor. Fracturile pot crește conductivitatea hidraulică cu mai multe mărimi de ordine. Influența semnificativă pe care o au fracturile asupra conductivității hidraulice a fost studiată de mulți autori ca Main și Hocking (1977) sau De Marsily(1986) care au dat o relație de legătură între conductivitatea hidraulică a unei roci fracturate și cea a unui acvifer poros. Conform diagramei lor, fluxul de apă ce trece prin secțiunea transversală a unui mediu poros cu conductivitatea hidraulică de 10^{-12} m/s, într-un mediu impermeabil provine de la o singură fractură de 0.2 mm.

Conductivitatea hidraulică este dependentă de permeabilitatea intrinsecă a mediului K și de natura fluidului.

26 Caracteristici generale și schematizarea mediului poros – II

$$k_f = \frac{K \rho g}{\mu_d} \quad (2.9)$$

k_f - este conductivitatea hidraulică
 K - coeficientul de permeabilitate intrinsec

μ_d reprezintă vâscozitatea dinamică (10^{-3} kg/m/s)
 ρ - densitatea fluidului
 g - accelerația gravitațională
 ρg - greutatea specifică a fluidului

În fig.2.14 sunt date câteva valori ale permeabilității intrinseci și ale conductivității hidraulice pentru diferite soluri. Conductivitatea hidraulică variază între roci prin intermediul a 12 mărimi de ordine. Ea este diferită între tipurile de roci, dar poate varia și în aceeași rocă.

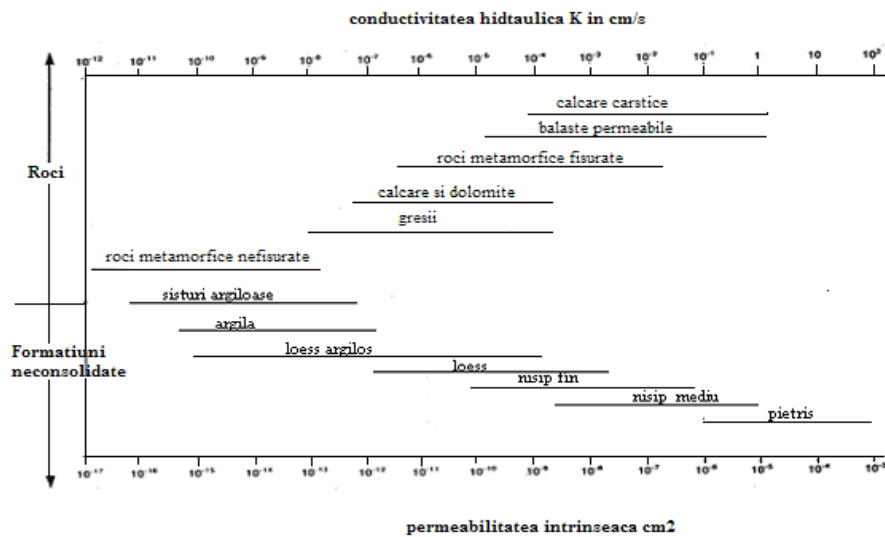


Fig.2.14 Permeabilitatea intrinsecă și conductivitatea hidraulică pentru diferite soluri
 Sursa: BRGM Formations

Dependența permeabilității și a conductivității hidraulice de modul de așezare al particulelor poate fi observat în fig. 2.15.

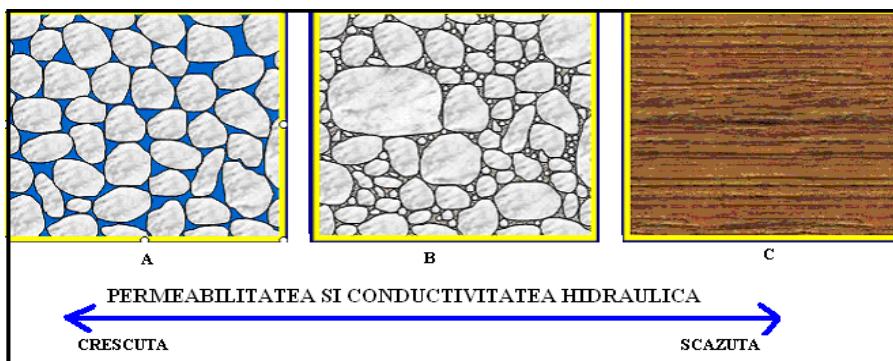


Fig 2.15 Dependența permeabilității și a conductivității hidraulice de modul de așezare al particulelor
 Sursa: Hudnes 2005

Modul de așezare al particulelor influențează procesele din mediu poros. O probă neașezată are o porozitate mai mică decât o probă aranjată.

În cazul (A) proba (nisip și pietriș) este bine asortată, cu granulație mare, cazul (B), proba este neasortată cu granulație fină și mare, cazul (C) prezintă o probă (praf și argilă) cu granulozitate fină.

Conductivitatea hidraulică se poate obține:

a) în laborator cu ajutorul permeametrului, așa cum reiese din fig.2.16.

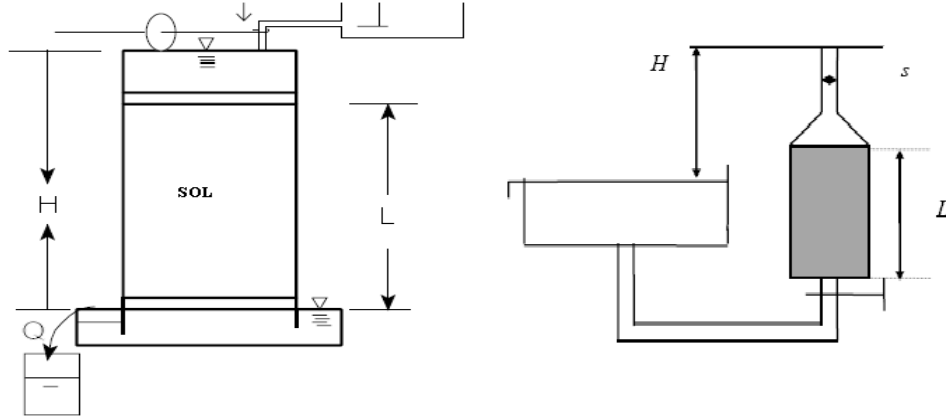


Fig. 2.16 Permeametrul cu sarcină constantă și cu sarcină variabilă

$$k_f = \frac{Q}{A(\Delta H / \Delta L)} \tag{2.10}$$

- k - este conductivitatea hidraulică (m/s)
- Q - este debitul ce străbate proba (m³/s)
- A - secțiunea transversală m²
- ΔH - pierderea de sarcină (m)
- ΔH / ΔL = I panta hidraulică
- ΔL - unitatea se lungime (m)

c) în teren (fig.2.17)

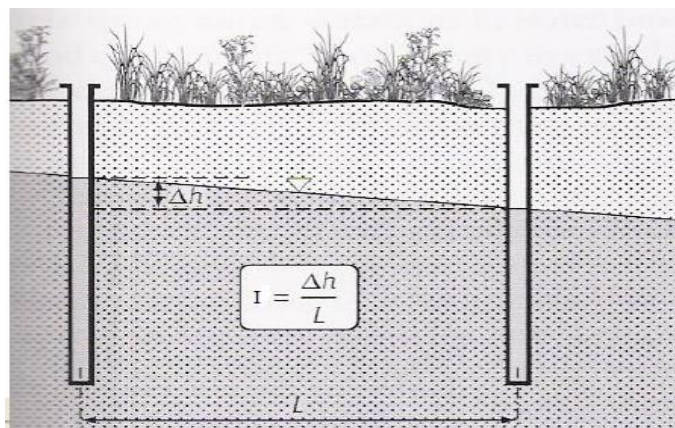


Fig.2.17 Reprezentarea gradientului hidraulic

Sursa: Younger, 2006

28 Caracteristici generale și schematizarea mediului poros – II

$$v = \frac{L}{T}, v_e = vn_e \quad (2.11)$$

$$k_f = \frac{vn_e}{I} \quad (2.12)$$

$$k_f = \frac{n_e L^2}{T \Delta h} \quad (2.13)$$

v_e este viteza de filtrație

I gradientul hidraulic sau panta

n_e porozitatea efectivă

d) cu ajutorul formulelor empirice

cu ajutorul formulelor empirice a lui Hazen sau Bayer

$$k_f = 0.0116d_{10}^2 \text{ după Hazen} \quad (2.14)$$

d_{10} reprezintă diametrul a 90 % particule din totalul probei în mm

$$k_f = Cd_{10}^2, \quad (2.15)$$

unde C aparține intervalului (0.06 mm-0.6mm.)

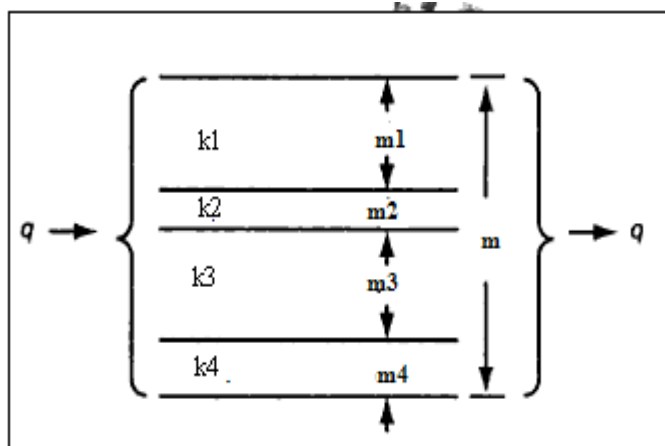
Legea este valabilă numai pentru nisip și pietriș, de aceea Bayer dezvoltă formula și pentru diametre cuprinse între 0.06 mm - 0.6mm.

În teren mediile studiate sunt neomogene și anizotrope, de aceea în modelare se pune problema stabilirii unei valori medii a conductivității hidraulice.

Pentru o curgere permanentă, cu un gradient hidraulic uniform, se folosesc următoarele formule (De Marcy, 1986)

a) Mediul este perfect stratificat, are N straturi, de grosime m_i și conductivitate hidraulică k_i

- în cazul în care curgerea este paralelă cu stratul avem:

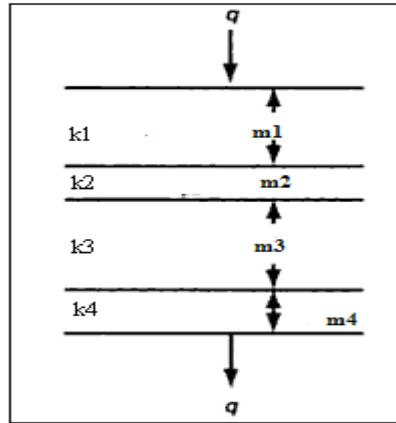


- Fig.2.18 Curgere paralelă cu stratul

- Sursa: Delleur, 2007

$$k_f = \frac{\sum_{i=1}^N m_i k_i}{\sum_{i=1}^N m_i} \tag{2.16}$$

- în cazul în care curgerea este perpendiculară pe strat



- Fig.2.19 Curgere perpendiculara cu stratul

- Sursa: Delleur, 2007

$$k_f = \frac{\sum_{i=1}^N m_i}{\sum_{i=1}^N \frac{m_i}{k_i}} \tag{2.17}$$

b) Mediul în care s-au făcut măsurători este neomogen, nestratificat
Model 2D

$$k_f = k_{teren} = (k_1 k_2 \dots k_m)^{1/m} \tag{2.18}$$

Model 3D

$$k_f = k_{teren} = (1 + \sigma_y^2 / 6) \tag{2.19}$$

Unde σ_y^2 este variația logaritmilor naturali ai măsurătorilor conductivității hidraulice.

În cazul în care gradientul hidraulic variază, nu există reguli de mediere a conductivității hidraulice.

În cazul acviferelor neomogene, alcătuite din două straturi paralele cu curgerea, la limita dintre cele două straturi are următoarele expresii:

$$M = M_1 = M_2 \tag{2.20}$$

$$h(M_1) = h(M_2) = h(M) \tag{2.21}$$

$$v_{y1} = v_{y2}, v_{x1} \neq v_{x2} \Rightarrow \frac{\tan \alpha_1}{\tan \alpha_2} = k_1/k_2 \tag{2.22}$$

30 Caracteristici generale și schematizarea mediului poros – II

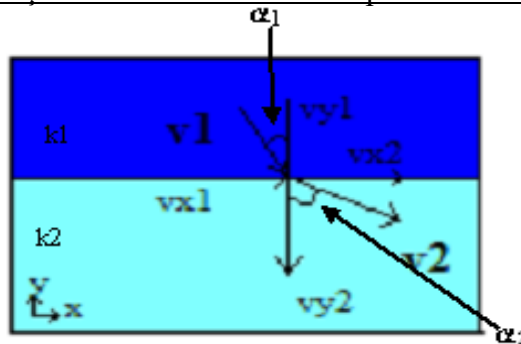


Fig. 2.20 Mediu neomogen

Sursa: Qi Bei, 2005

Se poate face și o clasificare a acviferelor în funcție de k:

- acvifere permeabile pentru k (10^{-1} - 10^{-4} m/s)
- acvifere semipermeabile pentru k (10^{-5} - 10^{-9} m/s)
- acvifere impermeabile pentru k (10^{-9} m/s)

Tabelul:4

Conductivitatea hidraulică pentru diferite tipuri de sol

Natura pământului	k (m/zi)	k (m/s)
Pietriș	100	10^{-3} - 10^0
Nisip grosier	20-100	$2.5 \cdot 10^{-5}$ - 10^{-3}
Nisip mediu	5-20	$5.0 \cdot 10^{-5}$ - $2.5 \cdot 10^{-3}$
Nisip fin	1-5	$5.0 \cdot 10^{-5}$ - 10^{-5}
Sol argilos	0.01-0.1	10^{-6} - 10^{-7}

II.7 Anizotropia și neomogenitatea

Conductivitatea hidraulică trebuie considerată o proprietate tensorială, care (pentru mediile tridimensionale) are următoarea expresie:

$$\vec{v} = -\overline{k_f} \nabla h \quad (2.23)$$

$$\vec{v} = \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{bmatrix} \text{ și } \nabla h = \begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial x} \\ \frac{\partial h}{\partial y} \\ \frac{\partial h}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

$$\vec{k}_f \Rightarrow \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.25)$$

În funcție de caracteristicile litologice, conductivitatea hidraulică a unei unități hidrogeologice poate fi constantă sau variabilă în spațiu. Aceasta poate fi independentă de direcția de măsurare sau poate varia cu ea, deci poate fi izotropă, respectiv anizotropă.

Cele mai multe ecuații hidraulice se bazează pe presupunerea că acviferele sunt omogene și izotrope. Aceasta înseamnă că într-un mediu omogen coeficientul de permeabilitate este independent de poziția punctului în cadrul formațiunii. Dacă coeficientul de permeabilitate rămâne constant oricare ar fi direcțiile la care ne referim, atunci mediul este omogen și izotrop.(fig.2.23) Mediul este omogen și anizotrop când conductivitatea hidraulică în poziție orizontală este semnificativ mai mare decât conductivitatea hidraulică în poziție verticală.(fig.2.22 și fig.2.23)

În situațiile când acest coeficient este variabil, mediul se numește neomogen. În fig. 2.21 avem un exemplu de mediu neomogen stratificat. În straturile orizontale raportul k_h/k_v are valori cuprinse între 2-10, dar valori mai mari de 100 ale raportului indică prezența lentilelor de argilă. În general, depozitele sedimentare neconsolidate și depozitele marine prezintă o eterogenitate în straturi, fiecare strat este considerat omogen, fiind caracterizat printr-o conductivitate hidraulică unică, dar forma întregului este eterogenă, cu o succesiune de valori k_1, k_2, \dots, k_n .

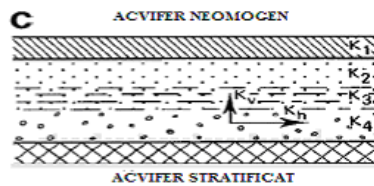


Fig. 2.21 Mediu neomogen stratificat

Anizotropia este o proprietate care se observă foarte bine la rocile fracturate.

În general, mediile poroase naturale sunt neomogene și anizotrope, permeabilitatea lor variind de la un punct la altul și având în același timp proprietăți direcționale.

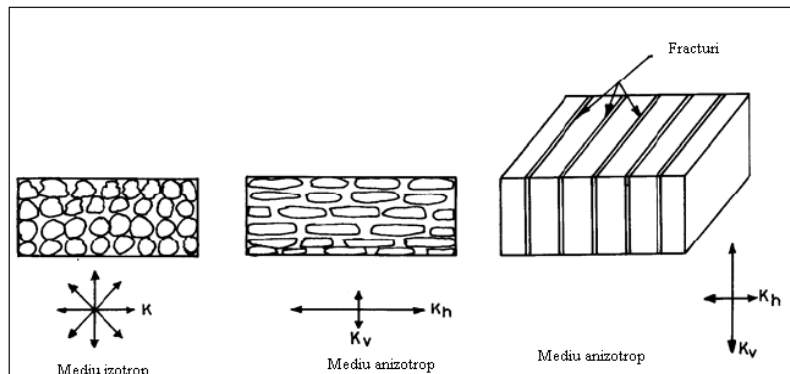


Fig. 2.22 Izotropia și anizotropia în acvifer

Sursa: http://www.warem.uni-stuttgart.de/docs/module/download537ME/2006_lecture3_Geol1.pdf

32 Caracteristici generale și schematizarea mediului poros – II

Majoritatea ecuațiilor ce caracterizează procesele din acvifer se bazează pe presupunerea că mediul este omogen și izotrop.

În fig.2.23. sunt prezentate situațiile de eterogenitate și anizotropie pentru un sistem 2D.

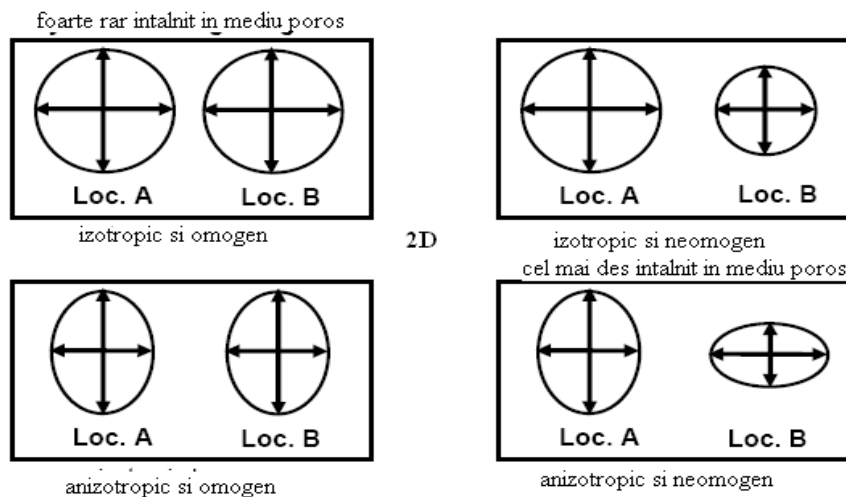


Fig. 2.23 Anizotropia și neomogenitatea în acvifer

Sursa: http://www.warem.uni-stuttgart.de/docs/module/download537ME/2006_lecture3_Geol1.pdf

Corespunzător procesului de sedimentare, zonele aluviale au o eterogenitate formată din depozite de pietriș (valori ridicate ale conductivității hidraulice), urmate de depozitele de nisip grosier, nisip mediu (valori mai mici ale acestui parametru) și, în final depozitele de nisip foarte fin, lutos, nisipuri argiloase pentru care conductivitatea hidraulică este foarte mică. (fig.2.24)

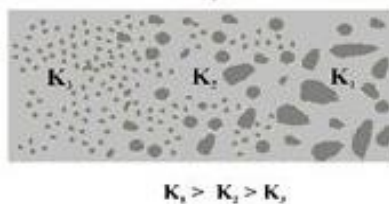


Fig.2.24 Acvifer eterogen corespunzător zonelor aluviale

Sursa: Fetter, 2001

Există cazuri în care două straturi, au un contrast puternic de conductivitatea hidraulică. (fig.2.25)

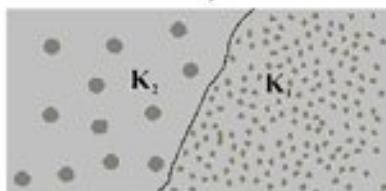


Fig.2.25 Acvifer eterogen cu contrast puternic de conductivitatea hidraulică

Sursa: Fetter, 2001

II.8 Transmisivitatea

Așa cum reiese din fig.2.26, transmisivitatea este produsul dintre conductivitatea hidraulică k_f și grosimea stratului acvifer m . Prin urmare transmisivitatea este rata de curgere într-o unitate de gradient hidraulic printr-o secțiune transversală de grosime m . Se folosește la studiul acviferelor sub presiune.

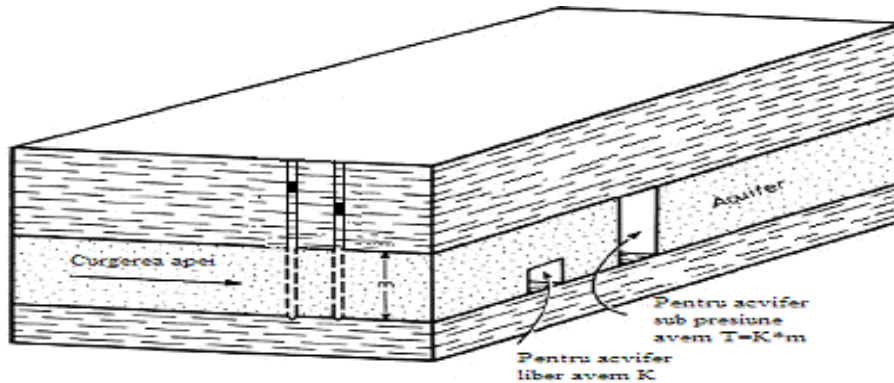


Fig.2.26. Transmisivitatea și conductivitatea hidraulică

Sursa: modificată după Holtz&Liesch, 2005

$$T = k_f m, \left[m^2 / zi \right] \quad (2.26)$$

k - este conductivitatea hidraulică (m/s)

m - reprezintă grosimea stratului acvifer

Transmisivitatea trebuie considerată o proprietate tensorială, care pentru mediile tridimensionale are următoarea expresie:

$$\bar{T} = \begin{bmatrix} T_{xx} & T_{xy} & T_{xz} \\ T_{yx} & T_{yy} & T_{yz} \\ T_{zx} & T_{zy} & T_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.27)$$

Transmisivitatea depinde de caracteristicile stratului, și cum în natură aceste straturi sunt neomogene și anizotrope, transmisivitatea se determină foarte greu.

În cele mai multe cazuri pentru determinarea transmisivității se folosesc încercările cu ajutorul pakerului, interpretarea rezultatelor făcându-se pe baza curbei de revenire a presiunii. (Ivan, 1985).

II.9 Noțiunea de acvifer

Atunci când studiem apa subterană folosim pentru explicații cuvântul "acvifer"

Todd (1959) explică originea termenului acvifer, care provine din latina, "aqua" însemnând apă și "ferre" a purta.

Un acvifer este o formațiune care permite apei să fie accesibilă la o rată utilizabilă. Straturile acvifere permeabile sunt nisipul, pietrișul și roca fracturată. Cantitatea de apă poate fi utilizată pentru băut, în scopuri comerciale, agricole sau industriale. Nu toată apa subterană se găsește în acvifer.

Apa subterană este distribuită pe verticală în două zone:

- O zona saturată, în care porii sunt complet umpluți cu apă;
- O zona nesaturată, în care porii conțin apă și aer;

Fig.2.27 reprezintă o schematizare a distribuției apei subterane.

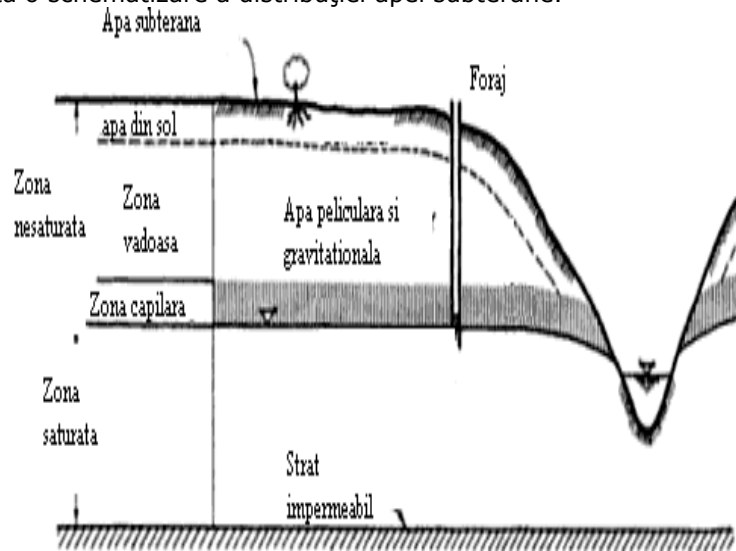


Fig.2.27 Distribuția apei subterane,

Sursa: Bear , 1972

Zona nesaturată este împărțită în trei subzone : zona " apa din sol", zona vadoasă și zona capilară.

Zona "apa din sol" este situată în imediata vecinătate a suprafeței solului. Extinderea acesteia variază în funcție de tipul de sol, de vegetație, de distribuția umidității și de prezența posibilă a nivelului de apă foarte aproape de sol. (Bear, 1978). Această zonă conține pe lângă apa moleculară, apă higroscopică și apă gravitațională. În timpul precipitațiilor excesive sau inundațiilor, straturile superficiale ale solului pot fi aproape de saturație.

Zona vadoasă se întinde de la marginea inferioară a zonei "apa din sol" până la limita superioară a zonei capilare. Grosimea zonei vadoase poate varia de la zero (pentru precipitații abundente) până la sute de metri în regiunile aride. În zona vadoasă apa este permanent ținută în loc de forțele higroscopice și capilare; dar aceste forțe nu pot reține orice surplus de apă care percolează prin zona vadoasă ca apă gravitațională.

Zona capilară, sau zona franjurilor, este cuprinsă între zona saturată la limita inferioară și zona vadoasă la limita superioară. Grosimea zonei depinde de distribuția porilor și poate varia de la 2,5 cm pentru pietriș fin la mai mult de 700 cm pentru praf.

Zona saturată este limitată la partea inferioară de un strat impermeabil, iar la partea superioară de nivelul apei, zonă în care presiunea apei este egală cu cea atmosferică. Distribuția acestor trei zone este influențată de condițiile de la suprafața terenului cum ar fi cantitatea de precipitații, irigații, evaporație și/sau transpirație.

II.10 Tipuri de acvifere

Cele mai întâlnite acvifere sunt cele alcătuite din sedimente neconsolidate sau parțial consolidate. În practică există roci impermeabile ca rocile magmatice sau cele metamorfice, dar în natură impermeabilitatea este foarte rar întâlnită.

Acviferele pot fi întâlnite în văi, câmpii sau zone montane, ele putând fi limitate ca și suprafață, sau pot ocupa zone foarte mari.

Pentru studiul apelor subterane se folosesc trei categorii de acvifere: cu nivel liber, sub presiune și acvifere dependente de condițiile de margine care pot fi: infinite, semi - infinite, tip bandă, unghiulare sau închise pe contur.

În realitate exista mai multe variații și combinații de acvifere.

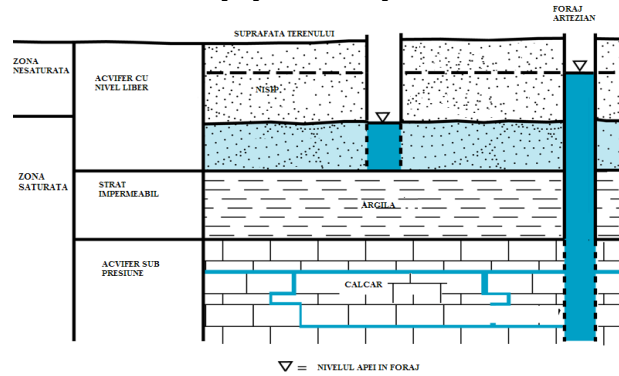


Fig.2.28 Tipuri de acvifere

Un acvifer sub presiune este un acvifer delimitat la partea superioară și inferioară de straturi impermeabile. Aceste straturi impermeabile restricționează apa și sunt reprezentate prin soluri argiloase, șisturi, roci magmatice și metamorfice. În aceste acvifere presiunea este mai mare decât cea atmosferică, astfel nivelul apei este mai sus decât al acviferului, uneori chiar și decât suprafața solului.

Acviferul cu nivel liber poate fi limitat la partea inferioară de un strat impermeabil, dar nu este restricționat de acesta. Apa în acvifer este la presiunea atmosferică și nu se ridică deasupra nivelului acviferului.

Conceptul de vulnerabilitate a apelor subterane se bazează pe presupunerea că mediul fizic poate furniza un anumit grad de protecție a apelor subterane împotriva poluării.

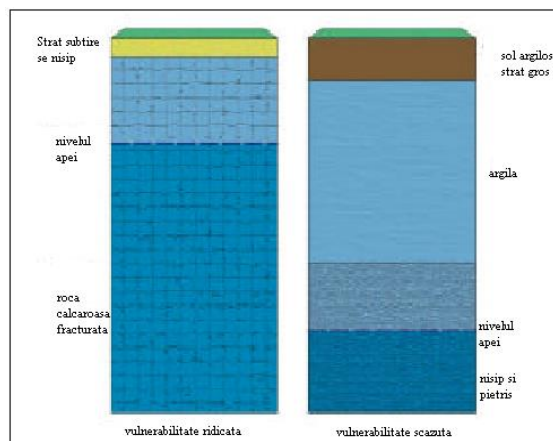


Fig 2.29 Vulnerabilitatea în acvifer

Prin urmare, unele zone sunt mai vulnerabile la contaminarea apelor subterane decât altele, vulnerabilitatea bazându-se pe caracteristicile fizice ale acviferului (Fig. 2.29), materialele geologice din care este alcătuit și caracteristicile chimice ale poluantului. Această vulnerabilitate reprezintă baza în evaluarea riscului de poluare al unei zone.

III MODELAREA MATEMATICĂ A CURGERII ȘI TRANSPORTULUI ÎN ACVIFER

„Încrederea este oferită aceluia care convinge lumea și nu celui care a avut primul idee”

Sir Francis Darwin

III.1 Ecuații fundamentale ale curgerii în mediu poros

Curgerea în medii poroase prezintă un interes deosebit atât pentru ingineri, hidrogeologi cât și pentru oamenii de știință.

III.1.1 Scurtă istorie a modelării curgerii în medii poroase(sursa www.mindrescu.com)

Interesul pentru originea apei subterane a apărut în urmă cu 4.000 ani, la egipteni, pentru care apa subterană era principala sursă de apă potabilă.

O serie de scriitori și învățați antici au lăsat numeroase însemnări cu privire la geneza și dinamica apei, după cum urmează:

Aristotel (384-322iHr.) a fost primul european care a descris ciclul hidrologic în lucrarea sa „Meteorologica”.

Palissy Bernard (1510-1589), în lucrarea “*Discursuri admirabile despre natura apelor și a fântânilor pământului*”, explică faptul “că apa de ploaie se infiltrează în sol, trece prin roci și curge până întâlnește o ieșire și se descarcă prin izvoare”.

Progrese importante în dezvoltarea acestei discipline științifice s-au înregistrat începând cu secolul al XVI-lea ca urmare a bazei teoretice realizate de unii oameni de știință din domenii colaterale precum fizică, chimie, hidraulică, hidrotehnică etc, exemplu **Simon Stevin (1548-1620)**, inginer flamand, celebru prin lucrările sale de hidrostatică și **Galileo Galilei (1564-1642)**, enunță principiul inerției și al compunerii mișcărilor, principiul vaselor comunicante etc.;

Torricelli E. (1608-1647), descoperă legile scurgerii lichidelor prin orificii, **Blaise Pascal (1623-1662)**, stabilește legile presiunii atmosferice și ale echilibrului lichidelor, fiind totodată și autorul primei prese hidraulice.

Isac Newton (1642-1727), susține mișcările ritmice ale apelor marine și lacustre prin fundamentarea legilor atracției universale.

Francezii **Perrault Pierre (1608-1680)** și **Mariotté Edmé (1620-1684)** precum și astronomul englez **Halley Edmund (1656-1742)** pun bazele hidrologiei cantitative.

Perrault Pierre a calculat, pe baza măsurării precipitațiilor timp de trei ani, cantitatea de apă căzută în bazinul hidrografic al Senei și apa scursă, remarcând că apa căzută sub formă de ploaie și de zăpadă este de șase ori mai mare ca debitul râului. Întreprinde cercetări asupra capilarității și evaporăției.

Mariotté Edmé calculează debitul Senei prin determinarea adâncimii, a lățimii și vitezei râului cu ajutorul flotorilor.

Halley Edmund studiază rata evaporării și estimează că indicele evaporării de pe Marea Mediterană este suficient pentru a alimenta râurile care se scurg în ea.

Fundamentul hidraulicii moderne este clădit de **Bernoulli Jean** și **Bernoulli Daniel** (tală și fiu) în 1738.

Secolul al XVIII-lea reprezintă perioada în care s-au pus bazele hidrodinamicii generale:

Euler L. (1750) concepe ecuația mișcării lichidelor; **Chézy (1775)** emite ecuația mișcării turbulente a apelor de suprafață care se aplică și pentru curgerea subterană, totodată, el precizează că viteza unui râu variază cu panta suprafeței lui și găsește formula care dă hidrologilor o nouă bază de estimare a curgerii apei.

Pentru europeni interesul față de apa subterană, se manifestă abia la începutul secolului XIX, când apele de suprafață sunt poluate datorită creșterii demografice și dezvoltărilor industriale.

Darcy H. (1856) descrie cu lux de amănunte dinamica apelor subterane formulând legea circulației apei prin mediul poros;

Dupuit J.(1868) aplică legea Darcy la calcularea debitelor de apă din foraje.

Studii de hidrologie au mai fost realizate de **Vasárhelly (1845)**, **Humphrey, Abbot (1861)**, **Bazin (1861)**, **Penck (1886)**, **Manning (1890)** etc.

Contribuții semnificative în domeniul apelor subterane au mai adus: **A. Hazen, Adolph Thiem (1870)**, **G. Thiem (1906)** și **F. Forchheimer (1886)**.

Secolului XX, se caracterizează prin progrese mari în domeniul științelor hidrologice. Este perioada în care se dezvoltă modelele matematice și metodele de rezolvare a problemelor de poluare. Multe persoane au contribuit în mod substanțial la acest progres, inclusiv: **Zunker (1923)**, **U. Muskat (1937)**, **J. Kozeny (1927)**, **Carmen (1937, 1956)**, **P.J. Polubarinova – Kochina (1952/62)**, **J. Bear (1972/79)**, **A. Verruijt (1970)**, **G. F. Pinder & W. G. Gray (1977)**, **De Marsily (1986)**, **K.F. Busch & L. Luckner (1972/93)**.

Pentru modelarea curgerii și transportului în acvifer au aparut programe de calcul la care și-au adus contribuția: **McDonald & Harbaugh (1988)**, **W Kinzelbach (1987, 1995)**, **H. Kobus (1992/93)**.

Programele de calcul existente pe piață au la baza aceleași formule dezvoltate în jurul anilor 1970-1980, sunt foarte costisitoare și presupun o foarte buna cunoaștere a parametrilor de intrare, înțelegerea fenomenului și cunoașterea domeniului de utilizare.

III.1.2 Legea lui Darcy

Henry Darcy a fost un inginer care la mijlocul secolului XIX a contribuit la modernizarea lucrărilor de apă din Dijon, folosind filtrele de nisip. La acel moment procesul de curgere prin mediu poros era complet necunoscut.

Darcy și-a construit un rezervor vertical pentru a investiga curgerea în mediu poros saturat. La o anumită perioadă de timp, după începerea

38 Modelarea matematică a curgerii și transportului în acvifer - III

experimentului, toți porii erau saturați cu apă și rata de intrare egală cu rata de ieșire. Presiunea apei era măsurată cu manometru umplut cu mercur.

Legea Darcy este o relație empirică, ce descrie curgerea printr-un mediu poros saturat și exprimă o relație între debitul de apă subterană, secțiunea transversală a acviferului perpendiculară pe flux, gradientul hidraulic, și conductivitatea hidraulică a acvifer.

Legea descoperită de Darcy în 1856 (fig.3.1) a servit ca punct de plecare pentru numeroase aplicații practice și este o constantă provocare pentru teoreticieni. Aceleași concluzii pot fi trase indiferent dacă debitul este vertical, orizontal, sau în orice altă direcție.

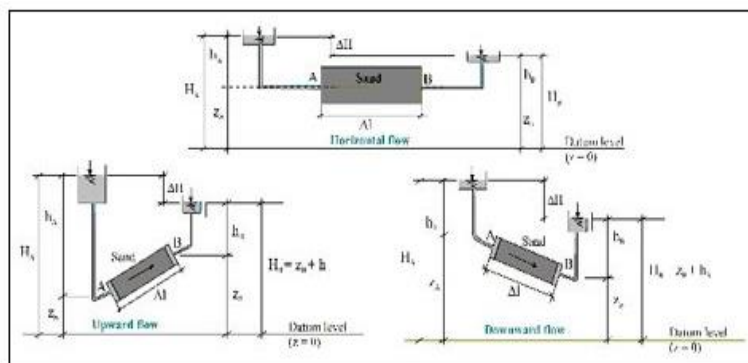


Fig.3.1 Legea lui Darcy

Sursa http://echo2.epfl.ch/VICAIRE/mod_3/chapt_5/main.htm

Relația (3.1) reprezintă legea lui Darcy pentru un mediu poros saturat și omogen

$$\vec{v} = -k_f \nabla h \quad (3.1)$$

k_f - este conductivitatea hidraulică (m/s)

v este viteza Darcy

Generalizări ale legii lui Darcy pentru mediu izotrop sunt prezentate în fig 3.2

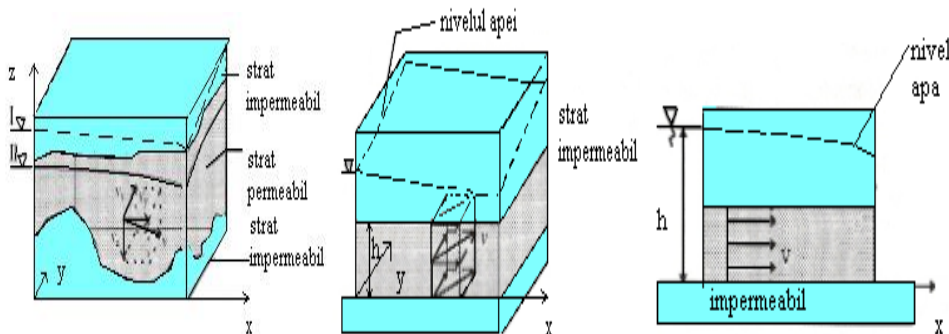


Fig. 3.2 Expresia legii lui Darcy pentru mediu izotrop, caz 3D,2D,1D

Sursa: David,1998

Pentru 3 D

$$h = h(x, y, z) \quad (3.2)$$

$$\vec{v} = -k_f \nabla h \quad (3.3)$$

$$v_x = -k_f \frac{\partial h}{\partial x} \quad (3.4)$$

$$v_y = -k_f \frac{\partial h}{\partial y} \quad (3.5)$$

$$v_z = -k_f \frac{\partial h}{\partial z} \quad (3.6)$$

Pentru 2D

$$\vec{v} = -k_f \nabla h \quad (3.7)$$

$$h = h(x, y) \quad (3.8)$$

$$v_z = 0 \quad (3.9)$$

$$v_x = -k_f \frac{\partial h}{\partial x} \quad (3.10)$$

$$v_y = -k_f \frac{\partial h}{\partial y} \quad (3.11)$$

Pentru 1D

$$\vec{v} = -k_f \nabla h \quad (3.12)$$

$$h = h(x) \quad (3.13)$$

$$v_x = v = -k_f \frac{\partial h}{\partial x} \quad (3.14)$$

Operatorul ∇ este un simbol pentru funcția gradient.

$$\vec{v} = -K \text{grad} h \quad (3.15)$$

$$\text{grad} h = \nabla h = \bar{i} \frac{dh}{dx} + \bar{j} \frac{dh}{dy} + \bar{k} \frac{dh}{dz} \quad (3.16)$$

Proprietățile gradientului

- Pentru o funcție scalară $h(x, y)$, gradientul este o funcție vectorială
- Pentru h constant, direcția gradientului este perpendiculară pe hidroizohipse
- Valoarea gradientului este egală cu derivata funcției h , în direcția gradientului

Limitele legii lui Darcy

Potrivit lui Bear (1972), cele mai multe aplicații practice au Re mic (între 1-10), forțe de inerție neglijabile și pot fi modelate cu legea lui Darcy. Pentru situații în care Re este cuprins între 10 și 100 avem regim de tranziție, cu forțe de inerție, legea lui Darcy numai este valabilă, iar pentru $Re > 100$ regimul este turbulent și se pot aplica ecuațiile Darcy-Forchheimer sau Brinkman.

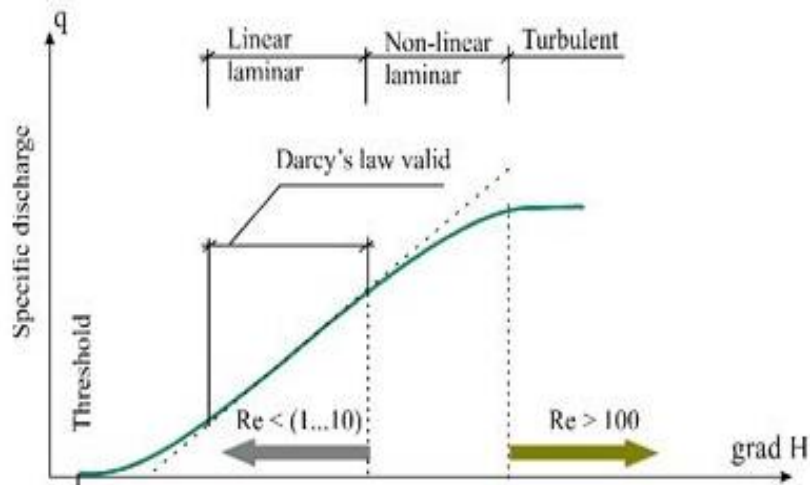


Fig.3.3 Valabilitatea legii Darcy

Sursa: http://echo2.epfl.ch/VICAIRE/mod_3/chapt_5/main.htm

Legea lui Darcy se aplică pentru:

- zone saturate sau nesaturate
- sisteme omogene sau neomogene
- sisteme izotrope sau anizotrope
- zone permeabile sau semi permeabile
- sisteme în echilibru

Dacă nivelul apei este obținut prin măsurători în situ, legea Darcy este suficientă pentru a descrie curgerea în acvifer. Datele de intrare și ieșire la nivelul REV pot fi calculate pe baza gradientilor hidraulici și în funcție de parametrii mediului poros.

III.1.3 Ecuația de continuitate

Ecuația de continuitate este o ecuație cu derivate parțiale care exprimă conservarea masei

$$\frac{\partial h}{\partial t} S_s + \nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (3.17)$$

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (3.18)$$

Pentru fluide compresibile S_s are următoarea expresie

$$S_s = \rho g n_e \left(\beta_f \beta_s + \frac{\alpha}{n_e} \right) \quad (3.19)$$

S_s coeficient de înmagazinare (pentru argilă 10^{-2})

β_f coeficient de compresibilitate pentru apă ($5 \cdot 10^{-10}$ la 10°C)

β_s coeficient de compresibilitate pentru sol ($2 \cdot 10^{-11}$)

Pentru cazul **1 D** acvifer **cu nivel liber**, mediu omogen, izotrop

$$k_f \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3.20)$$

Pentru cazul **1 D** acvifer **sub presiune**, mediu omogen, izotrop

$$T \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3.21)$$

S este coeficientul de înmagazinare

T este transmisivitatea

Pentru **2 D, sub presiune**

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (mv_x) + \frac{\partial}{\partial y} (mv_y) = 0 \quad (3.22)$$

Pentru **2 D, cu nivel liber**

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (hv_x) + \frac{\partial}{\partial y} (hv_y) = 0 \quad (3.23)$$

III.1.4 Ecuația generală a curgerii

Este formată din Legea Darcy și ecuația de continuitate. Pentru cazul **3D** are expresia (3.24).

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(k_f \frac{\partial h}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(k_f \frac{\partial h}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(k_f \frac{\partial h}{\partial z} \right) = 0 \quad (3.24)$$

Forme particulare ale ecuației curgerii pentru 2D, curgere nepermanentă, sub presiune

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(mk_f \frac{\partial h}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(mk_f \frac{\partial h}{\partial y} \right) = 0 \quad (3.25)$$

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(T_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(T_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) = 0 \quad (3.26)$$

Forme particulare pentru 2D, curgere nepermanentă, cu nivel liber

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(hk_f \frac{\partial h}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(hk_f \frac{\partial h}{\partial y} \right) = 0 \quad (3.27)$$

Forme particulare pentru 2D, curgere permanentă, sub presiune

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) = 0 \quad (3.28)$$

$$T = mk_f \quad (3.29)$$

Forme particulare pentru 2D, curgere permanentă, cu nivel liber, liniarizată

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\tilde{T} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\tilde{T} \frac{\partial h}{\partial y} \right) = 0 \quad (3.30)$$

$$\tilde{T} = k_f \tilde{h} \quad (3.31)$$

III.2 Aspecte ale transportului poluanților în mediu poros

Pentru a înțelege fenomenele de transport din acvifer, cea mai bună aplicație este procesul de poluare.

Noi vorbim de poluare atunci când unele componente depășesc limita admisă și devin periculoase în special pentru sănătatea umană.

Când un poluant ajunge în acvifer, aceasta dispersează, se poate lipi sau adsorbi, pe particulele de sol. Un parametru numit dispersivitate este utilizat pentru a caracteriza dispersia poluanților, efectul net al dispersia este diluarea concentrației de poluant. Un alt parametru, numit factor de întârziere, este folosit pentru a descrie tendința poluantului de a fi adsorbi de rocă. Factorul de retard are ca efect încetinirea ratei de transport.

Densitatea, vâscozitatea, solubilitatea, stabilitatea chimică sunt caracteristici care influențează dispersia unui poluant în acvifer.

Acești poluanți pot fi inofensivi sau foarte toxici, reprezentați prin substanțe miscibile sau nemiscibile cu apa.

În cadrul tezei analiza se va rezuma doar la poluanții miscibil care implică transferul unui solvat de masă M ce se mișcă cu un solvent. (în cele mai multe cazuri este apa). Parametrul principal al transferului este concentrația C definită ca masa de soluției S dizolvată într-o unitatea de volum. Potrivit definiției avem:

$$C = M/V \quad (3.32)$$

Substanțele nemiscibile, nu se amestecă cu apa și se propagă ca o fază separată. Sunt întâlnite sub notația NAPL (Non Aqueous Phase Liquids) (fig. 3.4)

La rândul lui NAPL este de doua feluri: LNAPL, când densitatea este mai mică decât a apei și DNAPL, când densitatea este mai mare decât a apei.

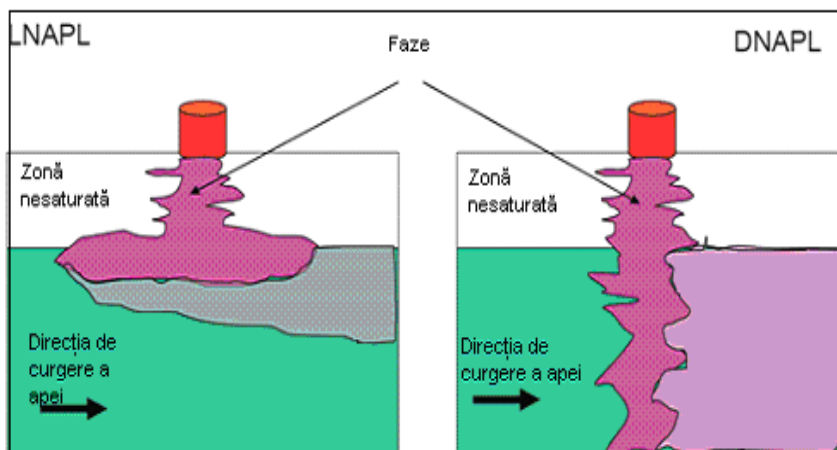


Fig. 3.4 Poluanți nemiscibili din acvifer

Sursa: Transport im Grundwasser, Wolfgang Kinzelbach, Fritz Stauffer, Grundwasser 1

Acest aspect este foarte important în industria petrolieră. Mecanismul de transport al substanțelor nemiscibile (problemele de transport la multifazic) nu este pe deplin cunoscut, fiind în cercetare.

Soluțiile care rămân stabile în apă, și nu sunt afectate de procesele fizice, biologice sau chimice, se numesc soluții conservatoare. Un exemplu în acest sens este fluoresceina, utilizată pe scară largă în testele de migrație din acvifer. Cu ajutorul ei se pot determina : direcția, viteza de curgere și dispersia în acvifer.

Dacă la curgere, în urma derivării ecuației, intrările și ieșirile din cele 6 fețe ale volumului sunt egale cu variația masei și însoțite doar de convecție, în cazul transportului principiul este asemănător, dar sunt implicate și alte procese descrise amănunțit de Marsily (1986) sau Bear (1972)

În S.I, concentrația se măsoară în kg/m^3 , dar cele mai folosite unități de măsură pentru concentrație sunt mg / l și, uneori, g / l .

III.2.1 Mecanisme de transport a fazei miscibile

Mecanisme de transport a fazei miscibile pot fi rezumate la advecție, difuziune, adsorbție și degradare.

Tabelul 5

Principalele procese din acvifer		
Procesele de transport din acvifer		
Mecanismul de transport		Cauză și efect
Advecție/Convecție	Conservative	Viteza de curgere în acvifer
Difuzie/Dispersie		Dispersia mecanică și moleculară
Adsorbție/Desorbție	Neconservatoare	Acțiunea forțelor Van der Waals asupra matricei solide
Degradare		Transformări chimice și/sau biologice

Pentru o sursă de poluare întâlnim unul sau mai multe procese ce însoțesc transportul poluantului.(fig.3.5)

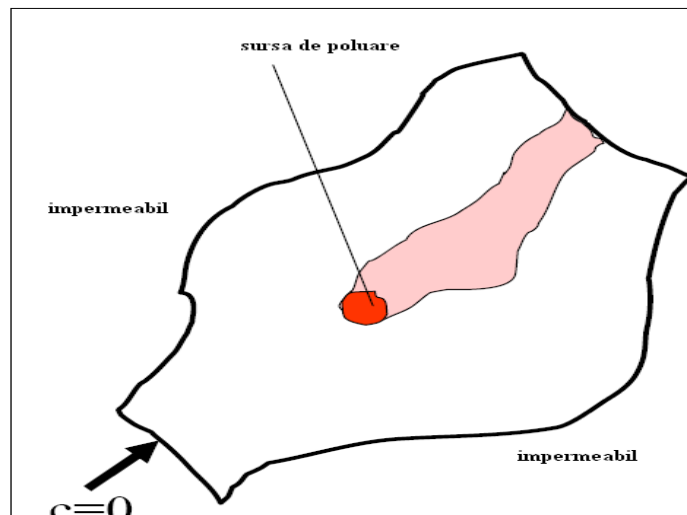


Fig.3.5 Exemplu de poluare în acvifer

Sursa: Transport im Grundwasser, Wolfgang Kinzelbach, Fritz Stauffer, Grundwasser 1

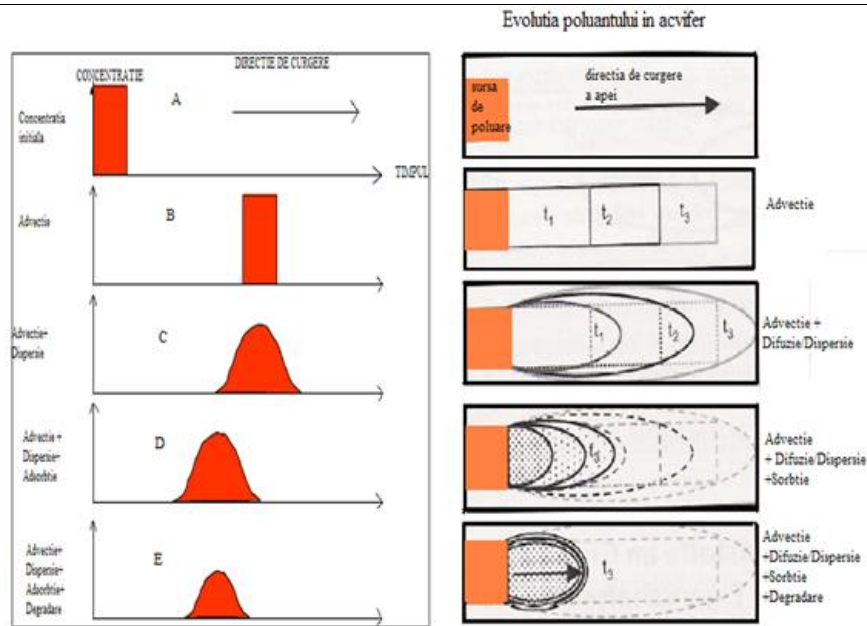


Fig.3.6. Descrierea schematica a principalelor procese implicate în transportul de poluanți

În cazul A avem concentrația în poziție inițială.

În cazul B, forma graficului se menține constantă, este cel mai important proces.

În cazul C apare o alungire a graficului datorată efectului dispersiv.

În cazul D se observă o întârziere a concentrației, datorată procesului de adsorbție.

În cazul E se observă o scădere a concentrației de poluant datorată degradării.

Advecția

Dintre cele patru mecanisme care alcătuiesc transportul, convecția (advecția) este cel mai important. (fig. 3.7)

Convecția reprezintă antrenarea particulelor în soluție, prin mișcare fluidului care se deplasează cu o viteză medie. Advecția depinde exclusiv de viteza de curgere și nu variază în funcție de concentrația de poluant injectată.

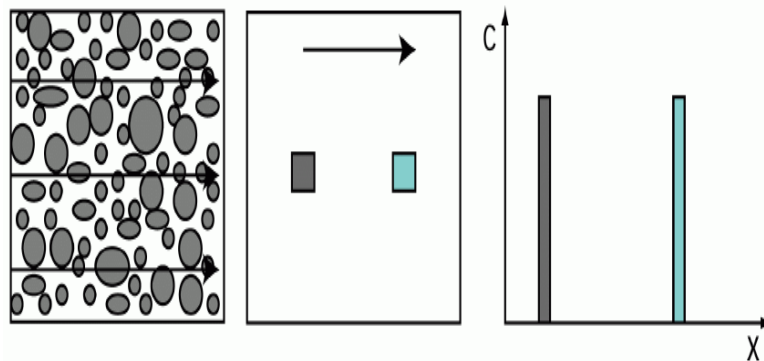


Fig. 3.7 Advecția

Ecuția de transport corespunzătoare convecției are următoarea expresie:

$$\vec{q}_K = n_e \vec{c} v_a \quad (3.33)$$

$$\vec{v} = n_e \vec{v}_a \tag{3.34}$$

v_a este viteza de filtrație

n_e este porozitatea efectivă

c concentrația (mg/l)

Debitul masic datorat advecției, printr-o suprafață A este dat de integrala:

$$Q_k = \int_A \vec{n} q_k dA \tag{3.35}$$

Unde \vec{n} este normala exterioară pentru orice punct din suprafața A

Difuzia este un fenomen legat de agitația moleculară (mişcarea Browniana).

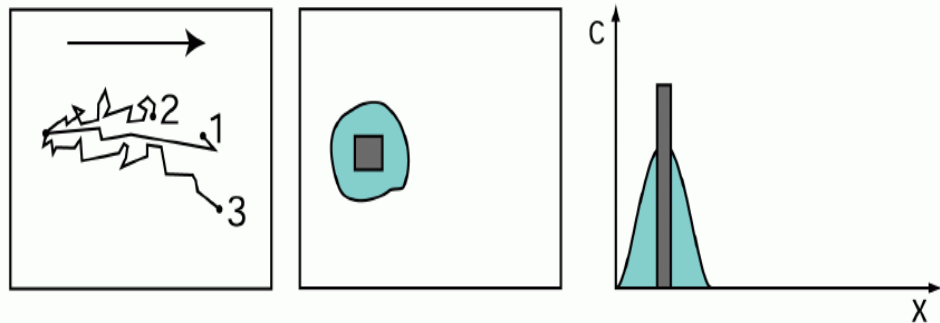


Fig.3.8 Difuzia

Este descris de legea lui Fick, care arată ca fluxul masic al particulelor unui fluid în repaus este proporțional cu gradientul de concentrație. Ecuația de transport corespunzătoare difuziei moleculare este:

$$\text{div}(D_m \text{grad}C) = \frac{\partial C}{\partial t} \tag{3.36}$$

$$\vec{q}_{Df} = -n_e D_m \nabla C \tag{3.37}$$

\vec{q}_{Df} este debitul masic pe unitatea de suprafață

D_m este coeficientul de difuzie

∇C este gradientul concentrației

Difuzia moleculara are loc în tot mediul poros.

Difuzia moleculara este puternic influențată de temperatură, astfel la 25⁰ C, în apă, are valori cuprinse între 1*10⁻⁹ m²/s și 2*10⁻⁹ m²/s, scăzând la jumătate pentru o temperatură de 5⁰ C.

În cazul sistemelor cu variație în timp a concentrației, se aplică legea a 2-a a lui Fick, care pentru cazul 1 D este (Fetter,1993)

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_m \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \tag{3.38}$$

Prezența matricei solide încetinește mișcarea brauniană a particulelor, de aceea difuzia moleculara efectivă D_e este mai mică decât D_m .

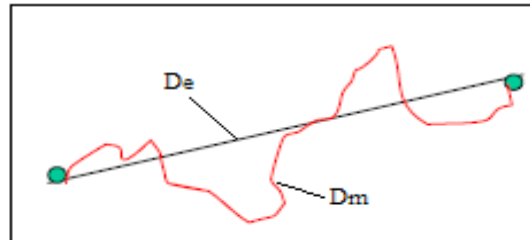


Fig.3.9 Tortuozitatea

Raportul dintre D_e și D_m se numește tortuozitate.

$$\frac{D_e}{D_m} = \frac{1}{Fn} \quad (3.29)$$

F reprezintă raportul dintre rezistivitatea rocii și rezistivitatea apei conținute.

n este porozitatea totală

Coefficientul de dispersie D are următoarea expresie:

$$D = D_m + D^* \quad (3.30)$$

D^* este coeficientul de dispersie mecanică (m²/zi)

D_m coeficientul molecular de difuzie (m²/s)

Asemănări și deosebiri între dispersia mecanică și difuzia moleculară pot fi rezumate la faptul că:

- difuzia poate avea loc chiar dacă nu este viteză, dar dispersia are loc doar în prezența vitezei,
- dispersia descrie efectul variațiilor vitezei și dacă acestea sunt cunoscute există numai advecție - difuzie
- difuzia este izotropă, dispersia anizotropă.

Dispersia mecanică reprezintă fenomenul de amestec prin care are loc diluția soluției, adică reducerea concentrației de poluant.

$$\vec{q}_{DSP} = -n_e \overline{\overline{D_{DS}}} \nabla C \quad (3.31)$$

unde $\overline{\overline{D_{DS}}}$ este tensorul dispersiei care pentru cazul 3 D are următoarea expresie:

$$\overline{\overline{D_{DS}}} = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{bmatrix} \quad (3.32)$$

$$D_{xx} = \alpha_L \frac{v_{ax}^2}{v_a} + \alpha_T \frac{v_{ay}^2 + v_{az}^2}{v_a} \quad (3.33)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_{ax} v_{ay}}{v_a} \quad (3.34)$$

$$D_{xz} = D_{zx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_{ax} v_{az}}{v_a} \quad (3.35)$$

$$D_{yy} = \alpha_L \frac{v_{ay}^2}{v_a} + \alpha_T \frac{v_{ax}^2 + v_{az}^2}{v_a} \tag{3.36}$$

$$D_{yz} = D_{zy} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_{ay}v_{az}}{v_a} \tag{3.37}$$

$$D_{zz} = \alpha_L \frac{v_{az}^2}{v_a} + \alpha_T \frac{v_{ax}^2 + v_{ay}^2}{v_a} \tag{3.38}$$

Unde α_L și α_T reprezintă dispersivitatea longitudinală și transversală care pentru cazul 1D curgere și 3D dispersie are următoarea expresie:

$$\overline{\overline{D_{DS}}} = \begin{bmatrix} D_L & 0 & 0 \\ 0 & D_T & 0 \\ 0 & 0 & D_T \end{bmatrix} \tag{3.39}$$

unde $D_L = \alpha_L v_a$ și $D_T = \alpha_T v_a$ unde D_L și D_T sunt coeficienți de dispersie

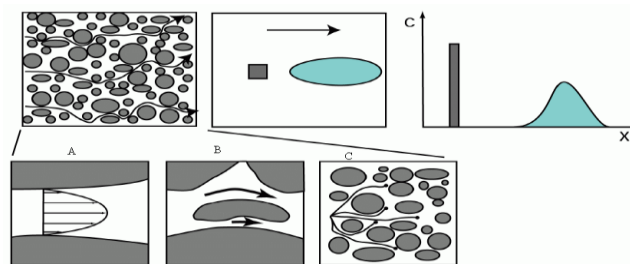


Fig 3.10 Dispersia mecanică

Dispersia se datorează neomogenităților din mediul poros.

Trei mecanisme (Bear, 1979, Fetter, 1991) pot fi considerat atunci când explicăm dispersia mecanică, dar toate țin cont de geometria porilor (Fig.3.10):

- mecanismul datorat vâscozității - viteza prezintă variații în secțiunea porilor; prin urmare, particulele se mișcă mai repede de-a lungul axei decât de-a lungul pereților porilor; (Fig.3.10 b)
- mecanisme datorate diferențelor din secțiunea transversală a porilor vor determina viteze medii diferite; astfel particulele se vor mișca mai repede în unii porii decât în alții. (Fig.3.10.a)
- al treilea mecanism este datorat turtuozității, ceea ce face ca unele particule să se deplaseze pe o cale mai scurtă decât altele. (Fig.3.10.c)

Aceste neomogenități produc variații ale vitezei în direcții longitudinale și transversale, cu efect asupra răspândirii poluantului.

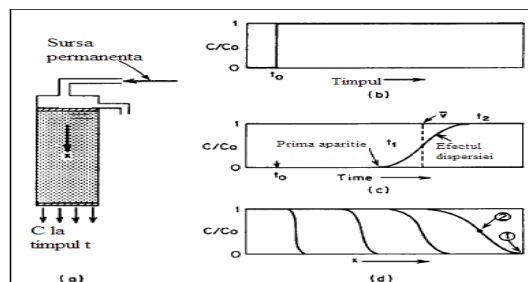


Fig. 3.11 Efectul dispersiei

Sursa: Koch 1989

Fig. 3.11 prezintă efectul dispersiei longitudinale, la trecerea unui poluant de concentrație C_0 , printr-o coluană de nisip, care reprezintă mediul poros.

În figura 3.11 a este o coloană care are la partea superioară o sursă permanentă de poluant.

În figura 3.11 b este reprezentată concentrația la momentul inițial.

În figura 3.11 c este reprezentat efectul dispersiei mecanice și al difuziei moleculare.

În figura 3.11 d este reprezentat profilul concentrației la diferiți timpi.

În mediul poros, efectul dispersiei mecanice este mai important decât efectul difuziei moleculare.

Dispersie hidrodinamică ([sursa http://echo2.epfl.ch/VICAIRE/mod_3/chapt_7/main.htm](http://echo2.epfl.ch/VICAIRE/mod_3/chapt_7/main.htm))

Deoarece atât difuzia cât și dispersia mecanică sunt generate de variația concentrației, și țin seama de liniaritatea lor, obținem următoarea relație, care este o combinație între cele două:

$$\overline{f_{Dh}} = -n_e \cdot \overline{D_h} \cdot \overline{\text{grad}C} \quad (3.36)$$

În care D_h reprezintă coeficientul de dispersie hidrodinamică

Relația între dispersie și difuzie este reprezentată prin numărul lui Peclet

$$P_e = \frac{vd}{D_d} \quad (3.37)$$

$$P_e = \frac{vL}{D_L} \quad (3.38)$$

D_L este dispersia longitudinală

D_d este coeficientul de difuzie

Legătura dintre cele două procese poate fi observată în fig.3.12

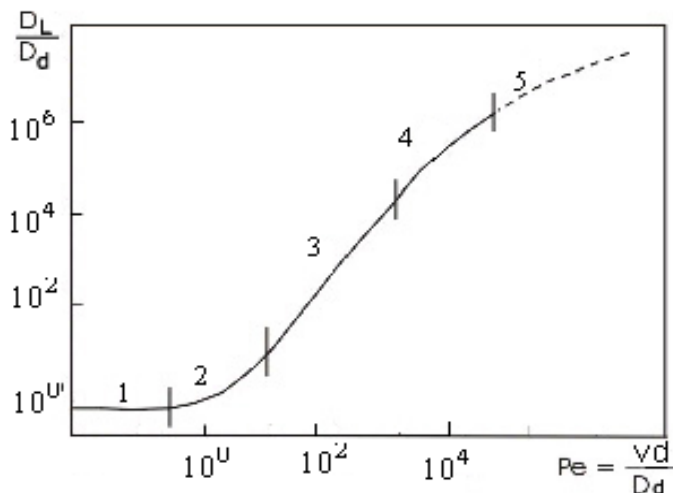


Fig. 3.12 Relația empirică dintre difuzie și dispersie

Sursa: http://echo2.epfl.ch/VICAIRE/mod_3/chapt_7/main.htm

O valoare mare a numărului Peclet indică faptul că procesul este dominat de convecție, în timp ce valorile mai mici denotă un proces de difuzie.

Așa cum se observă în fig 3.12 graficul este împărțit în 5 zone:

- zona 1 în care D_L/D_d este constant deoarece procesul este independent de viteza liniară, în această zonă poluantul se răspândește în principal datorită difuziei.

- Zona 2, în care difuzia și dispersia mecanică au aceeași magnitudine în procesul de amestecare

- Zona 3 în care procesul dominat este dispersia mecanică, cu relația empirică

$$\frac{D_L}{D_d} = \frac{1}{2} Pe^{1/2} \quad (3.39)$$

- Zona 4 în care difuzia este neglijabilă și o relație liniară între dispersie și numărul Peclet a fost găsit. În această zonă legea Darcy este încă valabilă.

- Zona 5 care este în principal dispersivă, dar în afara intervalului de valabilitate a legii lui Darcy

Adsorbția și desorbția

Procesul prin care un poluant este preluat și inclus în matricea solidă se numește sorbție. În general, procesele de sorbție includ adsorbția și absorbția. Procesul cel mai frecvent este adsorbția constând în extragerea de ioni și molecule din soluție, precum și fixarea lor pe suprafața matricei solide. Procesul de absorbție constă în difuzarea de soluție în interiorul matricei solide

Fenomenul de adsorbție manifestă un important efect asupra curgerii și transportului din acvifer.

Procesul fizico-chimic de adsorbție se numește și adsorbție izotermă și este o funcție între concentrația adsorbită la suprafața solidului, c_a , și c , concentrația adsorbită din soluția lichidă.

$$c_a = f(c) \quad (3.40)$$

Degradarea este fenomenul care implică procese chimice, biologice și radioactive, fiind un proces ireversibil, însoțit de alterarea și descompunerea soluției.

Are următoarea expresie:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -K(c - c_0) \quad (3.41)$$

III. 3 Ecuația generală a transportului

Pentru analiza poluării în apelor subterane, hidrogeologii au nevoie de un instrument capabil să cuantifice toate mecanismele de transport și să facă predicții. Acest instrument este ecuația de transport. Prin rezolvarea acestei ecuații, la limitele impuse, este posibil să se prevadă transportul poluantului și măsurile necesare pentru a depolua zona afectată.

Ecuația generală a transportului pentru un poluant miscibil cu apa este:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \text{div} (D_h \overline{\text{grad} C} - C_v) \quad (3.42)$$

v este viteza liniară

C concentrația

t timpul în care variază concentrația

Forme particulare:

Pentru un domeniu semi - infinit ($0 \leq x \leq \infty$), curgere 1D, transport 1 D (fig. 3.13) avem ecuația generală a transportului de forma (3.43)

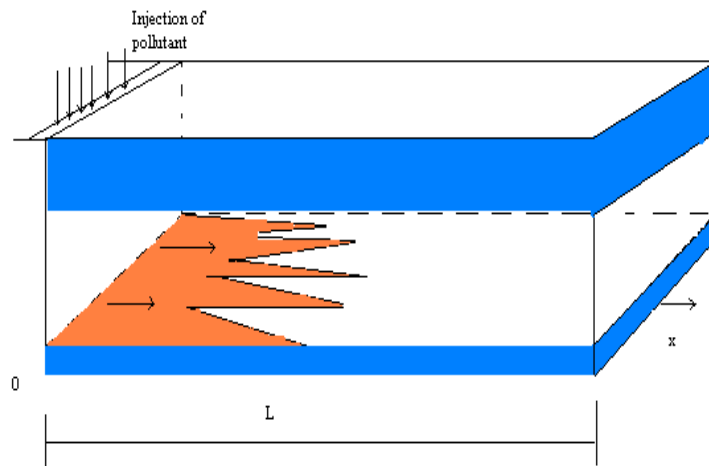


Fig.3.13 Reprezentare curgere 1D, transport 1D

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{\partial c}{\partial x} v_a = \frac{\partial c}{\partial t} \quad (3.43)$$

Pentru un domeniu semi - infinit ($0 \leq x \leq \infty$), curgere 1D, transport 2 D avem ecuația generală a transportului de forma

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D_L \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_T \frac{\partial c}{\partial x} \right) - \frac{\partial c}{\partial x} v_a = \frac{\partial c}{\partial t} \quad (3.44)$$

Pentru un domeniu semi - infinit ($0 \leq x \leq \infty$), curgere 2D, transport 2 D avem ecuația generală a transportului de forma

$$\frac{\partial c}{\partial t} + [\vec{v}_a \nabla c - \nabla(\bar{D} \nabla c)] = 0 \quad (3.45)$$

$$\bar{D} = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{bmatrix} \quad (3.46)$$

Pentru cazul 2D forma scalară are următoarea expresie

$$\frac{\partial c}{\partial t} + [v_{ax} \frac{\partial c}{\partial x} + v_{ay} \frac{\partial c}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{xy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right)] = 0 \quad (3.47)$$

În fig 3.14 avem un exemplu de poluare cu LNAPL (un poluant cu densitate mai ușoară decât apa, ex ulei). Exemplu reprezintă o secțiune în subteran cu cele două zone: saturată și nesaturată ce conțin apă, aer, sol, LNAPL. Mediul este neomogen, eterogenitatea foarte variată.

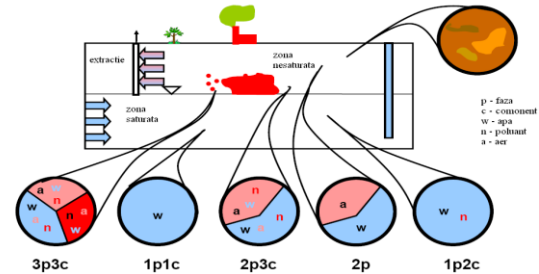


Fig. 3.14 Exemplu de poluare în mediu eterogen

Sursa: Niessner 2007

Exemplu este complex deoarece implică un număr de faze (p) și componente (c), arătând cum variază în zona saturată și nesaturată aceste faze și componente, în imediata vecinătate a zonei poluate sau pe măsură ce ne îndepărtăm de această zonă.

În imediata vecinătate a zonei contaminate avem un proces alcătuit din trei faze și trei componente (3p3c).

Sunt prezente și procese de transfer de masă care au loc între faze. Aceste procese de transfer includ dizolvarea de LNAPL în apă, evaporarea LNAPL, precum și dizolvarea de aer în apă și LNAPL. Pe măsură ce ne îndepărtăm de zona contaminată scade numărul de faze la două în zona nesaturată și la o fază în zona saturată.

Utilizarea modelelor în studiul apelor subterane este o practică foarte des întâlnită în domeniul ingineriei mediului. La început modelele au fost folosite pentru a investiga o varietate largă de condiții hidrogeologice. În prezent modelele sunt folosite pentru a descrie mișcarea și transportul poluanților în acvifer, pentru evaluarea riscurilor posibile în cazul unei poluări, pentru a înțelege procesele ce se petrec în zona nesaturată aflată sub influența debitului de apă, pentru înțelegerea relației râu - acvifer, etc.

De exemplu, pentru alimentarea cu apă subterană a unui oraș, se utilizează modelarea zonei în scopul amplasării puțurilor de extracție. Într-un alt caz, cel al poluării produse de infiltrațiile de la o groapă de gunoi, se utilizează modelarea pentru a determina contaminarea zonei.

IV. METODEDE ȘI SOLUȚII PENTRU REZOLVAREA ECUAȚIILOR CURGERII ȘI TRANSPORTULUI DIN ACVIFER

" Natura ne-a întins un deget și noi vrem să-i legăm mâinile".

Vasile Ghica

Utilizarea modelelor în studiul apelor subterane este o practică foarte des întâlnită în domeniul ingineriei mediului. La început modelele au fost folosite pentru a investiga o varietate largă de condiții hidrogeologice. În prezent modelele sunt folosite pentru a descrie mișcarea și transportul poluanților în acvifer, pentru evaluarea riscurilor posibile în cazul unei poluări, pentru a înțelege procesele ce se petrec în zona nesaturată aflată sub influența debitului de apă, pentru înțelegerea relației râu - acvifer, etc.

De exemplu, pentru alimentarea cu apă subterană a unui oraș, se utilizează modelarea zonei în scopul amplasării puțurilor de extracție. Într-un alt caz, cel al poluării produse de infiltrațiile de la o groapă de gunoi, se utilizează modelarea pentru a determina contaminarea zonei.

IV.1 Introducere în modelarea matematică

Procesele de curgere și transport din mediu poros sunt foarte complexe și modelarea matematică trebuie să țină seama de neomogenitatea mediului real.

Modelele matematice sunt descrieri conceptuale sau aproximări care descriu sistemele reale cu ajutorul ecuațiilor.

Aplicabilitatea sau utilitatea unui model depinde de înțelegerea profundă a sistemului real și de ipotezele încorporate în derivarea ecuațiilor matematice.

Anumiți parametri (conductivitatea hidraulică) pot fi considerați constanți în acvifer și atunci mediul este omogen sau variază în spațiu și în acest caz mediul este eterogen.

Modele folosite pentru studiul mediilor poroase descriu mișcarea și transportul utilizând ecuații matematice bazate pe anumite ipoteze simplificatoare. Aceste ipoteze se referă la direcția de curgere, geometria acviferului, eterogenitatea sau anizotropia din acvifer, tipul de poluare etc.

Un model trebuie să fie privit ca o apropiere ci nu ca o suprapunere exactă a condițiilor din teren.

Scopul principal al modelării în acvifer este de a rezolva o varietate de probleme.

Cele mai multe studii de modelare a apelor subterane sunt efectuate folosind fie modele deterministe, bazate pe descrierea exactă cauză - efect, fie modele stohastice ce reflectă natura probabilistică a unui sistem real.

Se mai folosesc și modele de tip cutie oarbă, bazate pe crearea unor relații între elementele de intrare și cele de ieșire, fără a cunoaște mecanismul intern.

Abordarea deterministă prezintă următoarele dezavantaje: (Sursa Metode de modelare matematică în hidrodinamica subterană, A. Popescu, I. Popescu)

- Ecuațiile ce caracterizează fenomenul de transport al poluanților sunt dificile de rezolvat

- Scara de modelare (în cazul în care modelul se validează cu experiențe de laborator) este foarte importantă, pentru că este aproape imposibil a se garanta că experiențele de laborator se repetă la aceeași scară în natură,

- Este foarte dificil să cunoști toți parametrii care intră în ecuație,
 - Rezolvarea numerică a unui model determinist poate duce la aproximări prea mari,
 - Dacă scrierea deterministă este foarte detaliată, ea nu poate fi generalizată pentru a fi folosită și la alte cazuri.

Modelare deterministă este foarte bună în cazul în care se pune problema cuantificării unor fenomene ale sistemului studiat și de aceea ea reprezintă un instrument de cercetare util pentru studiul curgerii în subteran.

Abordarea de tip cutie oarbă (Sursa Metode de modelare matematică în hidrodinamica subterană, A. Popescu, I. Popescu)

Abordarea de tip cutie oarbă folosește așa numita tehnică bazată pe rețele neuronale, care utilizează un set de date de intrare - ieșire observate și determină relația de legătură între ele,

relație pe care o aplică ulterior pentru modelul luat în calcul.

Modelarea este redusă de fapt, la cea mai simplă relație posibilă, neexistând relații fenomenologice, geometrie sau condiții la limită de îndeplinit. După calibrarea modelului, acesta poate fi folosit pentru prelucrarea unui alt set de date de intrare a sistemului utilizat. Acest tip de modelare nu este folosită pentru curgerea apei în medii subterane, datorită numărului mare de parametrii experimentali necesari la calibrarea modelului.

Abordarea stohastică (Sursa Metode de modelare matematică în hidrodinamica subterană, A. Popescu, I. Popescu)

Proprietățile acviferelor prezintă mari fluctuații în timp și spațiu, de aceea și parametrii care trebuie studiați pentru descrierea fenomenelor de transport a poluanților prezintă aceste fluctuații. Acești parametri se obțin după nenumărate măsurători în situ, dar rămâne întotdeauna problema cât de reprezentativi sunt aceștia. Pentru a elimina aceste neajunsuri se fac calcule statistice pentru determinarea mediei, distribuției și variației parametrilor studiați. Această metodă a fost descrisă pe larg în literatura de specialitate de către Warrick și Vauclin în 1983.

Fenomenele de transport și de transfer de poluanți sunt considerate posibil a fi cuantificate prin modele stohastice. Proprietățile hidrodinamice sunt reprezentate de funcții aleatoare, soluția problemei studiate fiind reprezentată sub forma noțiunii de probabilitate sau de risc potențial. De exemplu în cazul legii lui Darcy, conductivitatea hidraulică a mediului natural poate fi considerată ca un proces stohastic. Din această ecuație va rezulta viteza de curgere prin pori, deci la rândul ei este un proces stohastic. Rezolvarea ecuațiilor cu derivate parțiale trebuie să furnizeze distribuția spațio-temporală și concentrația poluantului pentru toate valorile posibile ale conductivității hidraulice.

O altă metodă de modelare stohastică este cea a funcțiilor de transfer, care au rolul de a stabili o relație stohastică între un semnal de intrare și ceea ce rezultă la ieșirea din sistem.

Fiecare model, indiferent dacă este un model simplu sau complex, are aplicabilitate și utilitate în cadrul investigațiilor hidrogeologice și de remediere, în ciuda simplificărilor introduse. Cu toate acestea, selecția și utilizarea adecvată a unui model trebuie să se bazeze pe o temeinică înțelegere a proceselor de curgere și transport ce au loc în domeniul studiat, acest lucru necesitând o caracterizare corectă a domeniului. Fără o buna caracterizarea a domeniului, nu este posibil obținerea unui model fiabil.

În modelarea matematică exista două tipuri de probleme:

- Probleme directe, atunci când parametrii modelului, condițiile inițiale și de margine sunt cunoscute, astfel pot fi obținute scenarii diferite

- Problema inversă, atunci când parametrii modelului nu sunt cunoscuți și trebuie să fie estimați pe baza observațiilor și măsurătorilor. Datorită faptului că parametrii modelului au un sens fizic, prima aproximare se bazează pe măsurătorile din teren.

Totuși, utilizând aceste date cu ecuațiile fundamentale (aceleași ca și în problema directă) obținem diferențe importante între valorile calculate și cele măsurate. Ca urmare, este necesar un proces de calibrare.

Folosind variabilele înregistrate precum și ecuațiile fundamentale, prin optimizare matematică sau prin încercări repetate și calculul erorii obținem o estimare a parametrilor modelului.

Modelele cele mai utilizate în studiul proceselor din acvifer sunt modele matematice deterministe, care se bazează pe principiul cauzalității, presupunând un raport unic de cauză - efect.

Mediul poros este foarte complex și prezintă o variabilitate puternică.

Chiar dacă este dificilă, o abordare stohastică este necesară uneori pentru evaluarea incertitudinilor legate de modelarea matematică.

Modele stohastice pornesc de la ipoteza că datele de intrare (porozitatea, conductivitatea hidraulică, etc) sau condițiile inițiale și de margine (fluctuațiile nivelului apei) sunt caracterizate de variabilitate stohastice (Ganoulis și Morel-Seytoux, 1985).

Conductivitatea hidraulică sau transmisivitatea sunt distribuite logaritmice.

Incertitudinile cu privire la proprietățile mediului poros și la condițiile inițiale și de margine rămân indiferent de corelațiile dintre date. Abordarea stohastică poate oferi îmbunătățiri semnificative în caracterizarea mediului poros, dar majoritatea modelelor matematice se bazează pe o abordare deterministă.

IV.2 Tipuri de modele în medii poroase

În funcție de obiectivele urmărite, modelarea în acvifer poate descrie curgerea, transportul de poluanți, transferul de căldură sau fenomene de deformare.

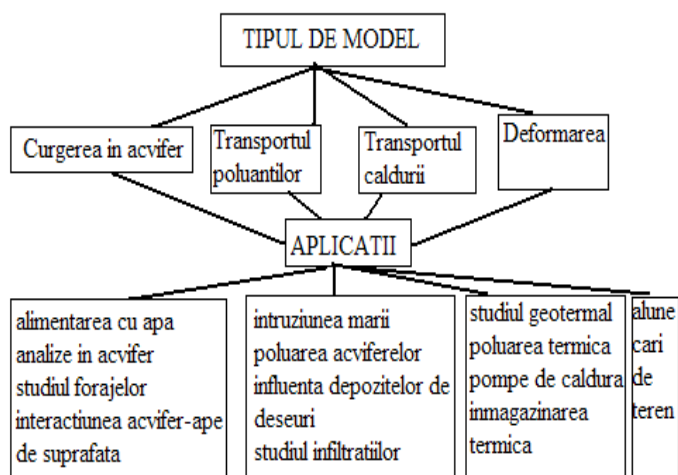


Fig.4.1 Tipuri de modele din acvifer și aplicațiile lor

Așa cum pentru curgere și transport de poluanți avem ecuații caracteristice și în cazul studiului transferului de căldură vom avea o ecuație care descrie transportul căldurii.

Dintre tipurile de modele prezentate în fig.4.1, vom face referire la primele doua, curgerea și transportul poluanților.

IV.3 Etape folosite în pregătirea și executarea unui model

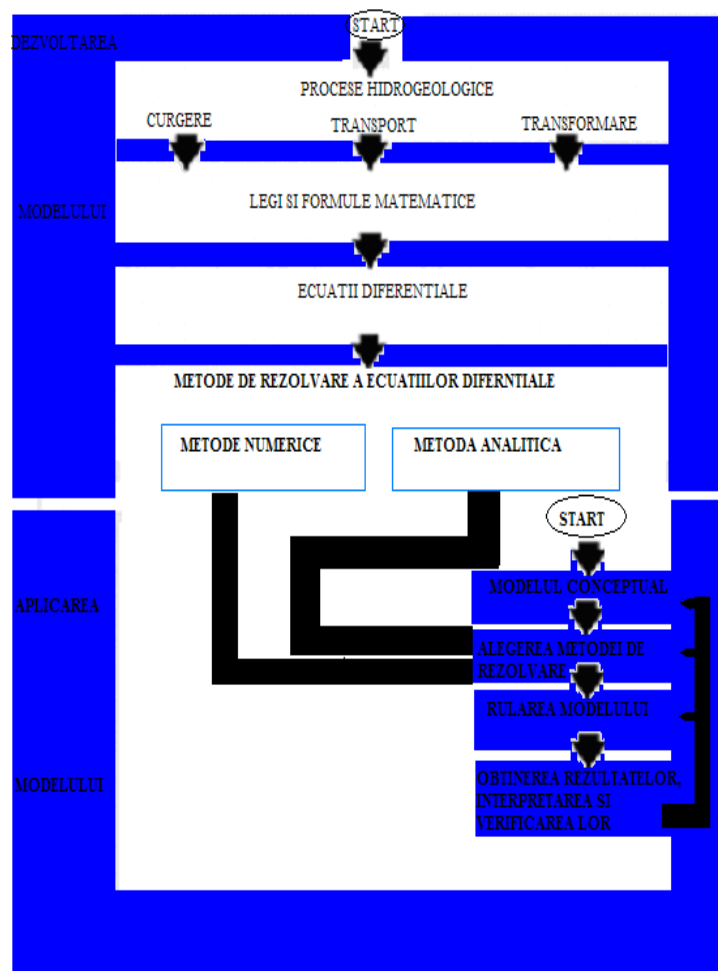


Fig.4.3 Etapele de pregătire și executare unui model matematic

Sursa: Kumar Introduction in gw monitoring

Cei mai importanți pași folosiți în pregătirea și executarea unui model sunt cuprinși în două etape distincte (fig. 4.3)

- O primă etapă care dezvoltă modelul și îl prelucrează cu un soft
- A doua etapă constă în calibrarea și aplicarea acestui model cu un scop precis

Înainte de parcurgerea acestor etape obiectivele și scopul modelului trebuie să fie definite clar și explicit.

IV.3.1 Dezvoltarea modelului cuprinde următorii pași:

- a) colectarea datelor și pregătirea modelului
- b) realizarea modelului conceptual
- c) modelul matematic
- d) alegerea metodei de rezolvare
- e) configurarea modelului

IV.3.2 Aplicarea modelului cuprinde:

- f) Calibrarea modelului
- g) Validarea modelului
- h) Efectuarea predicțiilor

IV.3.1 Dezvoltarea modelului

a) Colectarea datelor și pregătirea modelului

Pentru a rezolva numeric curgerea și transportul în acvifer sunt necesare următoarele date:

- O hartă generală a zonei care să conțină toate informațiile necesare modelării. Această hartă trebuie să conțină date despre așezarea geografică a zonei, utilizarea terenurilor, poziționarea puțurilor și caracterizări hidrologice. Hartă generală poate fi folosită ca hartă de bază pe care putem suprapune alte date.
- O hartă topografică utilizată pentru a defini împreună cu datele hidrogeologice acviferul.
 - Hărți geologice și hidrogeologice, cu secțiuni transversale care indică geometria acviferului, litologia și grosimea straturilor, adâncimea apei precum și caracteristicile forajelor .
 - Caracteristicile acviferului cum ar fi: conductivitatea hidraulică sau transmisivitatea, anizotropia, porozitatea efectivă, dispersivitatea.
 - Caracterizarea hidrogeologică corectă a domeniului studiat este necesară pentru a înțelege importanța și relevanța curgerii și transportului în acvifer.
 - Caracterizarea domeniului din punct de vedere a ratelor de pompare sau de reîncărcare naturală.
 - Este necesară o inventariere a râurilor, lacurilor sau canalelor din zonă, care ajută la stabilirea condițiilor inițiale și de margine.
 - Este necesară cunoașterea nivelului apei din puțurile de observație
 - Sunt necesare date despre compoziția chimică a apei, despre sursele de poluare și poluanții din zonă,

b) *Realizarea modelului conceptual* este procesul în care datele din teren sunt asamblate într-un mod sistematic, păstrând toate caracteristicile relevante ale domeniului, pentru a descrie curgerea și transportul în acvifer.

În această etapă se stabilesc și ipotezele simplificatoare. De fapt, modelul conceptual reprezintă descompunere unui sistem real în subsisteme interconectate. Datele obținute reprezintă date de intrare în alt subsistem.

Realizarea unui model conceptual adecvat este cheia succesului în procesul de modelare.

În timpul fazei de realizare, pe baza informațiilor existente, trebuie luate deciziile importante (Spitz și Moreno, 1996):

1.b.) referitoare la mărimea domeniului modelat

Această alegere depinde foarte mult de scopul modelării matematice. Dacă scopul este evaluarea resurselor de apă subterană, cel mai bine este să luăm în considerare întregul acvifer.

Dacă se dorește evaluarea influenței unei canal, rezervor, etc. în scopul de a prescrie măsuri tehnice de control a variației nivelului apei, numai anumite zone din acvifer pot fi examinate. În același timp, pentru probleme de transport, după realizarea unui model de curgere, trebuie construit un model de transport.

2.b.) decizii referitoare la extinderea pe verticală a domeniului cu examinarea zonei saturate și / sau nesaturate.

Pentru zona saturată, în funcție de calitatea apei doar acviferele medii și cele de adâncime sunt de interes. În alte cazuri, întregul complex acvifer trebuie studiat, delimitarea domeniului fiind făcută de un strat impermeabil format din argilă. În această situație trebuie să avem în vedere ce acvifer vom modela, cu nivel liber sau sub presiune.

3.b.) alegerea numărului de dimensiuni (fig. 4.4)

În faza de realizare a unui model, o decizie importantă este alegerea numărului de dimensiuni de modelare. (1D, 2D sau 3D) .

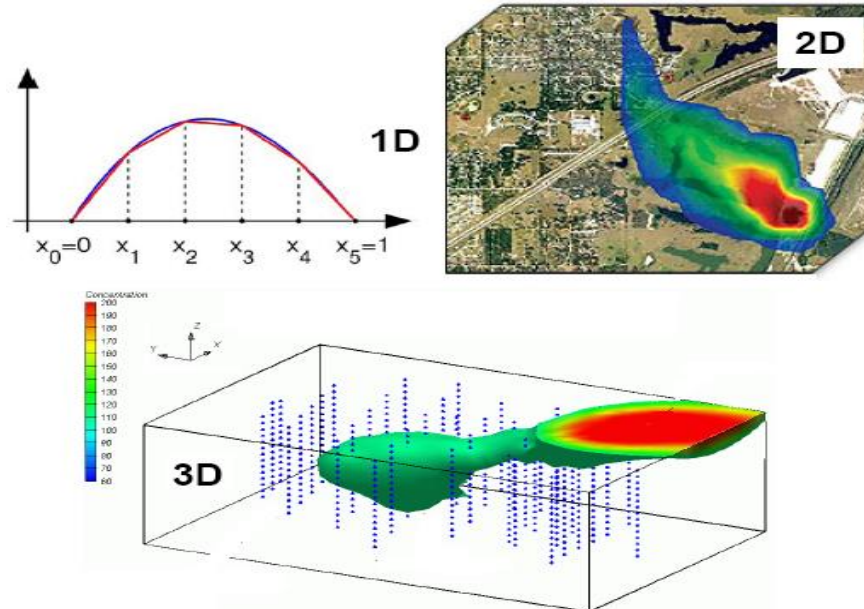


Fig.4.4 Reprezentarea unei probleme sub cele trei dimensiuni
 Sursa: Giuliano Tevi, Ape subterane, Modelarea proceselor de poluare, Masuri de remediere

În mod normal, atunci când avem suficiente date, un model 3D descrie acviferul și comportamentul lui mai bine decât orice alt model. Modelele 3D se folosesc în cazul în care există mai multe acvifere, curgerea și transportul în plan vertical sunt semnificative.

Dacă există un deficit de date, altă schematizarea trebuie luată în considerare.

Atunci când a treia dimensiune a acviferului (grosimea) este foarte mică în comparație cu celelalte dimensiuni din plan, vom considera o structură 2-D, formată dintr-un strat orizontal. În acest caz trebuie verificat dacă ipoteza Dupuit este valabilă. În fig.4.5 este reprezentat un exemplu de trecere de la cazul 2D la 3D.

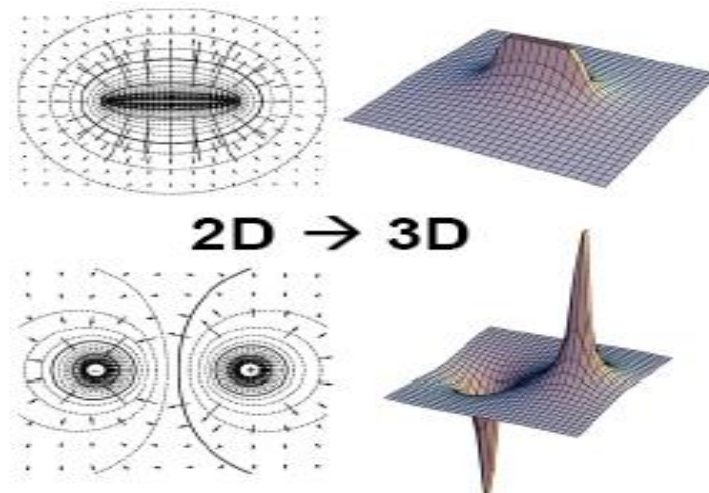


Fig.4.5 Trecerea de la dimensiunea 2D la 3D
 Sursa: Giuliano Tevi, Ape subterane, Modelarea proceselor de poluare, Masuri de remediere

Modelele 2-D verticale pot fi utilizate în cazul în care curgerea perpendiculară (pe direcția treia) este neglijabilă, cum este cazul fluxurilor poluante provenite de la un râu la un acvifer.

Uneori, straturi permeabile comunică prin intermediul formațiuni semipermeabile. În acest caz, o schematizarea multistrat poate fi utilizată, apa se mișcă orizontal prin formațiunile permeabile, în timp ce în straturile semipermeabile apa se mișcă vertical.

Modelul 2D se folosește în zonele în care direcția de curgere a apei are o distribuție bidimensională, pentru acvifere la care parametrii hidraulici variază puternic și în cazul în care este necesară distribuția spațială a frontului de poluare.

Pentru curgere în care avem o singură fază, stabilirea modelului conceptual este relativ simplă. Se pornește de la legea lui Darcy, care indică viteza sub un gradient hidraulic, și cu ajutorul investigațiilor geologice se stabilesc structura și proprietățile acviferului.

Pentru transportul în care sunt implicate mai multe faze, trebuie specificate procesele fizice ce participă (advecție, difuziune, adsorbție, degradare). Modelul conceptual nu este complet doar cu descrierea acestor procese, de aceea este nevoie de modelare matematică.

4.b.) luarea în calcul a neomogenității

Unii parametri ai acviferului (conductivitatea hidraulică, transmisivitatea, dispersivitatea) sunt cunoscuți pe bază măsurătorilor din teren. Cu toții prezintă o variabilitate care trebuie introdusă în modelul numeric.

Numărul de zone omogene depinde de densitatea datelor din teren, dar în unele cazuri este pe baza structurii hidrogeologice. În timpul procesului de calibrare, numărul de zone omogene ar putea fi mărit de la unul la mai multe pentru a asigura obținerea unor valori calculate apropiate de variabilele măsurate (nivelul apei, concentrația, temperatura etc.) Nu se recomandă creșterea excesivă a numărului de zone omogene, deoarece modelul în sine este o simplificare a realității care implică aproximații; în același timp, chiar și datele măsurate fiind afectate de erori.

Anizotropie este luată în considerare în modele verticale, ținând seama de faptul că conductivitatea verticală este mai mică decât conductivitatea orizontală. În unele cazuri (roci fracturate), chiar și în cazul modelelor 2-D orizontale, anizotropia trebuie luată în considerare.

5.b.) decizii referitoare la caracterul miscibil sau nemiscibil al poluanților studiați.

De exemplu, în cazul unei poluări cu hidrocarburi, unele componente se pot amesteca cu apa, fiind mult mai periculoase, deoarece acestea sunt transportate cu viteza apei, afectând astfel o zonă importantă într-un timp relativ scurt. Alte componente sunt nemiscibile, și datorită vâscozității lor sunt caracterizate de o viteză redusă de propagare. În acest caz măsurile de reabilitare trebuie să fie luate pe o zonă restrânsă.

6.b.) decizii referitoare la procesul de descompunere pentru a explica scăderea concentrației

Atunci când o soluție se mișcă într-un mediu poros, scădere concentrației poate fi explicată prin mecanisme diferite. Alegerea celui mai adecvat mecanism este important pentru predicții matematice.

La stabilirea modelului conceptual pot apare erori pe care le-am împărțit în două categorii:

Nejustificate (întâmplătoare)

- utilizarea modelării 2D sau 3D, când se poate folosi cu ușurință 1D
- dimensiunea pasului de discretizare este prea mică
- alegerea unui model complex, greu de investigat

Apărute în urma unor greșeli de modelare

- utilizarea unui model pentru mediu poros, când textura este fracturată
- utilizarea unui model pentru o problema de echilibru, când regimul este tranzitoriu

- studierea unei zone fără a ști dacă este saturată sau nesaturată
- studiul transportului fără a ține seama de procesele de advecție, dispersie, biodegradare, descompunere (unde este cazul)

Realizarea modelului conceptual este dependentă de cantitatea și calitatea datelor colectate, și aceasta poate fi îmbunătățită pe baza datelor noi obținute.

c) *Modelul matematic*

Modelarea matematică începe cu o foarte bună înțelegere a fenomenului real, iar apoi traducerea acestuia în termeni matematici.

Este o descriere fizică a modelului conceptual. Este alcătuit din ecuații cu derivate parțiale, ce descriu transferurile care au loc în acvifer și care sunt obținute prin asocierea unei legi dinamice cu ecuația de continuitate. Înainte de rezolvarea acestor ecuații este necesară specificarea condițiilor inițiale și de margine.

Și modelul matematic, ca și cel conceptual, poate fi afectat de erori.

- 1.) Nejustificate (întâmplătoare)
 - dimensiunea gridului, folosit la metodele numerice, este prea mic
- 2.) Erori induse de procedeele numerice
 - rotunjirea erorilor
 - nerespectarea criteriilor de convergență și stabilitate întâlnite la metodele numerice
- 3.) Insuficiența datelor care să permită simularea
 - necunoașterea tuturor parametrilor acviferului
 - alegerea incorectă a condițiilor inițiale și de margine

Tabelul 6

Parametrii de intrare/ieșire folosiți la modelarea în acvifer

Parametrii de intrare		Parametrii de ieșire
Pasul de discretizare	CURGEREA IN ACVIFER	Hidroizohipsele Viteze de curgere
Tipul de acvifer		
Condiții inițiale și de margine		
Grosimea acviferului		
Nivelurile de apă		
Conductivitatea hidraulică/Transmisivitatea		
Porozitatea		
Coeficient de înmagazinare		
Parametrii de intrare	TRANSPORTUL IN ACVIFER	Parametrii de ieșire
Condiții inițiale și de margine		Variații ale concentrației în funcție de timp
Puncte de observație		
Sursa de poluare, concentrații inițiale		
Timpul de modelare		
Coeficient de dispersie		
Factor de degradare		

Parametrii de intrare reprezintă datele care sunt folosite pentru a dezvolta un model ce va trebui calibrat. Parametrilor de intrare cuprind pasul de discretizare, timpul pentru care se face modelarea, tipul de acvifer, condiții inițiale și de margine, nivelul apei, conductivitatea hidraulică / transmisivitatea, porozitatea terenului, concentrații de poluant, coeficienții de dispersie, coeficienți de degradare, etc. Un model poate fi folosit pentru a prognoza variația debitelor de apă subterană, pentru evaluarea riscurilor produse în cazul unei poluări și/sau pentru alegerea metodei de remediere a acviferelor poluate.

d) *Alegerea metodei de rezolvare*

După ce caracterizarea hidrogeologică a domeniului studiat a fost finalizată, model conceptual dezvoltat, modelul matematic descris, este necesară alegerea metodei de rezolvare.

60 Metode și soluții pentru rezolvarea ecuațiilor din acvifer - IV

Ecuțiile cu derivate parțiale folosite la descrierea proceselor de curgere și transport sunt rezolvate analitic sau numeric.

În cazul sistemelor complexe se folosesc metodele numerice pentru rezolvarea problemelor de curgere și transport. Aceste metode folosesc aproximări și împart ecuațiile cu derivate parțiale în diferențe sau elemente finite. Printre abordările numerice cele mai utilizate în modelarea apelor subterane sunt: Metoda Diferențelor Finite, Metoda Elementelor Finite și Metoda Volumelor Finite.

Fiecare metodă are propriile avantaje și dezavantaje în ceea ce privește disponibilitate, costuri, ușurința de utilizare, aplicabilitatea, precum și cunoștințele necesare din partea utilizatorului.

Programul de calcul utilizat în timpul modelării matematice trebuie să fie selectat în funcție, de capacitatea lui de a efectua simularea în condițiile impuse. Aceste condiții se referă la

- tipul de acvifer (poros, fracturat, carstic)
- stratificarea și localizarea factorilor de stres
- condițiile de curgere: mediu saturat/ nesaturat, 2-D sau 3-D, sub presiune / cu nivel liber
- variația spațială a proprietăților hidrogeologice
- variația în timp și spațiu a condițiilor de margine și a sursei de poluare
- una sau mai multe faze folosite la modelare
- influența densității fluidului sau a temperaturii asupra proceselor de curgere și transport

În tabelul 7 sunt descrise cele mai utilizate programe folosite pentru modelarea în acvifer.

Tabelul 7

Programe folosite pentru modelarea în acvifer

Program	Funcția
<u>AQUA3D</u>	Studiază curgerea și transportul 3-D
<u>AquaChem</u>	Analizează geochemic soluția apoasă
<u>AquaDyn</u>	Pachet de simulare hidrodinamică pentru canale deschise - râuri, lacuri, și estuare
<u>AquiferTest for Windows</u>	Analiza acviferului prin teste de pompare și interpretarea datelor în Windows
ASMWIN	Modelarea 2D a curgerii și transportului în acvifer
<u>BIOF&T 2-D/3-D</u>	Biodegradarea, curgerea și transportul în zona saturată sau nesaturată
<u>Chemflo</u>	Simulează mișcarea chimică a apei în zona nesaturată
<u>ChemFlux</u>	Modelarea transportului prin metoda elementului finit
<u>ChemGraph</u>	Bază de date software pentru apele subterane
<u>FEFLOW</u>	Simulează curgerea prin metoda elementului finit
<u>FLOWPATH II</u>	Simulează curgerea 2D în acvifer, reabilitarea și stabilirea zonelor de protecție
<u>3DFATMIC</u>	Simulează curgerea, evoluția și transportul substanțelor chimice
<u>GMS - Groundwater Modeling System</u>	Modelarea apelor subterane prin MODFLOW, MODPATH, MT3D, RT3D, FEMWATER, SEAM3D, SEEP2D, PEST, UTCHEM, și UCODE

<u>Groundwater Vistas</u>	Model avansat de simulare în acvifer prin MODFLOW, MODPATH, MT3D, RT3D, PEST și UCODE
<u>MARS 2-D/3-D</u>	Simulează comportamentul multifazic în acvifer
<u>MODFLOW</u>	Model 3D de simulare prin diferențe finite
<u>PESTAN</u>	Model de simulare al transportului în acvifer produs de pesticide
<u>RBCA Tier 2 Analyzer</u>	2D Model de simulare a curgerii și biodegradării din acvifer
<u>SUTRA</u>	2-D Saturat/Nesaturat Transport Model
<u>TWODAN</u>	2-D Model analitic de simulare a curgerii în acvifer
<u>VAM2D</u>	2-D Model de simulare în acvifere variabile din punct de vedere al saturației
<u>Visual MODFLOW</u>	Integrated Modeling Environment for MODFLOW, MODPATH, MT3D, and PEST
<u>WinTran</u>	Model de simulare a curgerii și transportului în acvifer

e) *configurarea modelului*

Suprafață și dimensiunea verticală a acviferului s-au stabilit în timpul dezvoltării modelului conceptual.

În cazul evaluării resurselor de apă este preferabil să se examineze întregul bazin hidrogeologic. Pentru alte probleme de curgere, doar o parte din acvifer poate fi modelat folosind condiții de margine adecvate.

Pentru modelarea curgerii se folosesc modelele 2D, cu un singur strat sau multi - straturi.

Pentru probleme de transport, în cele mai multe cazuri un model 3-D este recomandată.

1.e.) pasul de discretizare

În general, exactitatea rezultatelor este îmbunătățită atunci când se utilizează un pas cât mai mic de discretizare, dar timpul de calcul și resursele calculatorului cresc astfel cerințele de acuratețe și trebuie găsit un compromis. Acest compromis este de a utiliza un pas de discretizare mic în zona de interes.

Acest lucru poate fi obținut cu ușurință atât prin Metoda Elementelor Finite cât și prin Metoda Diferențelor Finite. De exemplu, pasul de discretizare poate fi mic în apropierea râurilor și a limitelor naturale, a forajelor de pompare sau de injecție, a surselor de poluare.

Pasul de discretizare mai mare poate fi folosit în zonele cu informații limitate, în domenii care prezintă un interes redus sau în cazul în care gradientii sunt mici.

Dispersia numerică, în probleme de transport, este legată de ignorarea termenilor de ordin superior în dezvoltarea în serie Taylor, atunci când se formulează ecuațiile de guvernare. O anumită influență o are alegerea greșită a pasului de discretizare. Pentru a minimiza acest aspect este necesară alegerea corectă a pasului de timp și a pasului de discretizare.

Posibilitatea de a modifica pasul de discretizare permite o mai mare flexibilitate în model, necesară în special în zonele cu un grad ridicat de eterogenitate. Prin variația pasului de discretizare este introdusă o pierdere de precizie (Bear și Verruijt, 1987). Pentru a facilita convergența model, pentru a crește stabilitatea și pentru a reduce inexactitate, o variație treptată între dimensiunile celulelor trebuie respectată. Este recomandat un raport de maxim 2.0 între dimensiunile celulelor.

Pentru probleme de transport, pasul de discretizare nu ar trebui să fie mai mare decât de două ori dispersivitatea, pentru a asigura stabilitatea numerică și pentru a minimiza dispersia numerică; această constrângere fiind derivată din criteriul Peclet:

$$Pe = \frac{dx}{\alpha_x} \leq 2 \quad (4.1)$$

dx este pasul de discretizare
 α_L este dispersia longitudinală

Pentru medii nesaturate criteriul Peclet nu trebuie să fie mai mare de 0.5

Influența numărului Peclet este redată în fig.4.6. Cu cât crește valoarea lui Peclet se instalează instabilitatea sistemului și apar oscilațiile.

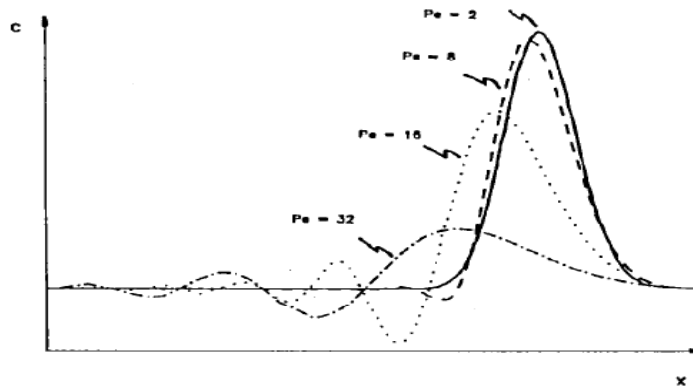


Fig. 4.6 Influența numărului Peclet

Sursa: *An Introduction to Groundwater Modeling Techniques*

2.e.) pasul de timp

Pentru o problemă 2D de variație a curgerii, rezolvată prin forma explicită a diferențelor finite, soluția este stabilă în cazul în care pasul de timp îndeplinește următoarea condiție (Bear și Verruijt, 1987):

$$0 \leq \Delta t \leq \frac{S}{2T} \frac{(\Delta x)^2 \cdot (\Delta y)^2}{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2} \quad (4.2)$$

În cazul problemelor de transport, pentru a reduce dispersia numerică și pentru a maximiza stabilitatea numerică, pasul de timp trebuie să respecte criteriul Courant:

$$Co = \left| v \frac{\Delta t}{\Delta x} \right| < 1 \quad (4.3)$$

Influența criteriului Courant este prezentată în fig. 4.7

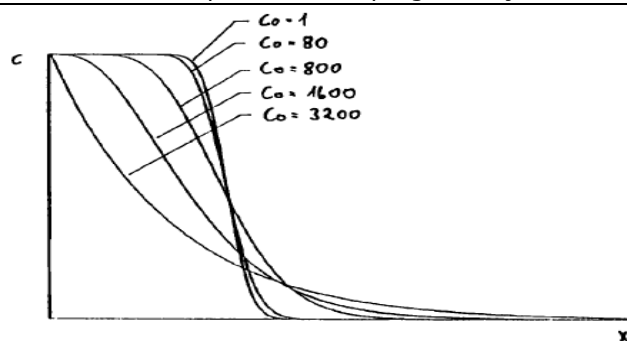


Fig. 4.7 Influența criteriului Courant

Sursa: *An Introduction to Groundwater Modeling Techniques*

3.e) condiții inițiale

Prin condiții inițiale se înțeleg condițiile folosite ca punct de plecare pentru calcularea iterativă a soluției numerice. Pentru probleme cu regim tranzitoriu starea inițială a sistemului trebuie să fie definită, ea reprezentând o condiție fizică.

Condițiile inițiale indică starea sistemului la un timp inițial, de obicei denumit $t = 0$.

Pentru probleme de transport, condițiile inițiale sunt reprezentate de concentrațiile de poluanți existente la momentul începerii simulării.

4.e) condițiile de margine (Sursa David, 1998).

Condițiile de margine reprezintă conectarea acviferului cu sistemele externe și trebuie să definească foarte clar problema pentru a obține o soluție unică. Avem condiții de margine pentru curgere și condiții de margine pentru transport.

5.e) alte date necesare în modelare

Există modele care trebuie să fie completate cu date suplimentare. Deoarece variația parametrilor acviferului nu este cunoscută și dificil de introdus într-un model cu un număr mare de celule de discretizare, datele de intrare sunt zonate.

Cele mai multe informații sau date necesare pentru modelare există în arhivele vechi; acestea au fost obținute în timpul sau după construcția forajelor.

Testele de pompare reprezintă principala sursă de informare pentru mulți dintre acești parametri, cum ar fi: conductivitate hidraulică sau randamentul specific.

Având în vedere că utilizarea modelării transportului este relativ recent introdusă în practica actuală de gestionare a apelor subterane, datele necesare modelului nu există și trebuie obținute. Testele pentru determinarea dispersivității sunt un exemplu pentru obținerea unor astfel de date. Alți parametri poate fi aproximați din datele publicate.

Pe lângă datele zonate sunt necesare informații cu caracter punctual.

Aceste date sunt măsurate în puțuri de observație, în timpul programului de monitorizare și sunt necesare pentru regimul tranzitoriu și modele de transport.

IV.3.2 Aplicarea modelului

Cuprinde 3 etape:

f) Calibrarea modelului

Date furnizate de măsurătorile din teren reprezintă estimarea locală a diferiților parametri.

În cadrul fiecărei zone, un anumit parametru este considerat constant. În timpul procesului de calibrare valorile parametrilor nesiguri vor varia în intervale măsurate; În acest timp, distribuțiile parametrilor trebuie să fie în concordanță cu ipotezele geologice.

Scopul calibrării este ca modelul numeric să furnizeze valori calculate ale variabilelor cât mai apropiate de valorile măsurate. În cazul în care modelul calibrat este capabil să reproducă răspunsurile observate, se consideră că modelul va oferi rezultate bune în faza de predicție.

În cazul în care volumul de date disponibil este mic sau modelul se extinde în mod semnificativ dincolo de zona datelor cunoscute, mai multe calibrări pot fi obținute de la același set de date. În funcție de informațiile disponibile, calibrarea parametrilor modelului curgerii poate fi realizată fie în starea de echilibru sau în starea tranzitorie.

Principalele tehnici folosite în practică pentru calibrarea parametrilor sunt: încercare - eroare și optimizarea.

Metoda încercare - eroare, numită și calibrare manuală, implică modificarea repetată a parametrilor incerti (conductivitatea hidraulică pentru curgere sau adsorbție pentru transport), urmată de simulări numerice și de evaluarea rezultatelor. Această metodă este foarte des utilizată din cauza posibilității de a lua în considerare nu numai parametri măsurați, dar și experiența personală a modelatorului reflectată în interpretarea informațiilor hidrogeologice și hidrologice.

Procesul de calibrare poate implica zeci de simulări, dar parametrii de identificare sunt sub controlul modelatorului.

Variații cu contraste mari între zonele învecinate ale parametrilor hidrogeologice sau necorelarea valorilor parametrilor cu structura geologică, nu sunt acceptate, cu excepția situației în care o explicație fizică poate fi găsit.

Calibrarea manuală este strâns legată de analiza sensibilității modelului, care a pus în evidență variația răspunsului modelului ca urmare a variației parametrilor incerti. Din punct de vedere matematic, sensibilitatea este dată de derivata parțială a variabilei pentru a schimba valoarea parametrului de intrare:

$$s = \left| \frac{\partial H}{\partial P} \right| \approx \left| \frac{\Delta H}{\Delta P} \right| \quad (4.4)$$

Sursa: http://echo2.epfl.ch/VICAIRE/mod_3/chapt_10/main.htm

ΔH reprezintă diferența dintre valoarea obținută în cazul de bază și valoarea obținută în cazul sensibilității, evaluate în mai multe locații.

ΔP reprezintă schimbarea în datele de intrare
s este sensibilitatea

Metoda de optimizare se bazează pe un model matematic, format din ecuații care reglementează discretizarea și o funcție obiectiv. Funcția obiectiv este de obicei o medie ponderată a diferențelor dintre valorile măsurate și calculate. În unele cazuri, se pot adăuga termenii care reflectă diferențele dintre parametrii măsurați și parametrii calibrați (conductivitate hidraulică de exemplu) sau între parametrii măsurați și rezultatele calculate. În general, o minimizare a funcției obiectiv se face cu relația:

$$(\min) Z = \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i |C_i - M_i|^p \right)^{1/p} \quad (4.5)$$

Sursa: http://echo2.epfl.ch/VICAIRE/mod_3/chapt_10/main.htm

$\lambda_i > 0$ este un coeficient de ponderare asociat cu valoarea i

n numărul de valori măsurate

C_i valorile calculate

M_i valorile măsurate

Calibrarea parametrilor de transport este mult mai dificilă decât calibrarea parametrilor de curgere. Diverse procese pot produce o scădere a concentrației (dispersia sau degradarea) și identificarea procesului adevărat este un lucru dificil.

O bună înțelegere a problemei investigate este esențială pentru a considera dacă datele calibrate reprezintă sistemul natural sau vom continua îmbunătățirea calității acestor date. Greșeli în calibrarea modelului numeric pot avea diferite cauze:

- O alegere inadecvată a modelului matematic;
- O înțelegere inadecvată a acviferului modelat și, astfel, un model total sau parțial incorect conceptual. Acest lucru se poate întâmpla prin alegerea incorectă a dimensiunilor modelului, condiții de margine greșite, nivelul insuficient de eterogen etc.

- Erori în datele de intrare (erori de măsurare, estimare greșită a datelor nemăsurate). Chiar dacă datele măsurate sunt corecte, nu trebuie să uităm că acestea sunt legate de sistemul fizic real, nu de model. (Brouyère, 2003). În cazul în care modelul nu este bine adaptat la realitate, rezultatele obținute caracterizează doar modelul nu și realitatea.

Soluția la această problemă este de a verifica datele și de a le elimina pe cele sensibile, de a colecta date noi, sau de a revizui modelul conceptual și procesele de guvernare.

g) *Validarea modelului* poate avea ca rezultat o calibrare suplimentară sau rafinarea modelului.

Calibrarea este un pas important în modelarea apelor subterane. Un model poate fi calibrat utilizând parametri arbitrari de intrare cu scopul de a se potrivi variabilele observate cu valorile de ieșire. Precizia modelului nu este implicit garantată de o calibrare de succes; astfel, modelul ar trebui să fie testat pentru altă situație înainte de a concluziona că rezultatele obținute reprezintă în mod corespunzător sistemele fizice și în final să facem previziuni fiabile. De fapt, scopul validării este de a elimina teama privind variabilitatea parametrilor hidrogeologici.

h) *Efectuarea de predicții pe baza rezultatelor obținute*

Efectuarea de previziuni pe baza rezultatelor obținute este unul dintre scopurile principale ale modelării matematice. Simulări provizorii pot fi efectuate pentru scenarii diferite în care s-au folosit noi condiții de margine sau modificarea unora dintre condițiile de la calibrare, în timp ce structura naturală internă a acviferului nu este modificată. Uneori, condițiile anterioare utilizate în faza de calibrare sunt parțial modificate.

Modificarea nivelului de apă de suprafață din cauza realizării unui rezervor, creșterea sau extinderea nivelului de apă prin adăugarea de noi puțuri, introducerea realimentare artificială sau percolarea în creștere datorate unui sistem de irigare, construcția unei rafinării sunt exemple de modificări importante a condițiilor de margine prin modificarea nivelelor piezometrice, debitelor sau concentrațiile.

Există situații în care lucrările de inginerie introduc noi condiții de margine, care nu existau în faza de etalonare.

IV.4 Prezentarea programului ASMWIN (Sursa Wen-Hsing Chiang, Wolfgang Kinzelbach and Randolph Rausch, *Your First Groundwater Model with ASMWIN*)

ASMWIN (Aquifer Simulation Model For Windows) este un program complet de modelare subterană 2-D. Aceasta a fost inițial dezvoltat ca un instrument pentru educația în școli, în domeniul precum hidrogeologia, ingineria civilă și mediu. Prima versiune a ASM a fost publicată în 1989.

Programul poate fi folosit atât pentru curgere, cât și pentru transport. Este organizat pe module de funcționare, care sunt apelate automat de programul principal în funcție de faza de modelare. Modulele apelate automat sunt:

- ASMSIM1 care rezolvă sistemul de ecuații liniare aferente curgerii folosind metoda gradientilor conjugați sau metoda iterativă Cholesky (fig.4.10)

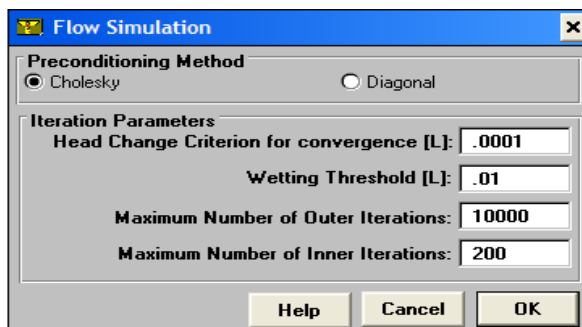


Fig. 4.10 Simularea curgerii cu programul ASMWIN

- ASMOPTI care realizează o procedură de calibrare a modelului în regimul permanent și uniform;
- ASPATH care oferă mai multe metode de interpolare urmate de integrarea Euler pentru calculul direcțiilor de curgere și a timpilor de transport. În modulul de curgere în regim permanent și nepermanent sunt folosite variantele „înainte „ și „înapoi” ale căror rezultate sunt preluate de modulul ASPATH pentru vizualizarea direcțiilor de curgere, liniilor de curent, linii de același potențial hidrolic și vectorilor de viteză.
- ASMT2SIM și ASMWALK au ca obiect simularea transportului poluanților. ASMT2SIM folosește metoda diferențelor finite, iar ASMWALK folosește metoda drumului aleator. (fig. 4.11). Metoda diferențelor finite folosește cele două forme central și upwind.(fig.4.12)

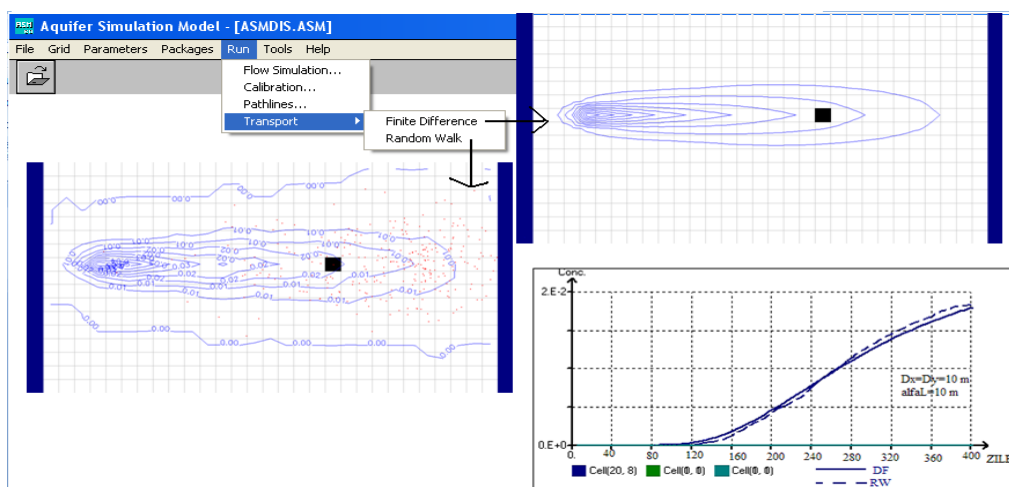


Fig.4.11 Metodele folosite în modelare: Diferențe Finite și Random Walk

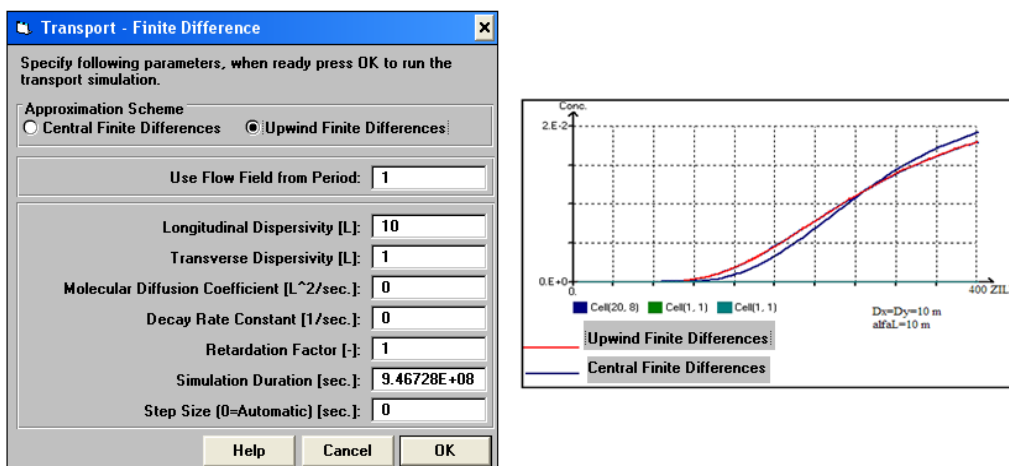


Fig. 4.12 Cele două aspecte ale Diferențelor Finite, formele Central și Upwind

La postprocesarea datelor se disting următoarele module:

- modulul de extragere a rezultatelor (Result extractor) preia rezultatele în urma rulării modulelor de curgere și transport pentru vizualizarea, salvare în format ASCII/SURFER ori export într-un program tip tabelă economică (Spreadsheet). Rezultatele obținute sunt: înălțimi piezometrice, denivelări, viteze, schimb de volume de apă între zone de intrare și concentrații;

- modulul de calcul al bilanțului de apă (Water Budget Calculator) oferă rezultate ale bilanțului de apă între zone specificate de utilizator și ale modificării parametrilor hidraulici în cadrul schimbului;
- modulul de generare a rețelei (Field Generator) care este un instrument puternic de preprocesare grafică a datelor de intrare, fiind util în modelări pe domenii neomogene;

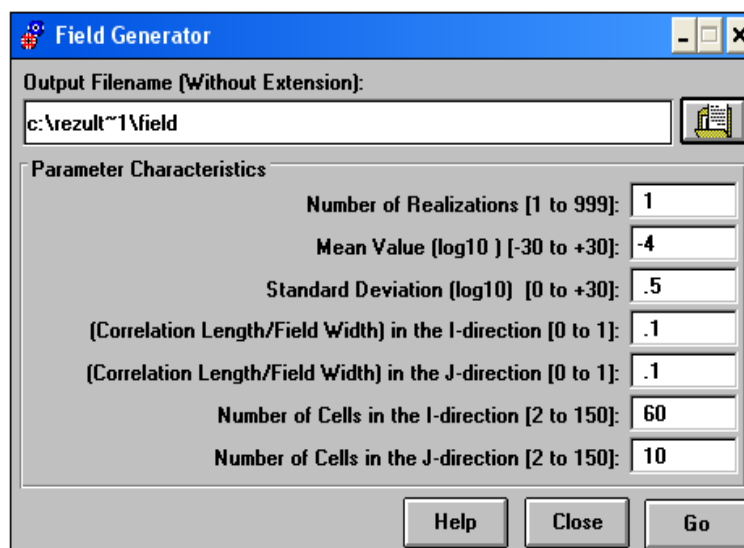


Fig. 4.13 Modelarea Stohastică – Metoda Monte Carlo

modulul de vizualizare grafică a rezultatelor (Graph Viewer) care este un instrument de postprocesare a rezultatelor privind înălțimile piezometrice, denivelările sau concentrațiile. ASMWIN fiind un soft pentru modelare numerică a curgerii și transportului poluanților în apele subterane generează două modele: unul de curgere și unul de transport.

Modelul de curgere utilizează datele de intrare și condițiile la limită pentru a obține ca rezultate: înălțimile piezometrice și implicit câmpul de viteze.

Câmpul de viteze este utilizat de program ca și legătură între cele două modele de curgere și transport. Pentru crearea unui model de curgere este necesară introducerea datelor de intrare după o tehnică secvențială.

Pașii secvențiali care se urmează în program sunt:

- crearea fișierului de bază
- încadrarea domeniului de curgere într-un domeniu spațial: definirea lungimii și lățimii și a numărului de celule pe verticală și pe orizontală.
- precizarea tipului de acvifer (sub presiune sau cu nivel liber)
- precizarea condițiilor la limita domeniului prin specificarea unui cod aferent nivelelor constante (-1), și a celor cunoscute ce urmează a fi determinate (1), sau a celulelor care nu fac parte din domeniu (0)
- precizarea grosimii stratului acvifer prin indicarea unei cote superioare a acviferului și a unei cote inferioare
- precizarea condițiilor de margine respectiv în acele celule marginale unde codul stabilit a fost (-1) se introduc valorile nivelelor constante în cote absolute
- precizarea caracteristicilor fizice ale acviferului: conductivitate / transmisivitate hidraulică și porozitate efectivă
- precizarea valorilor debitelor pompate / injectate din și în domeniul modelat

Astfel fiind introduși toți parametrii precizați anterior se poate rula programul, stabilindu-se metoda de rezolvare a sistemului de ecuații rezultat, numărul de iterații și eroarea maximă admisă între 2 iterații.

Modelul de transport are la bază modelul de curgere creat și rulat anterior, mai fiind necesară introducerea următorilor parametri de timp și transport:

- precizarea condițiilor la limită pentru concentrații, se folosesc aceleași coduri ca și la modelul de curgere (1, -1, 0)
- precizarea condițiilor inițiale pentru concentrație
- precizarea în cadrul domeniului de curgere a poziției sursei de poluare și a tipului de injecție a acestuia în acvifer
- precizarea parametrilor de transport (dispersivitate longitudinală și transversală, coeficientul de difuzie moleculară, factor de întârziere, factorul coeficientului de degradare) și a parametrilor de timp (timpul total de simulare și pașii de timp în care acesta din urmă este divizat).

Acești parametri fiind introduși se poate rula modelul de transport. Exploatarea rezultatelor rulării modelului de transport se face prin:

- reprezentarea grafică a curbelor de concentrații egale
- reprezentarea grafică a concentrației în timp, înregistrată în puncte caracteristice alese de utilizator, numite puncte de observație.

ASWIN permite rularea modelului de transport și prin metoda drumului aleator prin apelarea modulului ASMWALK. Acest modul citește fișierul de bază și necesită la rândul lui parametri de timp și transport. Diferența, la precizarea concentrației inițiale, constă în faptul că masa de injecție de poluant este distribuită pe numărul total de particule folosite în simulare. Se poate opta pentru injecție continuă și instantanee. Rezultatele obținute în urma simulării pot fi exploatate grafic ca și curbe de egală concentrație sau variația concentrației în timp, în puncte caracteristice, alese de utilizator.

IV.5 Metode de rezolvare a problemelor de transport din acvifer

Odată ce model conceptual este tradus în model matematic, asociat cu condițiile inițiale și de margine, o soluție poate fi obținută prin transformarea sa într-un model numeric și rezolvarea cu ajutorul unui soft.

Există metode analitice și metode numerice de rezolvare a modelului matematic, prezentate și în fig.4.14

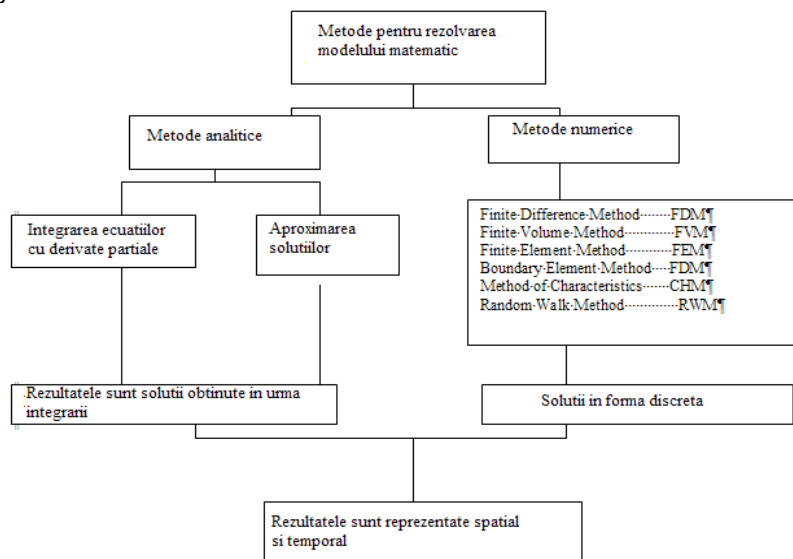


Fig.4.14. Metode de rezolvare a problemelor de transport din acvifer

Sursa: David, 1998

Modele matematice în hidrogeologie se bazează pe principiul continuum, sistemul real fiind considerat continuu în spațiu și timp. Folosind variabile continue, modelul matematic se exprimă analitic; pentru cazul omogen și izotrop, soluția modelului matematic putând fi analitică.

Modelul clasic de transport poluanți în subteran este ecuația de advecție - dispersie (ADE). Ea include advecția, difuzie moleculară și dispersie mecanică ca procese de transfer de masă.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} (q_i^A + q_i^d + q_i^D) \quad (4.6)$$

C este concentrația

t este timpul

x_i coordonata spațială în direcția i

$$q_i^A = v_i c \quad (4.7)$$

v_i viteza efectivă

Relația (4.11) reprezintă transportul adectiv

$$-D^d \frac{\partial c}{\partial x_{ij}} = q_i^d \quad (4.8)$$

Relația (4.12) reprezintă transportul difuziv, calculat cu prima lege a lui Fick, unde D^d este coeficientul efectiv de difuzie.

Dispersia locală este un mecanism cauzat de variația vitezei. Este clasic modelată folosind legea Fick.

$$q_i^D = - \sum_j D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_{ij}} \quad (4.9)$$

Difuzia și dispersia sunt combinate într-un singur tensor care se cheama dispersie hidrodinamică.

IV.5.1 Metoda analitică

Poate fi utilizată în cazul în care curgerea și transportul sunt relativ simple, parametrii fizici ai acviferului sunt constanți și condițiile de margine ideale.

Există multe soluții analitice, în funcție de tipul de curgere și de condițiile de margine. (exemple de soluții analitice dependente de condițiile de margine sunt: soluția Thiem folosită în cazul acviferelor sub presiune, soluția Dupuit folosită în cazul acviferelor cu nivel liber sau soluția lui Todd folosită în cazul acviferelor arteziene)

Metodele analitice și soluțiile corespunzătoare caracterizează domenii mici și permit simplificări importante ale sistemelor reale. Unele probleme de apă subterană pot fi astfel rezolvate analitic, fără apariția erorilor (Spitz și Moreno, 1996).

Modelele analitice nu pot fi folosite atunci când valoarea parametrilor variază în zona studiată sau când condițiile de margine sunt complexe. În probleme de transport, datorită complexității acestora, crescând cu dimensiunile problemei, soluțiile analitice sunt valabile pentru cazurile 1 D.

Soluția analitică corespunzătoare ecuației de transport, 1D este:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - v_a t}{\sqrt{4\Delta t}} \right) + \exp \left(\frac{xv_a}{D} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x + v_a t}{\sqrt{4\Delta t}} \right) \right] \quad (4.10)$$

$$C_0 = \frac{M^*}{mn_e \nu} \quad (4.11)$$

Cu cele două aproximări

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - v_a t}{\sqrt{4\Delta t}} \right) \text{ for } x - v_a t > 0 \quad (4.12)$$

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[-2 \left(\frac{x - v_a t}{\sqrt{4\Delta t}} \right)^{1.5} \right] \text{ for } x - v_a t < 0 \quad (4.13)$$

Dacă modelul matematic nu poate fi rezolvat analitic trebuie să fie transformat într-un model numeric și apoi rezolvat.

IV.5.2 Metodele numerice

Progresul în hidrogeologia cantitativă a venit la începutul anilor șaiszeci, odată cu apariția modelării numerice. Este greu de precizat cine a construit primul model digital al unui acvifer. Aceasta a venit după mai multe tentative (începute în industria petrolului) și prin utilizarea modelelor analogice și digitale realizate de Walton și Prickett (1963), Prickett (1967).

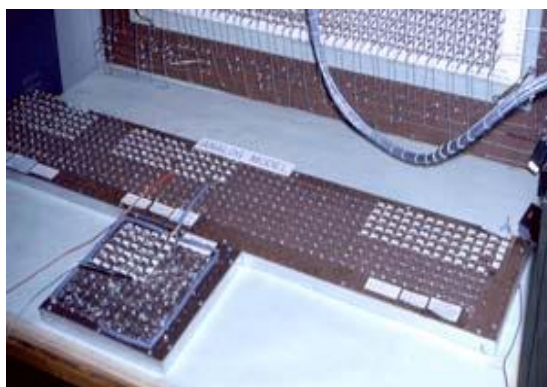


Fig. 4.16 Model analogic folosit pentru studiul proceselor din acvifer

Sursa: <http://www.isws.illinois.edu/hilites/achieve/gwmodeling.asp>

Contribuții importante în domeniu au adus Tyson și Weber (1964), Zaoui (1961), Prickett (1975) și alții.

Modelele analogice, dar mai cu seama modelele digitale au oferit posibilitatea de a varia în spațiu proprietățile acviferului, în același timp adaptând modelul la geometria domeniu.

Presupunând că există câteva valori obținute prin teste de pompare, în cazul modelului acestea vor fi plasate în celule. Modelul ne oferă mai multe perspective de studiu a neomogenității decât testele de pompare. Pentru zonele dintre foraje, permeabilitatea a fost stabilită prin valori medii. Acest lucru a fost posibil, la model, prin zonare (Voronoi, Thiessen, poligoane înconjurând fiecare foraj.). Neomogenitatea a fost definită după un set de măsurători medii, interpolate în spațiu. Această definiție nu a fost acceptată, deoarece modelul calcula nivele, debite, care nu puteau fi verificate. Astfel a apărut calibrarea modelului, în prima fază prin procesare și calculul erorilor, în prezent prin metoda inversa. (Carrera 1985)

Metodele numerice permit restrângerea soluției la un set de puncte de rețea convenabil distribuite, utilizând sistemul de coordonate carteziene. Ecuațiile cu derivate parțiale sunt rezolvate prin scheme discrete, concentrațiile sunt constante într-un element, dar variază între elemente. În acest fel, un acvifer neomogen este aproximat ca o colecție de diferite regiuni omogene. Soluțiile sunt obținute în nodurile rețelei.

Ca urmare a acestei operațiuni, numită discretizare, variabilele continue sunt înlocuite cu variabile discrete, definite prin blocuri de rețea, celule sau noduri, în timp ce ecuațiile diferențiale care guvernează fenomenul studiat sunt transformate într-un sistem de ecuații algebrice.

Într-un model numeric parametri acviferului (conductivitate hidraulică, coeficienții de depozitare, dispersivități etc), condițiile la limită (Dirichlet, Neumann, Cauchy) și dimensiunile rețelei sunt alese pentru a reprezenta cel mai bine domeniul real. Aceste informații servesc ca date de intrare pentru softul ales, conducând după rezolvarea sistemului de ecuații algebrice la soluția numerică.

Soluția numerică obținută este doar o aproximare a răspuns real al sistemului. (Fetter, 2001)

Principalele caracteristici ale metodelor numerice sunt:

1. Soluția este reprezentată prin variabile, în spațiu și timp
2. Ecuațiile cu derivate parțiale sunt înlocuite de un set de ecuații algebrice
3. Domeniul este împărțit în elemente de discretizare
4. Datorită numărului mare de ecuații care trebuie să fie rezolvate simultan, este

utilizat un soft.

În ultimii ani, au apărut pe piață programe pentru aproape toate clasele de probleme întâlnite în gestionarea apelor subterane. Unele programe sunt foarte cuprinzătoare și pot simula o varietate de probleme specifice, în timp ce altele sunt adaptate pentru probleme specifice.

Foarte multe dintre aceste programe sunt disponibile în domeniul public, dar sunt foarte costisitoare. În prezent au fost dezvoltate sau adaptate softuri pentru microcalculatoare.

În funcție de tehnica aleasă în rezolvarea model matematic, există mai multe tipuri de metode numerice (Bear 1992) :

- Metoda Diferențelor Finite
- Metoda Elementelor Finite
- Metoda Volumului Finit
- Metoda Elementului Limită
- Metoda Particulelor de Urmărire (Metoda drumului aleator)
- Metoda Caracteristicilor

Fiecare dintre metode are avantaje și dezavantaje, discutate în literatura de specialitate. Nu se cunoaște o analiză comparativă a acestor metode care să permită luarea unei decizii cu privire la aplicarea uneia sau a altor metode

Cele mai utilizate metode numerice de rezolvare a ecuațiilor cu derivate parțiale sunt: Metoda Diferențelor Finite și Metoda Elementelor Finite, în care domeniul este împărțit în celule (elemente).

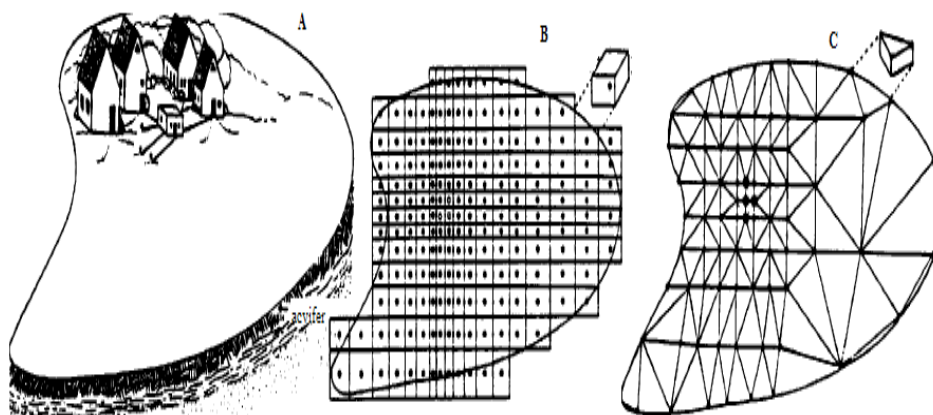


Fig 4.17 Reprezentarea domeniului prin diferențe și elemente finite

Sursa: Koch, 1989

La metoda Random Walk (a drumului aleator) ecuația de transport are atât o componentă hiperbolică (advecția) cât și o componentă parabolică (dispersia), deci rezolvarea numerică este foarte dificilă.

Alte metode sunt: Metoda Volumelor Finite (aparține grupului de discretizare), Metoda Caracteristicilor și Metoda Elementului Limită.

O metodă numerică des folosită în soluționarea problemelor de transport este Metoda Diferențelor Finite.

La rezolvarea problemelor prin această metodă, zona studiată este împărțită în celule, ecuațiile ce descriu curgerea și transportul sunt variabile în spațiu și timp.

Etapele parcurse prin Metoda Diferențelor Finite

- Alegerea domeniului
- Discretizarea domeniului (după un anumit pas de discretizare)
- Aproximarea ecuațiilor cu derivate parțiale care descriu metoda (transformarea lor în sistem algebric)
- Stabilirea condițiilor inițiale și de margine
- Soluții numerice pentru sistemul algebric

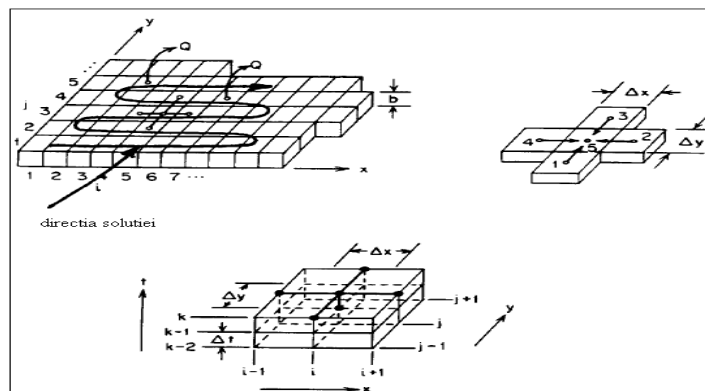


Fig 4.18 Notății pentru cazul 2D de discretizare, Metoda Diferențelor Finite

Sursa: Koch 1989

Ecuția de transport pentru cazul 1D Metoda Diferențelor Finite are următoarea expresie

$$D_L \frac{c_{i+1}^j - 2c_i^j + c_{i-1}^j}{\Delta x^2} - v \frac{(c_i^j - c_{i-1}^j)}{\Delta x} = \frac{c_i^{j+1} - c_i^j}{\Delta t} \quad (4.14)$$

În fig. 4.18 este un exemplu de discretizare pentru cazul 2D, concentrațiile sunt discretizate și se calculează în funcție de nodurile învecinate. Spre exemplu concentrația în nodul 5, prin Metoda Diferențelor Finite se calculează în funcție de celulele alăturate astfel c_5 devine c_{ij} , c_4 devine $c_{i-1,j}$, c_2 devine $c_{i+1,j}$ și c_3 este $c_{i,j-1}$.

Metoda Diferențelor Finite poate fi întâlnită sub trei aspecte: implicit, explicit și Crank-Nicholson. (fig.4.19)

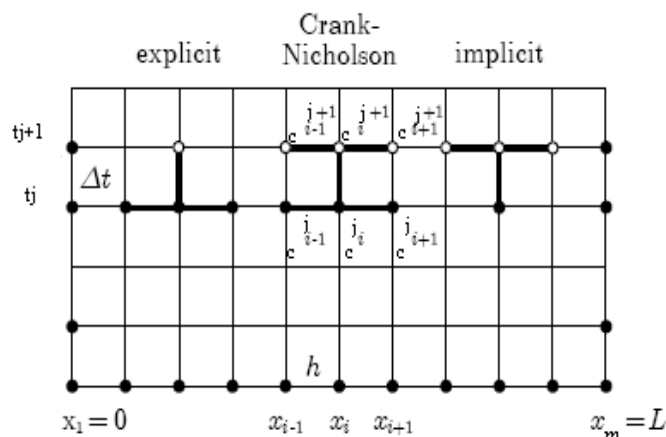


Fig. 4.19 Discretizarea unui acvifer în funcție de spațiu și timp

Pentru o rezolvare numerică a sistemelor algebrice se pot folosi metode directe (pentru sisteme liniare de ordinul $n < 10^3$) sau iterative (pentru sisteme liniare de ordinul $n = 10^6$).

Metodele directe sunt convergente, dar necesită timp și spațiu mare pentru calcul, metodele iterative necesită spațiu mic și sunt afectate de stabilitate.

Metode directe sunt Gauss, Cholesky și Crout. Aceste metode transformă forma implicită într-o matrice triunghiulară, prin eliminarea consecutivă a necunoscutelor și apoi rezolvarea ecuațiilor folosind substituția inversă.

Metoda eliminării Gauss este cea mai simplă metoda directă, care cere circa $(2/3) \cdot n^3$ operații aritmetice.

Pentru sisteme mari de ecuații se vor lua în calcul metodele iterative. Următoarele proceduri iterative pot fi utilizate:

Metoda Jacobi (dacă condiția de convergență este satisfăcută, atunci și soluția căutată va converge spre soluția reală, indiferent de valoarea aproximației inițiale)

Metoda Gauss-Seidel (avantajul acestei metode îl constituie creșterea vitezei de convergență datorită reducerii numărului total de iterații necesare)

ADI-FDTD (Iterative Alternating-Direction-Implicit Finite-Difference Time-Domain Method)

PCG (Preconditioned Conjugate Gradient Method)

Rezolvarea problemelor neliniare, (degradarea neliniară, descompunerea sau adsorbția) necesită subiterare și în aceste situații se folosesc metodele iterative: iterațiile Picard și metoda lui Newton

Metoda Random Walk

Metoda Diferențelor Finite rezolvă ecuațiile cu derivate parțiale prin dezvoltarea în serie Taylor. Atunci când rezolvarea ecuațiilor întâmpină anumite restricții (dispersia numerică, stabilitate, convergență), o alternativă este metoda Random Walk.

Random Walk este o metodă de modelare Lagrangian care descrie dispersia poluanților printr-un proces caracterizat de un număr de particule care se deplasează aleator.

Random Walk

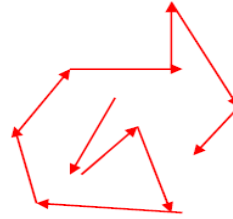


Fig. 4.20 Direcția de deplasare a unei particule prin metoda RW

Sursa: Hulin, 2005

Fiecare particulă reprezintă o parte din masa totală a concentrației. și realizează două tipuri de mișcări advecția și dispersia.(fig.4.21)

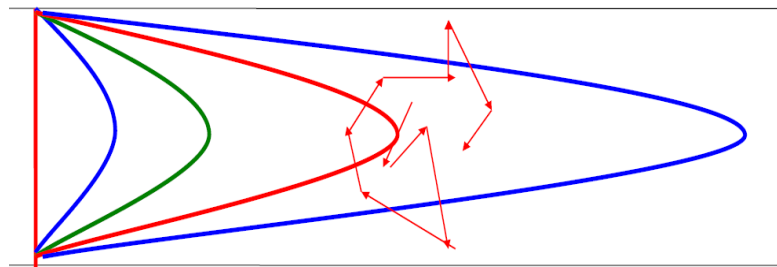


Fig. 4.21 Transportul convectiv - dispersiv prin metoda RW

Sursa: Hulin, 2005

Avantajul metodei constă în lipsa dispersiei numerice și stabilității, dezavantajul este dat de fluctuațiile concentrației dependente de numărul de particule.

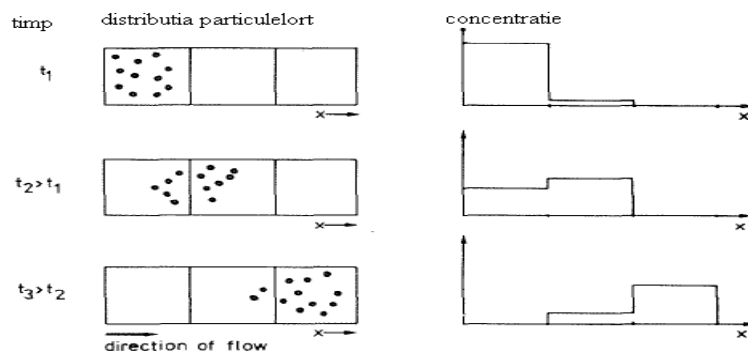


Fig. 4.22 Fluctuații ale concentrației prin metoda RW

Sursa: Kinzelbach, 1990

Metoda Monte Carlo a cărei denumire este după faimosul cazinou din Monaco.

Această metodă combină caracterul aleator al metodei Random Walk cu procesele stohastice prin intermediul teoriei numerelor, probabilităților și statisticilor. Este o metodă stohastică larg răspândită (de la economie, fizică nucleară, transport în mediu poros, până la reglementarea traficului rutier), aplicarea ei fiind diferită de la domeniu la domeniu.

Bazele metodei au fost puse în a doua jumătate a secolului XIX, principiul metodei constă în generarea unui număr aleator și utilizarea numărului obținut pentru extragerea unei valori din distribuția de probabilitate care descrie comportamentul variabilei probabilete. (http://www.contabilizat.ro/file/cursuri_de_perfectionare/management_si_marketin_g/simulari_in_afaceri/cap2.pdf)

Deși foarte simplă în concept, metoda Monte Carlo furnizează soluții aproximative pentru o mare varietate de probleme matematice. O caracteristică importantă a metodei Monte Carlo constă în faptul că dintre metodele numerice care se bazează pe evaluarea a n puncte într-un spațiu m dimensional, pentru a obține o soluție aproximativă, metoda Monte Carlo permite estimări a căror eroare absolută descrește cu $n^{-1/2}$ pe când toate celelalte estimări au erori ce descreșc cu $n^{-1/m}$ cel mult. În plus, timpul de lucru al metodei Monte Carlo crește polinomial cu numărul de variabile m , pe când la alte metode timpul de lucru crește exponențial în raport cu m . (http://www.contabilizat.ro/file/cursuri_de_perfectionare/management_si_marketing/simulari_in_afaceri/cap2.pdf)

Programul ASMWIN (utilizat în teză) folosește metoda Monte Carlo pentru o abordare stohastică a transportului în medii neomogene. Pentru a prezenta variația spațială a conductivității hidraulice se folosește Field Generator, aplicat după ce modelul curgerii s-a realizat.

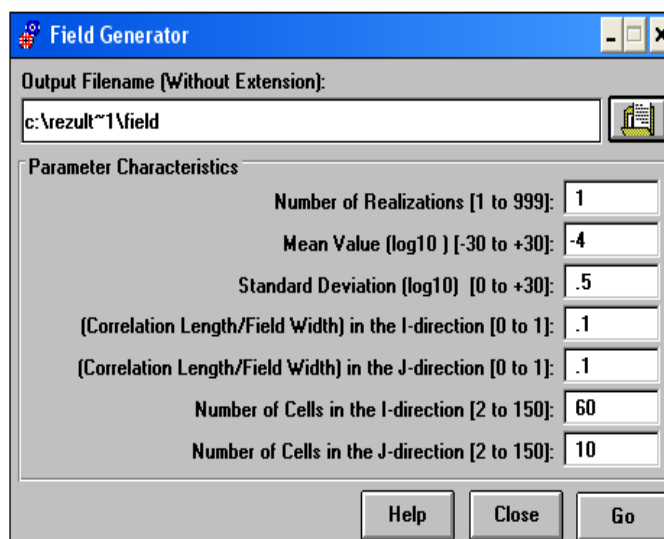


Fig. 4.24 Parametrii de intrare pentru programul ASMWIN, modelarea stohastică

Datele de intrare sunt prezentate în fig. 4.24

- Numărul de iterații
- În k , se utilizează simulări pentru fiecare k ,
- Probabilitatea statistică reprezentată de

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2}{n}} \quad (4.15)$$

- Corelațiile pe direcțiile i și j
- Lungimea domeniului modelat

Un exemplu de reprezentare a variației conductivității hidraulice prin metoda Monte Carlo este redat în figurile 4.25 și 4.26.

În fig 4.25 avem domeniul folosit la modelare cu distribuția celor două conductivități, iar în fig 4.26 se observă variația conductivității obținută prin metoda Monte Carlo.



Fig. 4.25 Domeniu neomogen

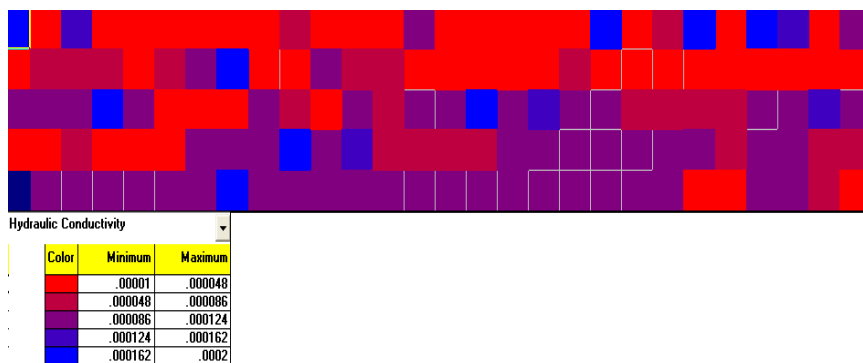


Fig. 4.26 Distribuția conductivității prin metoda Monte Carlo

Programul ASMWIN permite până la 999 de simulări pentru o situație. Această metodă nu este în amănunt studiată în teză, este doar amintită, principiul de bază fiind distribuția logaritmică a lui k

V. CONTRIBUȚII PRIVIND APLICAREA MODELELOR DE SIMULARE A PROCESELOR DE TRANSPORT ÎN ACVIFERE

Sunt puține domenii în care ignoranța noastră este atât de profundă

McKee, J.E., Groundwater contamination, Cincinnati, Ohio 1961

V. 1 Analiza comparativă între metodele Diferențe finite și Random Walk

Metodele Diferențe Finite și Random Walk folosesc discretizarea spațială, care poate influența semnificativ rezultatele simulării. Random Walk are o sursă suplimentară de eroare prin numărul de particule în care este distribuită masa de poluant. Fiecare dintre metode are avantaje și dezavantaje, discutate în literatura de specialitate.

Domeniul folosit pentru a face o comparație între cele două metode (Diferențe finite și Random Walk) este prezentat în figura 5.1.

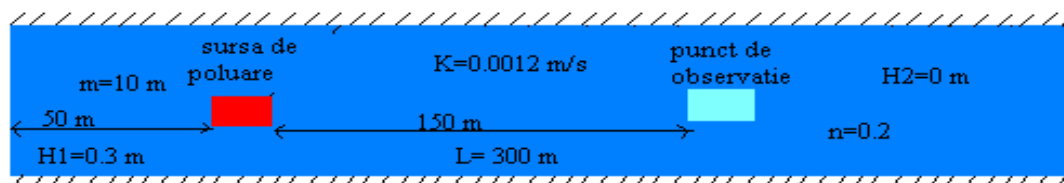


Fig. 5.1 Domeniul folosit pentru studiu comparativ între metodele de modelare

Tabelul 8

Parametrii folosiți pentru analiza comparativă a metodelor de modelare

Parametrii de intrare pentru curgere		Parametrii de ieșire pentru curgere
Pasul de discretizare	$\Delta x = \Delta y = 10 \text{ m}$	Hidroizohipsele Viteze de curgere
Tipul de acvifer	Sub presiune	
Grosimea acviferului	10 m	
Gradientul hidraulic	0.001	
Nivelurile de apă	$H_1 = 0.3 \text{ m}, H_2 = 0 \text{ m}$	
Conductivitatea hidraulică/Transmisivitatea	$K = 0.0012 \text{ m/s}, T = 0.012 \text{ m}^2$	
Porozitatea	0.2	
Viteza	$6 \cdot 10^{-6} \text{ m/s}$	Parametrii de ieșire pentru transport
Parametrii de intrare pentru transport		
Puncte de observație	La 150 m sursa	

78 Contribuții privind aplicarea modelelor de simulare - V

Sursa de poluare	La 50 m $x=0$ $M = 1.15 \cdot 10^{-5}$ kg/s	Variații ale concentrației
Timpul de modelare	$T=3.456 \cdot 10^7$, $\Delta t = 34560s$	
Coeficient de dispersie	$\alpha_L = 10$ m, $\alpha_T = 1$ m, $\Delta_L = 6 \cdot 10^{-5}$, $Pe=1$	
Factor de degradare	1	

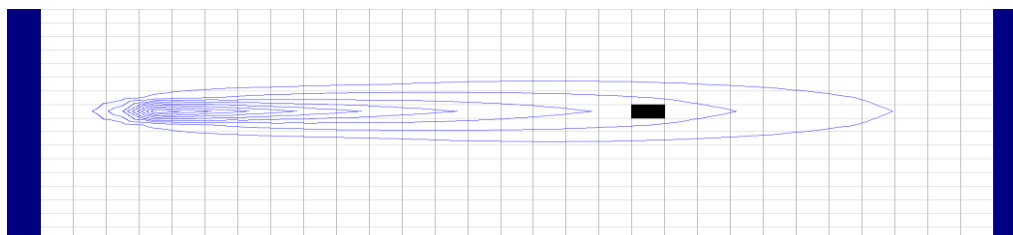


Fig. 5.2 Domeniu discretizat și distribuția poluantului prin metoda Diferențelor Finite

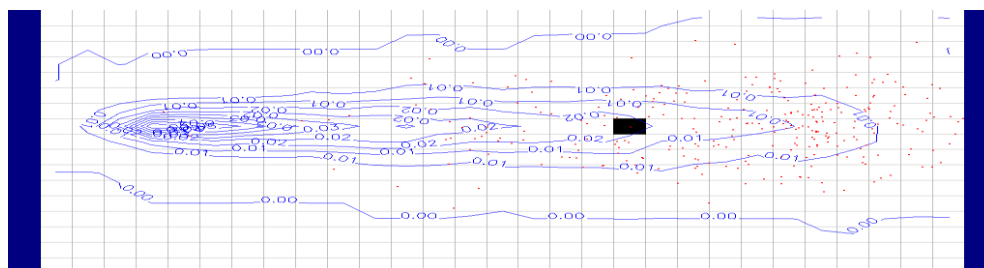


Fig. 5.3 Domeniu discretizat și distribuția poluantului prin metoda Random walk

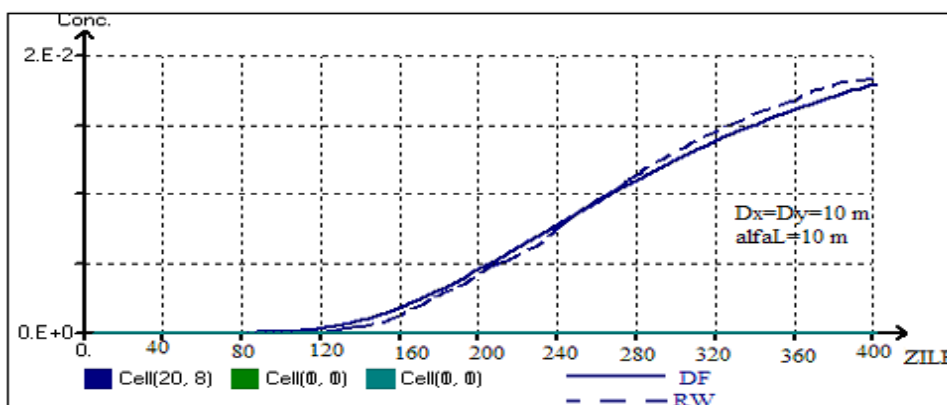


Fig. 5.4 Relațiile între cele 2 metode folosite: Diferențe finite și Random walk

Rezultatele obținute prin modelarea transportului într-un acvifer sub presiune sunt redate în fig. 5.4, în care se observă efectul dispersiei numerice, prezent la metoda Diferențe Finite, rezultat din rotunjirile făcute la dezvoltarea în serie Taylor a ecuației de transport.

În fig.5.2 sunt reprezentate curbele de egală concentrației prin Metoda Diferențelor Finite, iar în fig. 5.3 curbele de egală concentrației prin metoda drumului aleator.

V.2 Experimente numerice vizând analiza influenței neomogenității parametrilor hidrogeologici asupra proceselor din acvifer și asupra rezultatelor simulării.

Pentru a analiza influența parametrilor hidrogeologici asupra rezultatelor modelării s-au folosit datele de intrare din tabelul 9.

Tabelul 9

Datele de intrare folosite pentru analiza influenței neomogenității asupra transportului poluanților

Pasul de discretizare	variabil
Tipul de acvifer	Cu nivel liber
Grosimea acviferului	10 m
Gradientul hidraulic	0.016
Nivelurile de apa	H1=9 m, H2=8 m
Conductivitatea hidraulică/Transmisivitatea	variabile
Puncte de observație	La situate la 10m , 30m și 55 de sursa
Sursa de poluare	$C_0 = 3 \text{ kg/m}^3$
Timpul de modelare	$T = 1 \text{ an}$
Coeficient de dispersie	$\alpha_L = 10 \text{ m}$,
Factor de degradare	1

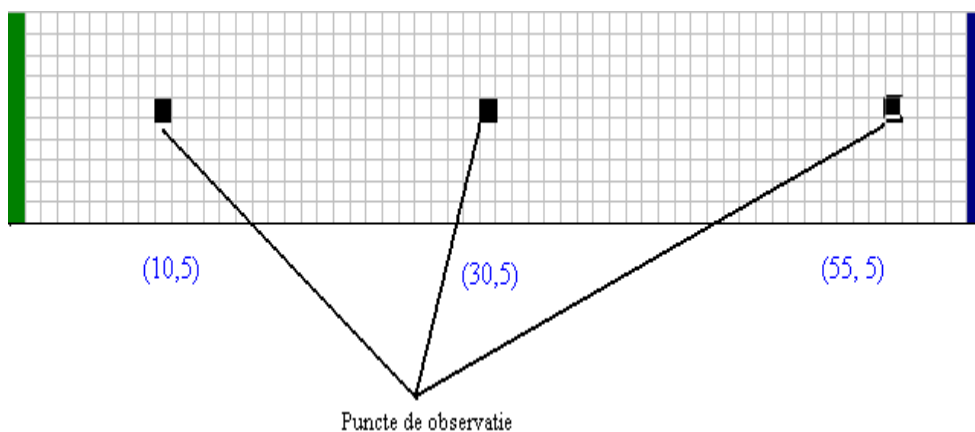


Fig.5.5 Localizarea punctelor de observație pentru studiul influenței parametrilor hidrogeologici

V.2.1 Studiul influenței porozității

Pentru a studia influența porozității s-au analizat situațiile:

a) situația în care avem o singură porozitate de 0.15, curgerea este paralelă cu direcția de distribuție a porozității (fig.5.6), sursa de poluare este permanentă și variația se observă în 3 puncte de observație.(fig.5.5). Variația concentrației în punctele de observație este reprezentată în fig, 5.7.

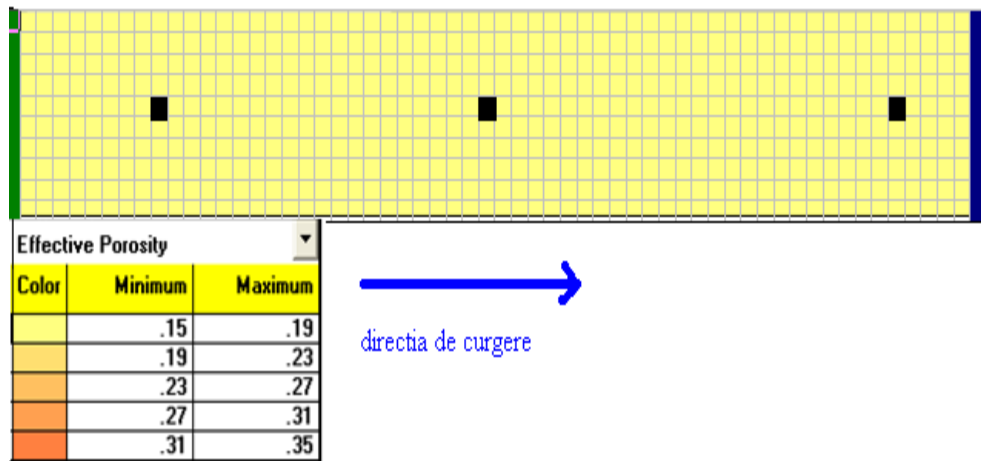


Fig 5.6 Distribuția porozității, n constant

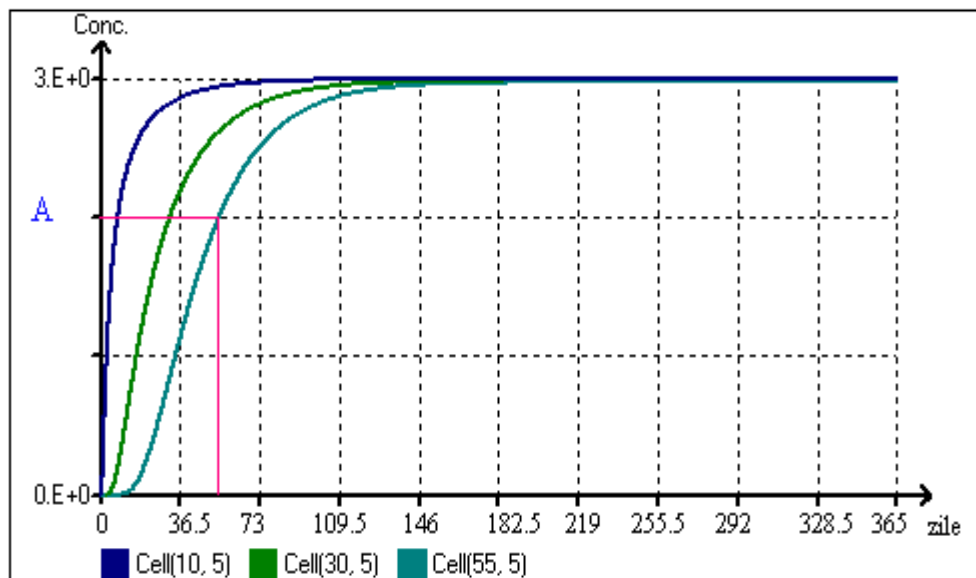


Fig. 5.7 Variația concentrației, n constant și paralel cu direcția de curgere

Fig. 5.6 reprezintă distribuția porozității în domeniu studiat, iar fig 5.7 reprezintă variația concentrației în cele 3 puncte de observație.

b) situația în care avem 5 porozități, curgerea este perpendiculară pe distribuția porozității (fig.5.8), sursa de poluare este permanentă și variația se observă în 3 puncte.

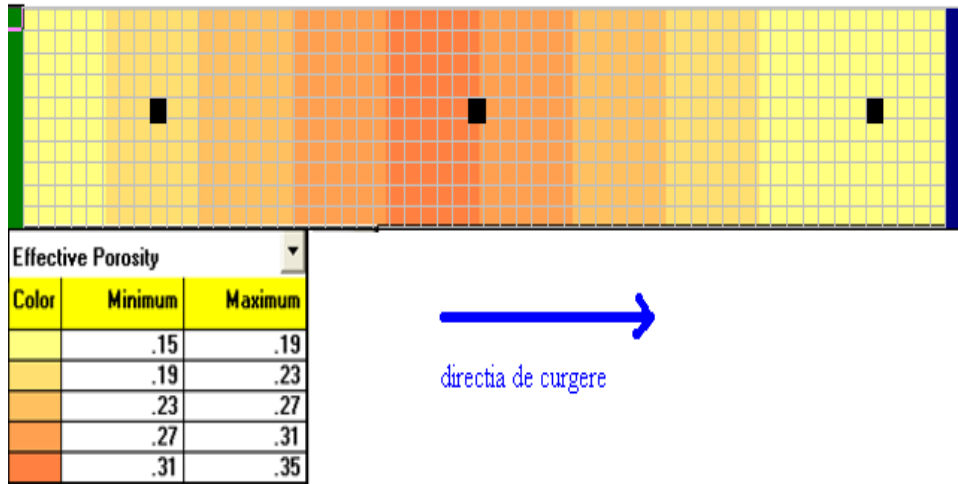


Fig 5.8 Distribuția porozității perpendicular pe direcția de curere

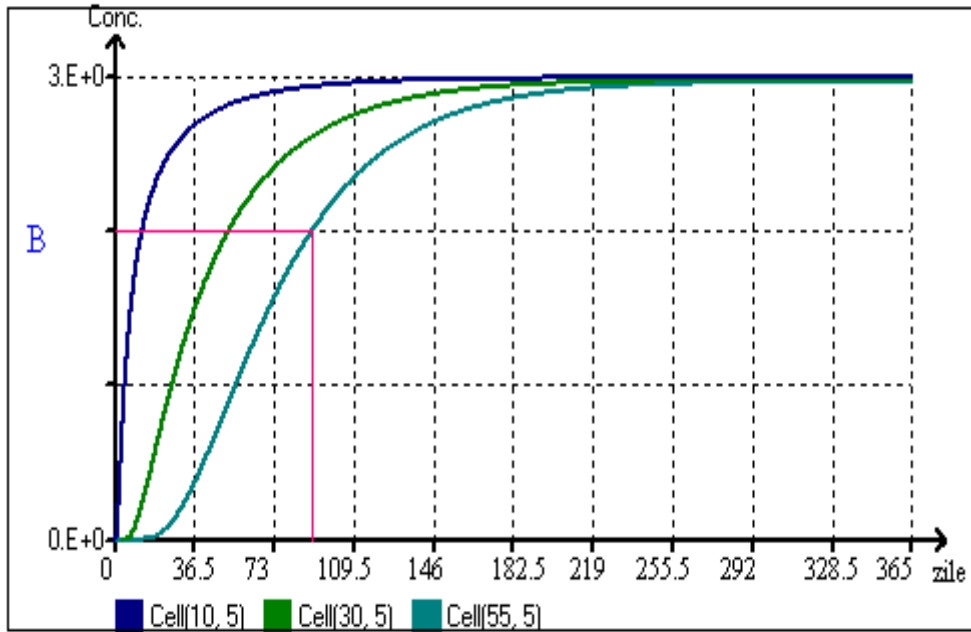


Fig. 5.9 Variația concentrației, n variabil și perpendicular pe direcția de curgere

Fig. 5.8 reprezintă distribuția porozității în domeniu studiat, iar fig 5.9 reprezintă variația concentrației în cele 3 puncte de observație.

c) situația în care avem 5 porozități, curgerea este paralelă cu distribuția porozității (fig.5.10), sursa de poluare este permanentă și variația se observă în 3 puncte de observație.

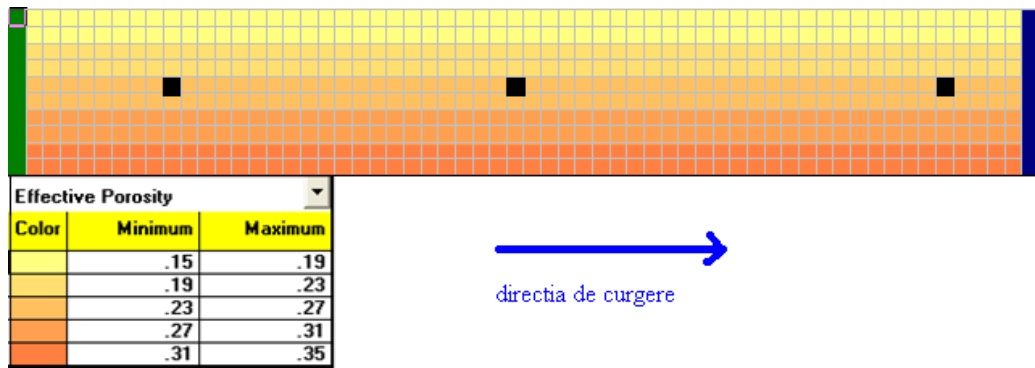


Fig 5.10 Distribuția porozității paralelă cu direcția de curgere

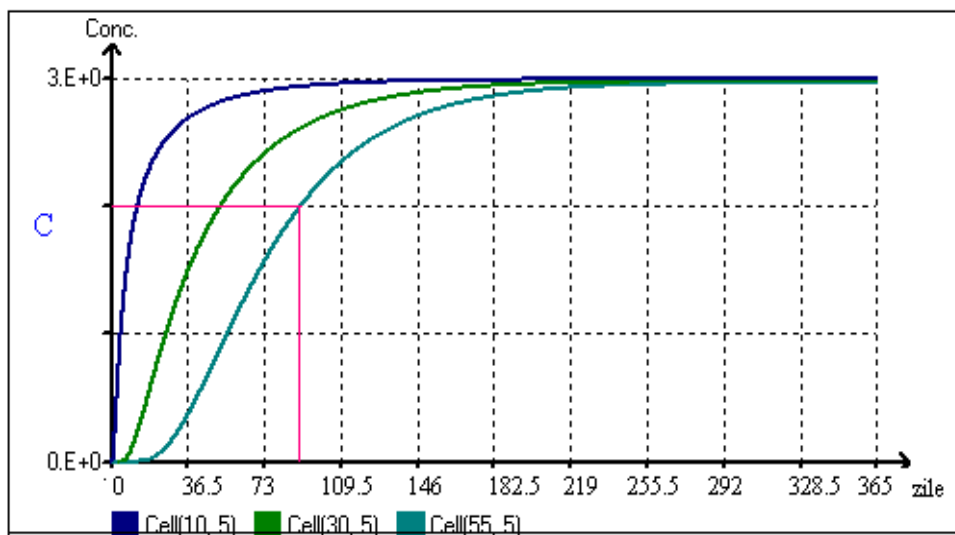


Fig. 5.11 Variația concentrației, n variabil și paralel cu direcția de curgere

Fig. 5.10 reprezintă distribuția porozității în domeniu studiat, iar fig 5.11 reprezintă variația concentrației în cele 3 puncte de observație.

Concluzii referitoare la influența porozității asupra rezultatelor simulării

Pentru a analiza comparativ cele trei grafice am folosit punctul de observație de coordonate (55, 5) și graficele de distribuție le-am notat cu A, B și C. Între graficele B și C nu se observă diferențe în distribuția poluantului, comparate cu A (n constant) poluantul are o întârziere în distribuție de aproximativ 36,5 zile.

V.2.2 Influența conductivității hidraulice asupra proceselor din acvifer

Pentru a arăta influența conductivității hidraulice asupra proceselor din acvifer s-au realizat următoarele scenarii:

d) situația în care avem o singură conductivitate de 0.0001 m/s , curgerea este paralelă cu direcția de distribuție a conductivității (fig.5.12), sursa de poluare este permanentă și variația se observă în 3 puncte de observație. Variația concentrației în punctele de observație este reprezentată în fig, 5.13.

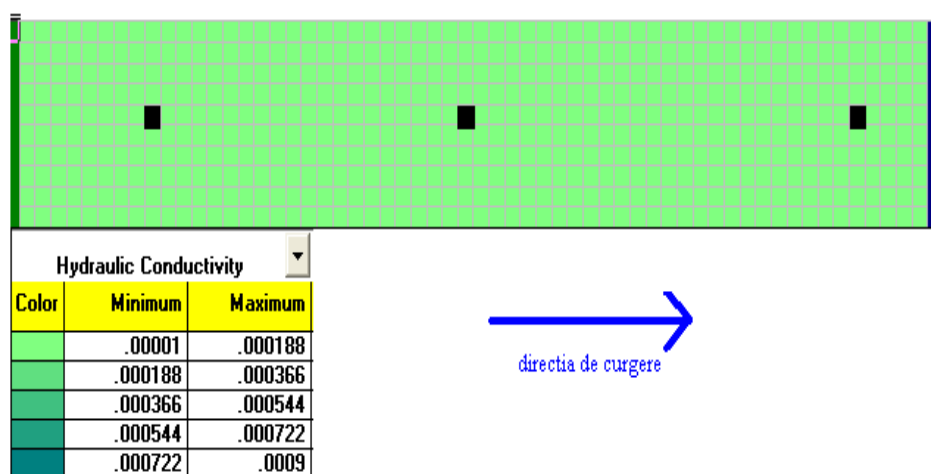


Fig.5.12 Distribuția conductivității, k constant

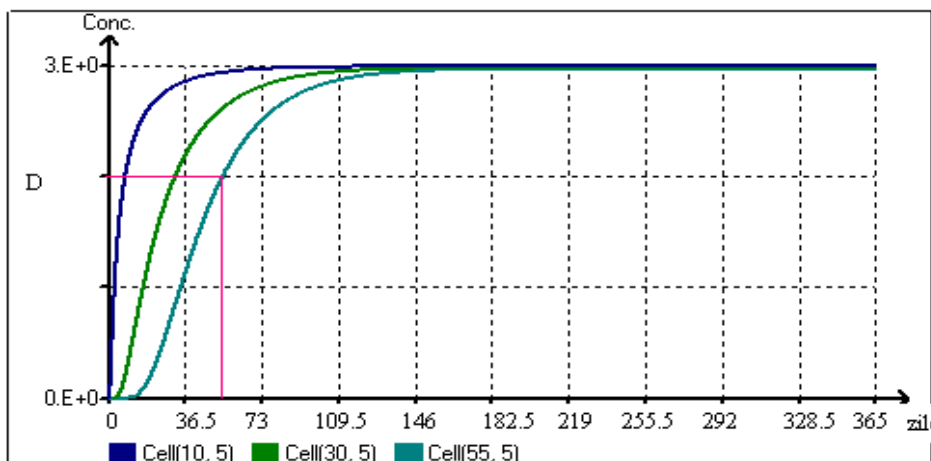


Fig. 5.13 Variația concentrației, k constant

Fig. 5.12 reprezintă distribuția conductivității în domeniu studiat, iar fig 5.13 reprezintă variația concentrației în cele 3 puncte de observație.

e) situația în care avem 5 conductivități hidraulice, dispuse orizontal, din 2 în 2 m, curgerea este paralelă cu stratul (fig.5.14), sursa de poluare este permanentă și variația se observă în 3 puncte de observație ;

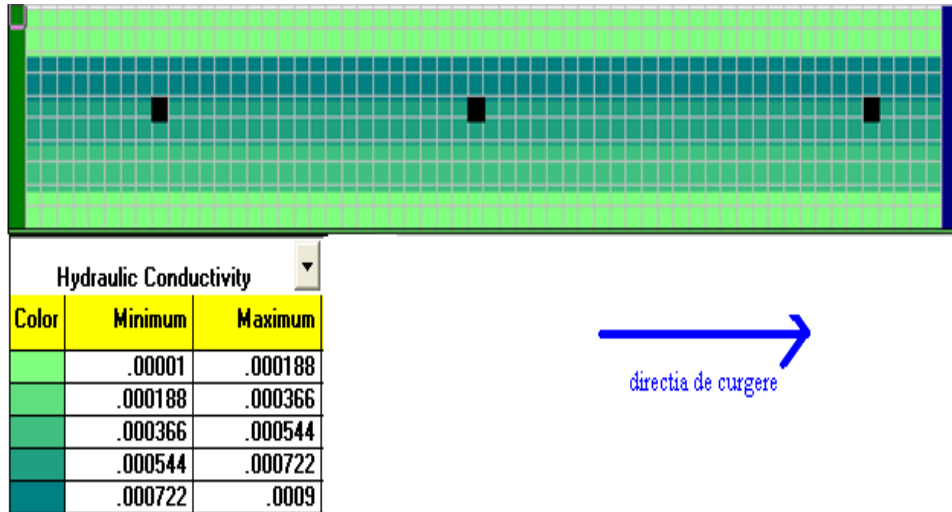


Fig.5.14 Distribuția conductivității paralel cu direcția de curgere, k variabil, n constant

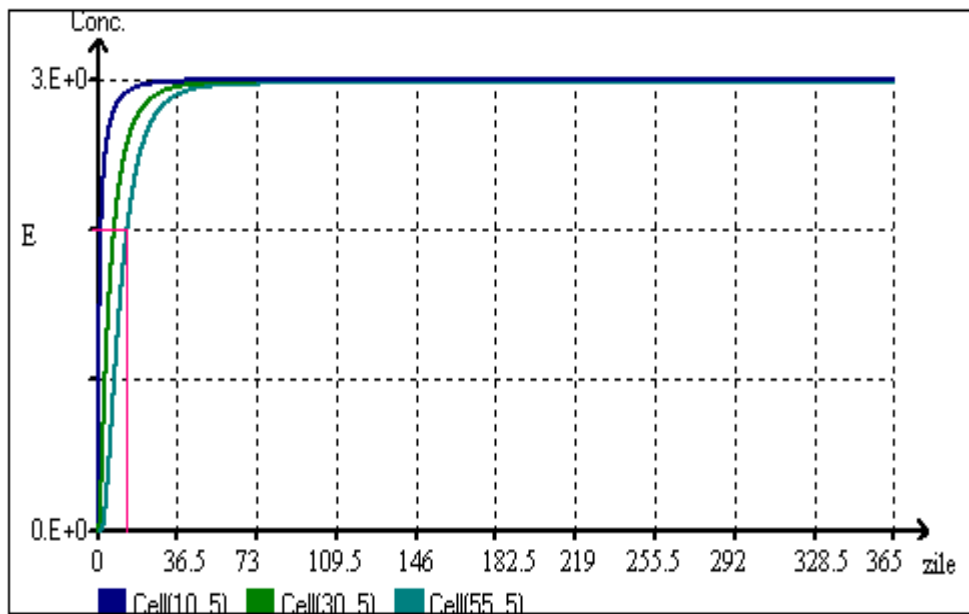


Fig. 5.15 Variația concentrației, k variabil

f) situația în care avem 5 conductivități hidraulice, dispuse vertical pe direcția de curgere (fig.5.16), sursa de poluare este permanentă și variația se observă în 3 puncte de observație;

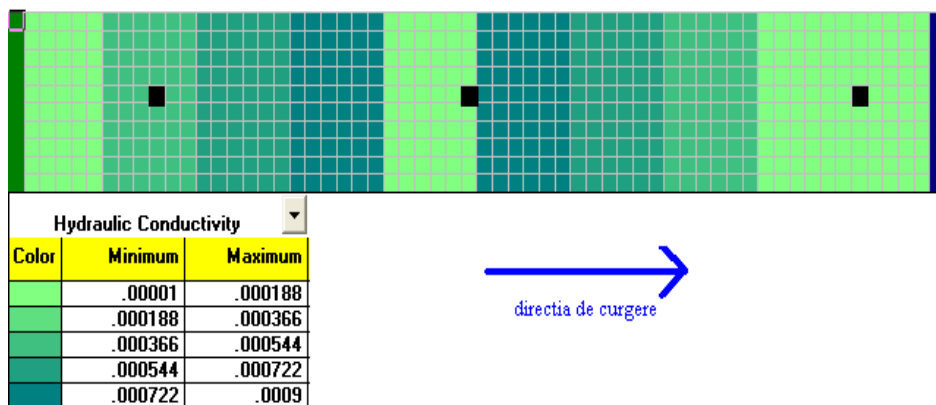


Fig.5.16 Distribuția conductivității, k variabil, n constant

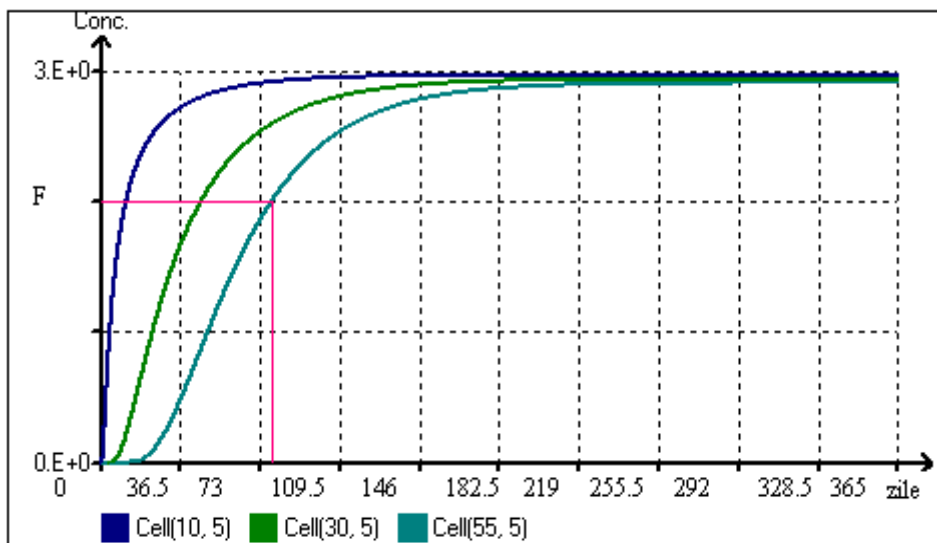


Fig.5.17 Variația concentrației, sursa permanentă, K variază, n constant

Concluzii referitoare la influența conductivității hidraulice asupra rezultatelor simulării

Din analiza graficelor D, E, F au rezultat următoarele concluzii. Pentru cazul E (k paralel cu direcția de curgere) comparativ cu concentrația din graficul D (k constant, mediu omogen) se observă o grăbire în distribuția poluanților explicată prin faptul că valorile folosite pentru k sunt mai mari decât k constant. Pentru cazul F (comparat cu D, mediu omogen) se observă o întârziere în distribuția poluantului de aproximativ 50 zile, explicată prin orientarea lui k perpendicular pe direcția de curgere.

g) situația în care avem două valori k , cu două mărimi de ordine diferență între ele și paralele cu direcția de curgere ;

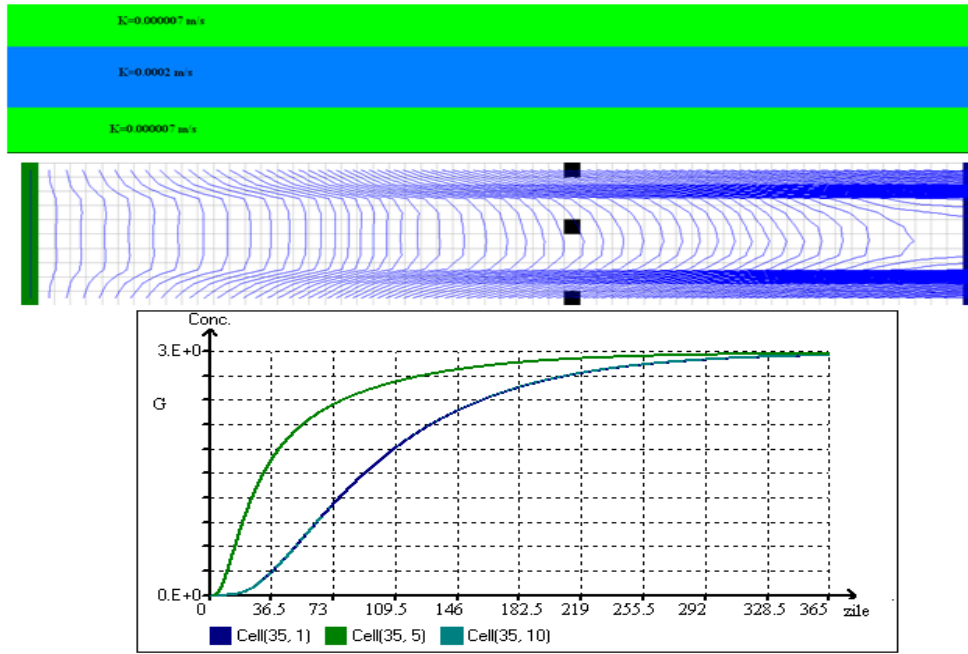


Fig.5.18. Variația concentrației, K variază și este paralel cu direcția de curgere

h) situația în care avem două valori k , cu două mărimi de ordine diferență între ele și cu distribuția ca în fig. 5.19 ;

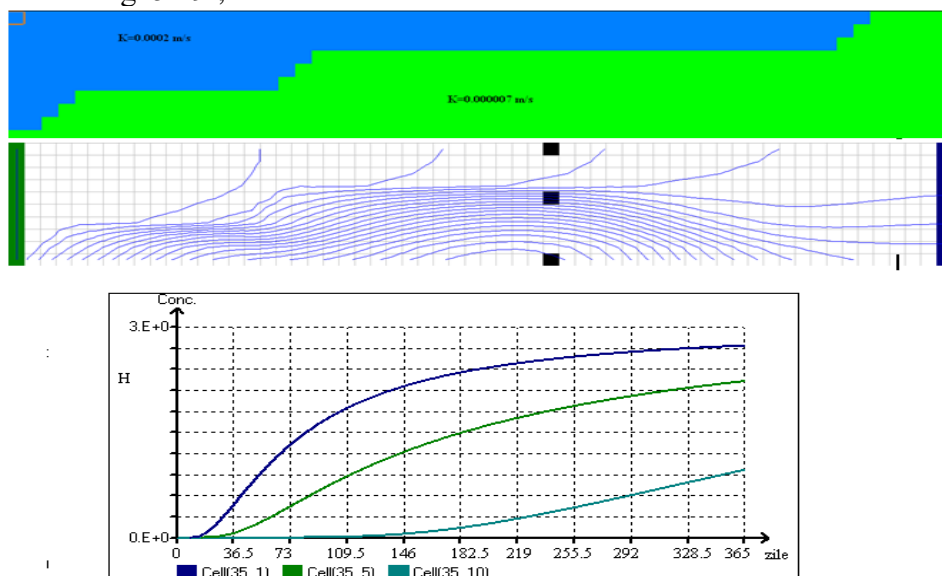


Fig.5.19 Variația concentrației, K variază

Concluzii referitoare la influența conductivității hidraulice asupra rezultatelor simulării

În figurile G și H s-au folosit două conductivități, cu 2 mărimi de ordine diferență pentru a pune în evidență efectul asupra distribuției de poluant și asupra rezultatelor simulării a conductivității hidraulice.

i) situația în care conductivitatea hidraulică este distribuită vertical și porozitatea orizontal (fig.5.20) cu direcția de curgere, sursa de poluare este permanentă și variația se observă în 3 puncte de observație.

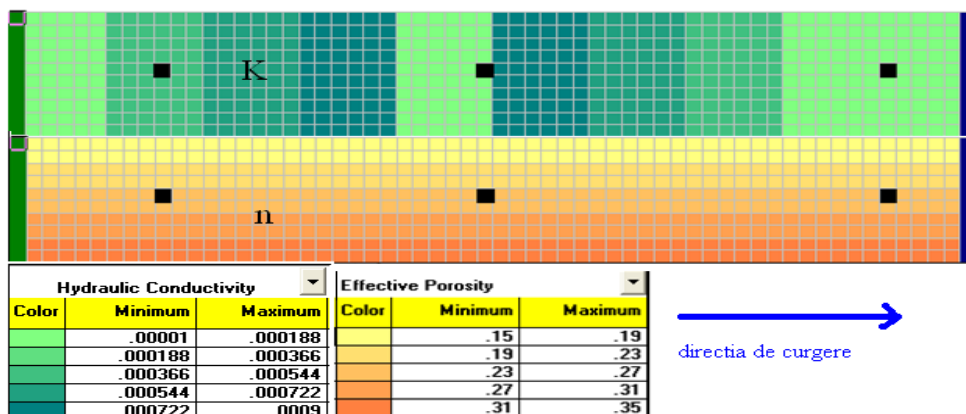


Fig. 5.20 Distribuția k și n , mediu neomogen

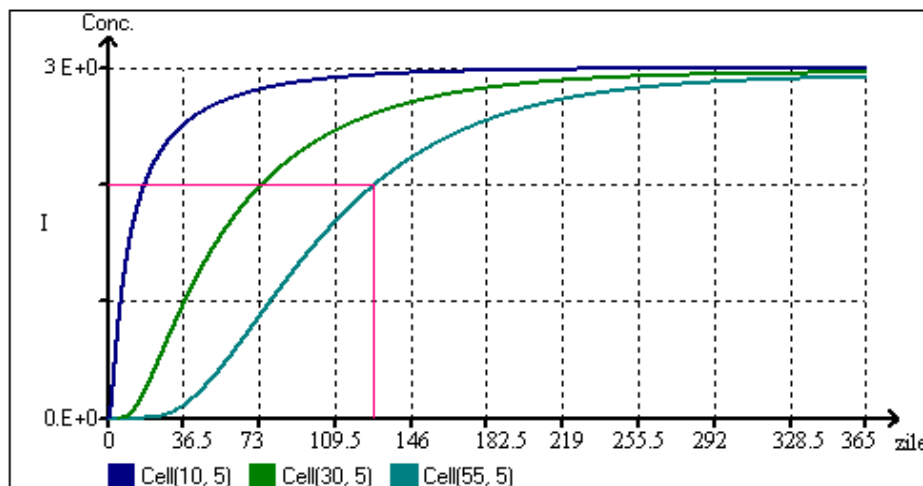


Fig. 5.21 Variația concentrației, k variabil, n variabil

Concluzii

În scenariile prezentate a fost analizată influența porozității și a conductivității hidraulice asupra transportului din acvifer, urmărindu-se și efectul parametrilor hidrogeologici asupra rezultatelor simulării.

Astfel s-au făcut rulări pentru mediu omogen, pentru situații în care porozitatea variază și conductivitatea hidraulica este constantă, pentru cazul în care conductivitatea hidraulica variază și porozitatea este constantă și pentru cazul în care ambii parametri variază.

Din graficul notat cu I (n variabil, k variabil) comparat cu A (sau D, mediu omogen, n const. k const.) se observă o întârziere în distribuția poluantului de aproximativ 80 zile pentru cazul I explicată prin variația lui n și k.

V.2.3 Influența vitezei asupra proceselor din acvifer

Pentru a studia influența vitezei am folosit domeniul neomogen (fig.5.22), și am realizat 3 scenarii, pentru viteze de $2,5e^{-6}$ m²/s, $1,6e^{-6}$ m²/s și $8,3e^{-7}$ m²/s.

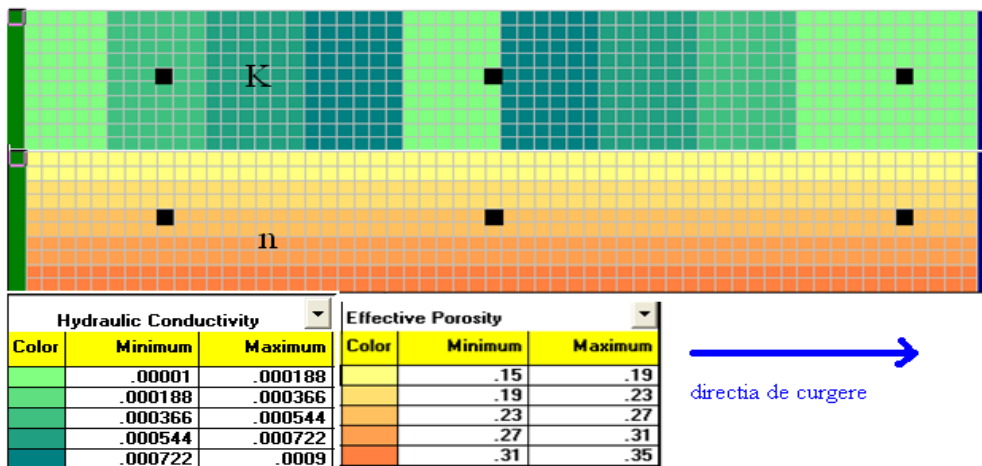


Fig.5.22 Domeniu folosit pentru studiul vitezei, k și n variabile

a) viteza este $2,5e^{-6}$ m²/s, variația curgerii este reprezentată în fig. 5.23

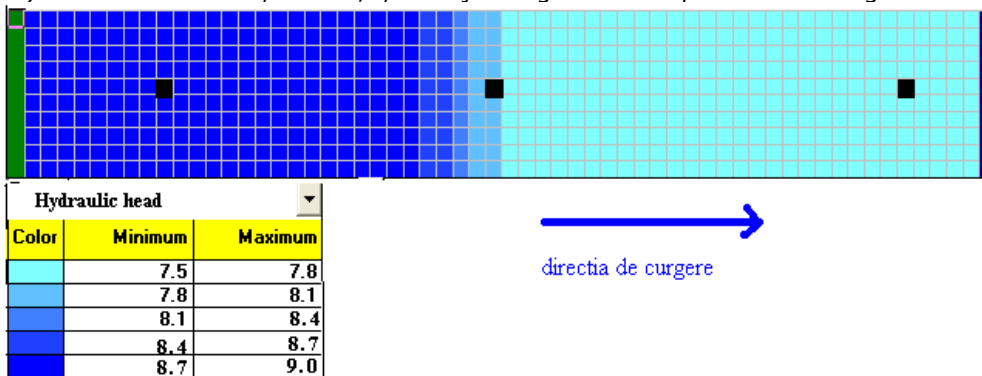


Fig. 5.23 Variația curgerii pentru viteză de $2,5e^{-6}$ m²/s

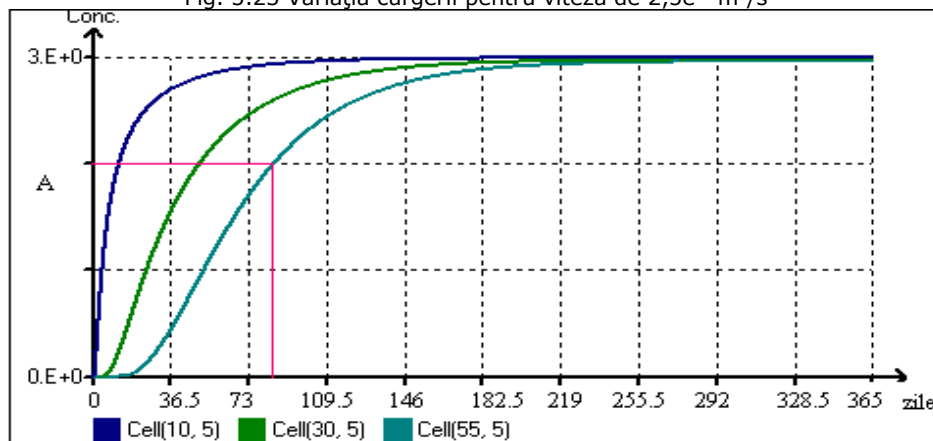


Fig.5.24 Variația concentrației pentru viteză de $2,5e^{-6}$ m²/s

b) viteza este $1.6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ și variația curgerii este reprezentată în fig. 5.25

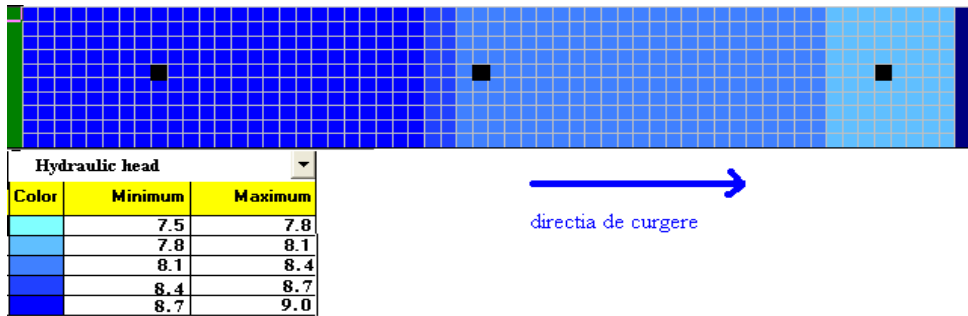


Fig. 5.25 Variația curgerii pentru viteză de $1,6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$

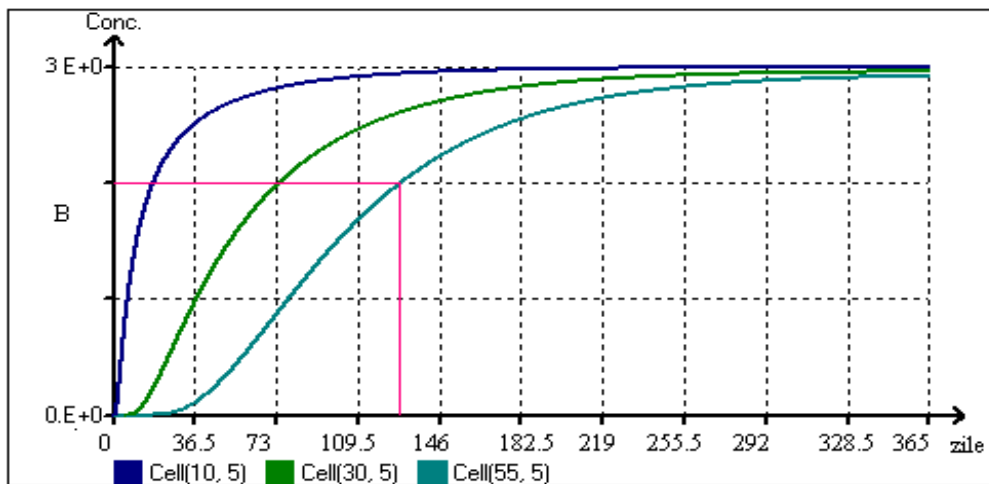


Fig.5.26 Variația concentrației pentru viteză de $1.6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$

c) viteza este $1.8 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ și variația curgerii este reprezentată în fig. 5.27.

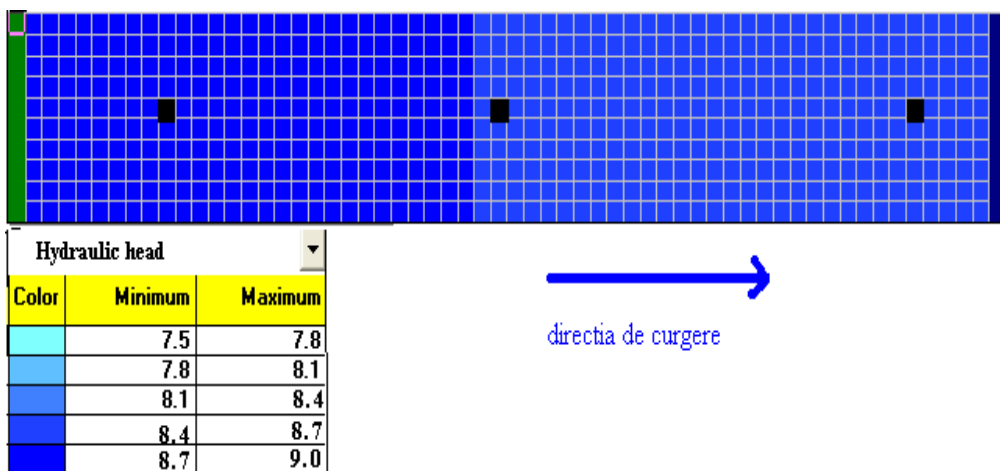


Fig. 5.27 Variația curgerii pentru viteză de $8.3 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$

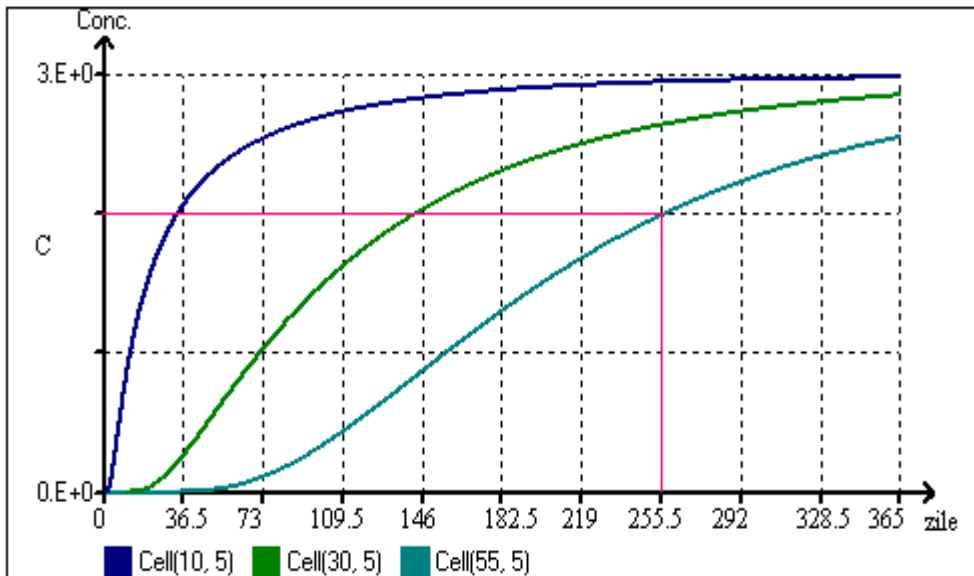


Fig.5.28 Variația concentrației pentru viteză de $8.3 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$

Concluzii referitoare la influența vitezei asupra rezultatelor simulării

În aceste scenarii am pus în evidență importanța vitezei asupra rezultatelor obținute prin modelare. Situațiile (B) și (C), comparate cu (A) indică o încetinire în transportul poluantului, pentru cazul (B) de aproximativ 36 zile și pentru cazul (C) de 180 zile, explicate prin scăderea vitezei.

V.2.4 Influența poziției sursei asupra proceselor din acvifer

Pentru a studia influența poziției sursei în transportul din acvifer am folosit domeniul neomogen (fig.5.29), și am realizat 3 scenarii. Pentru că cele mai evidente modificări se întâlnesc în punctul de coordonate (10,5), analiza între cele 3 grafice va lua în calcul variația concentrației în acest punct.

a) sursa ocupă o suprafață de 1 m^2 , și este poziționată cum se observă în fig.5.30.

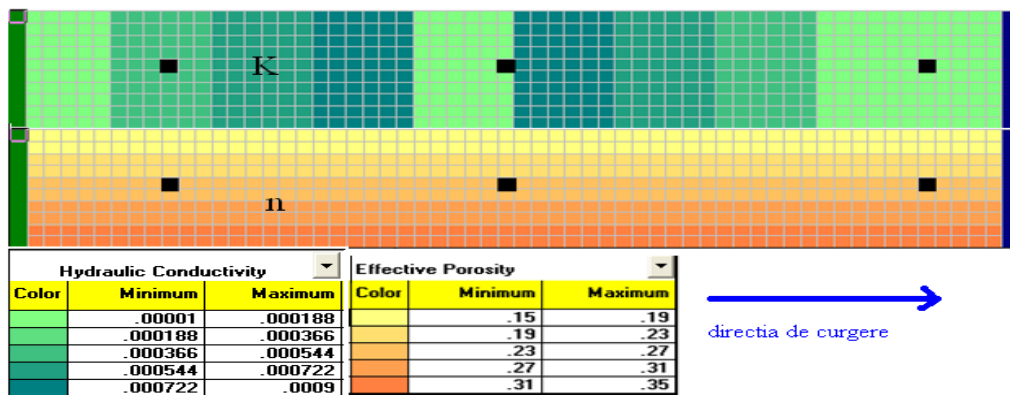


Fig.5.29 Domeniu folosit pentru studiul influenței sursei, k și n variabile

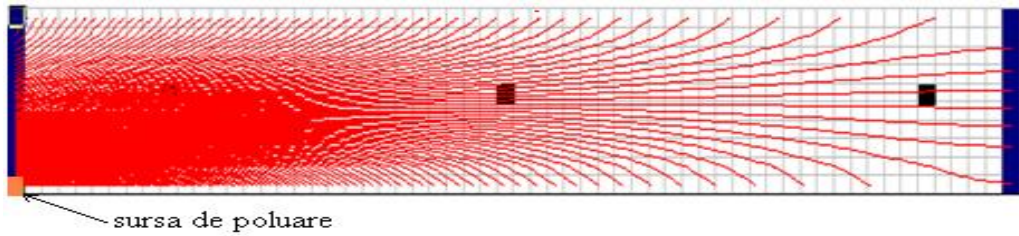


Fig.5.30 Localizarea sursei de poluare

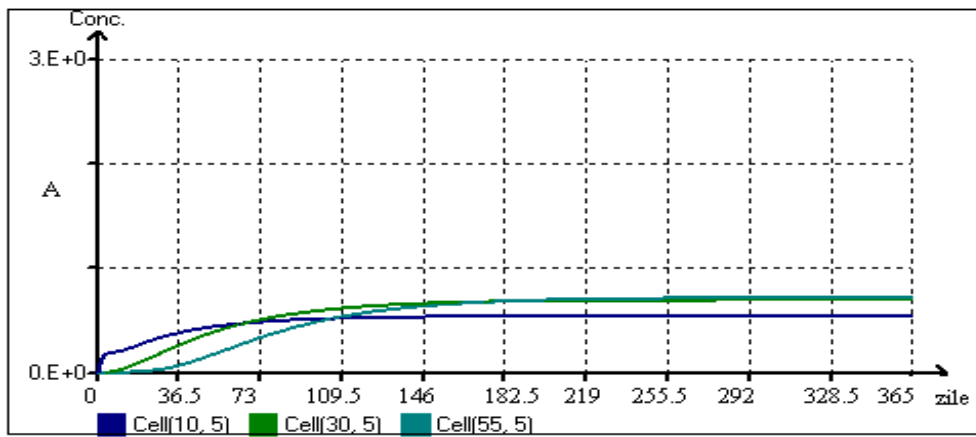


Fig. 5.31 Variația concentrației pentru o sursă de poluare ce ocupă o suprafață de 1 m²

b) sursa ocupă o suprafață de 5 m², și este poziționată cum se observă în fig.5.33

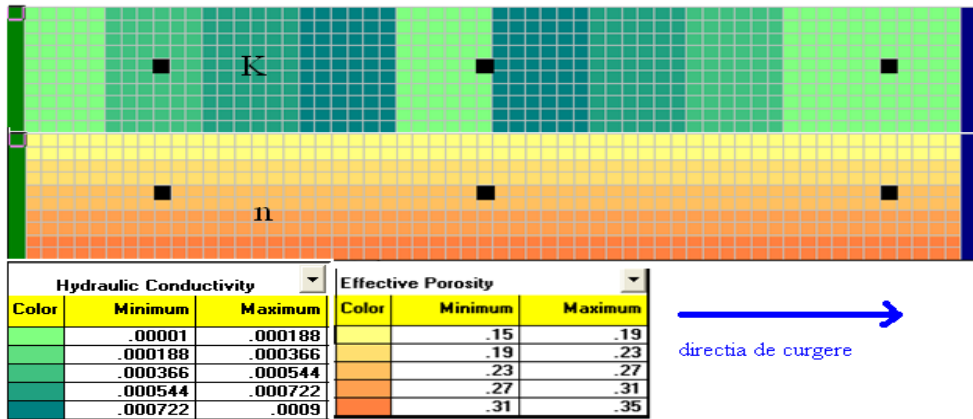


Fig.5.32 Domeniu folosit pentru studiul influenței sursei, k și n variabile

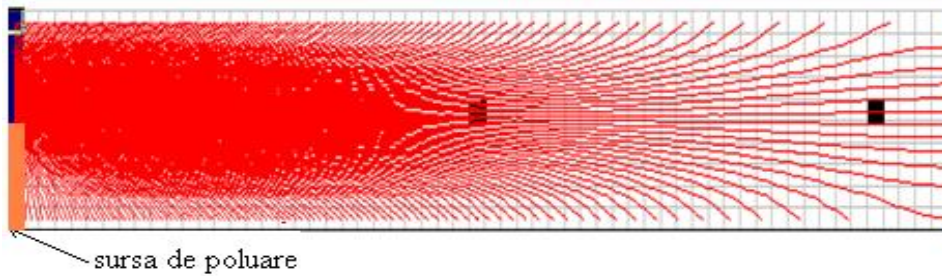


Fig.5.33 Localizarea sursei de poluare

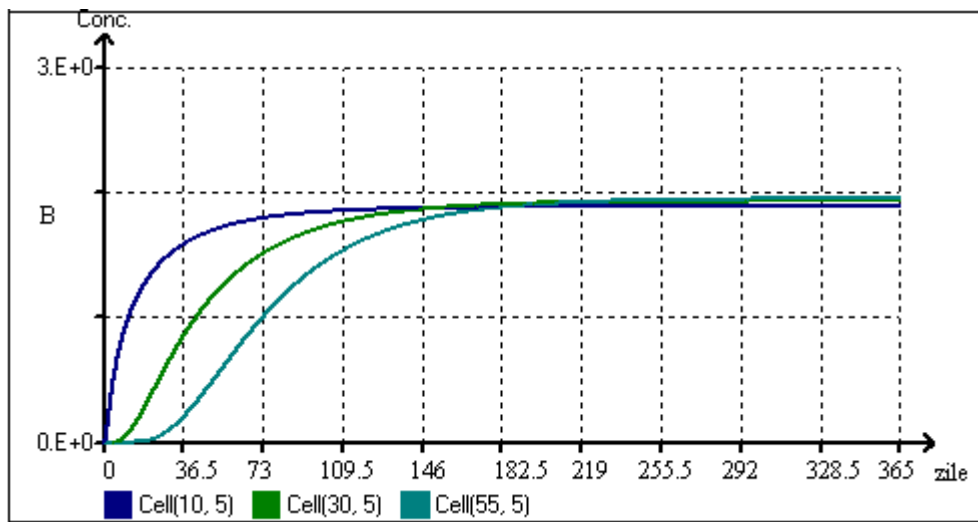


Fig. 5.34 Variația concentrației pentru o sursă ce ocupă o suprafață de 5 m²

c) sursa ocupă o suprafață de 5 m², și este poziționată cum se observă în fig.5.36

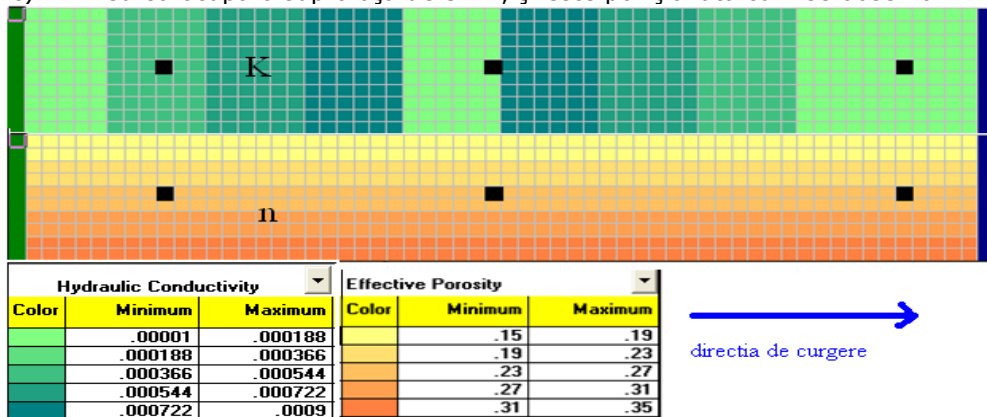
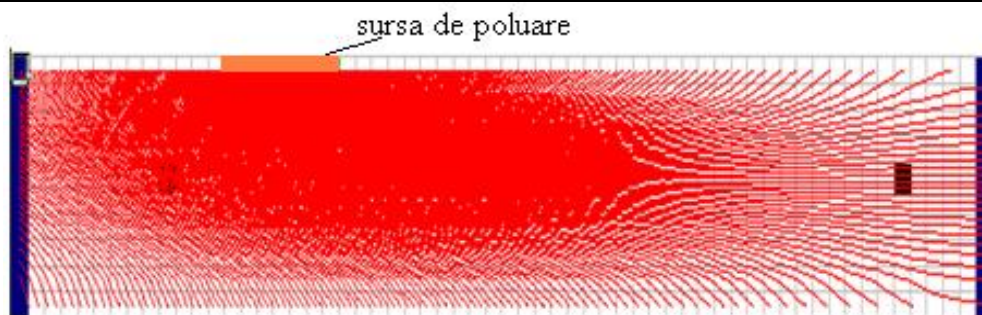
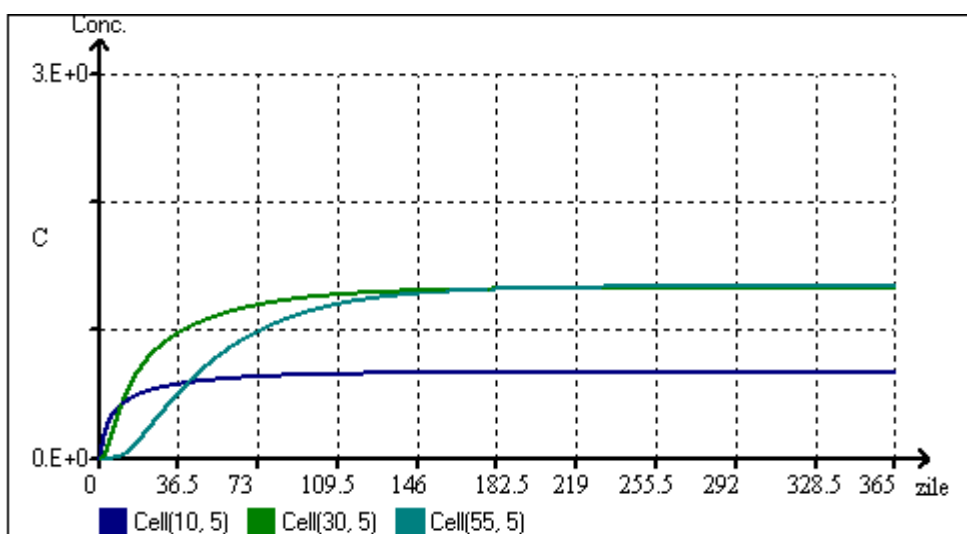


Fig.5.35 Domeniu folosit pentru studiul influenței sursei, k și n variabile

Fig. 5.36 Localizarea sursei de poluare (5 m²)Fig. 5.37 Variația concentrației pentru o sursă ce ocupă o suprafață de 5 m²
Concluzii referitoare la influența poziției sursei asupra rezultatelor simulării

Pentru cazul A (comparând variația concentrației în cele 3 puncte de observație) se observă că în punctul de coordonate (10, 5), după 73 de zile are loc o întârziere în distribuția poluantului fapt explicat prin poziția sursei, direcția și viteza de curgere. Concentrația are valori mai mici decât concentrațiile obținute în celelalte două puncte de observație.

În cazul B datorită întinderii sursei pe o suprafață mai mare, nu mai are loc întârzierea distribuției poluantului în punctul de coordonate (10,5). După 182.5 zile concentrațiile sunt egale în punctele de observație.

Pentru cazul C (datorită poziției sursei) în punctul de coordonate (10, 5) după 36.5 de zile are loc o întârziere în distribuția poluantului care se menține constantă pe toată durata simulării. Concentrația în punctul de coordonate (10,5) are valori mai mici decât concentrațiile obținute în celelalte două puncte de observație.

Din cele 3 grafice se observă influența sursei (atât ca localizare cât și ca suprafață) asupra proceselor din acvifer și asupra rezultatelor simulării.

VI.2.5 Influența pasului de discretizare asupra rezultatelor simulării

Variația pasului de discretizare permite o mai mare flexibilitate, necesară mai ales în zonele cu un grad ridicat de eterogenitate. Totuși, introducerea celulelor cu dimensiuni variabile

conduce la o pierdere de precizie. Comanda pentru alegerea pasului de discretizare la programul ASMWIN este „model dimensione”.(fig.5.38)

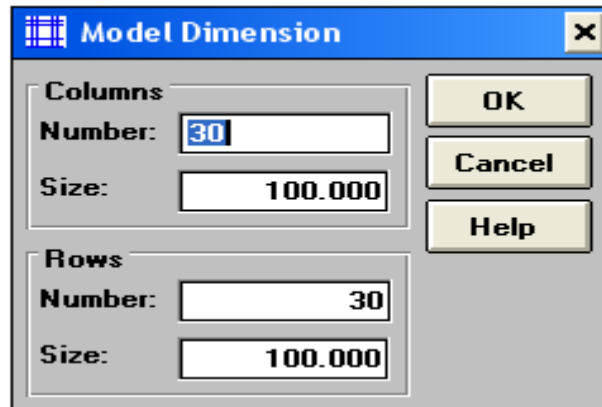


Fig.5.38 Alegerea pasului de discretizare pentru softul ASMWIN

În general, exactitatea rezultatelor este îmbunătățită atunci când se utilizează un pas cât mai mic de discretizare, dar timpul de calcul și resursele calculatorului cresc astfel cerințele de acuratețe și trebuie găsit un compromis. Acest compromis este de a utiliza un pas de discretizare mic în zona de interes. Este de preferat un pas cât mai mic, dar în limita posibilităților de modelare a domeniului.

Pentru analiza pasului de discretizare s-au realizat 3 scenarii, variația concentrației este urmărită într-un punct de observație.

a) S-a analizat situația $\Delta x = \Delta y = 2m$

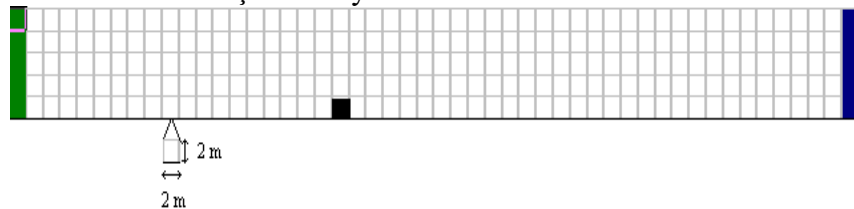


Fig.5.39 Alegerea pasului de discretizare

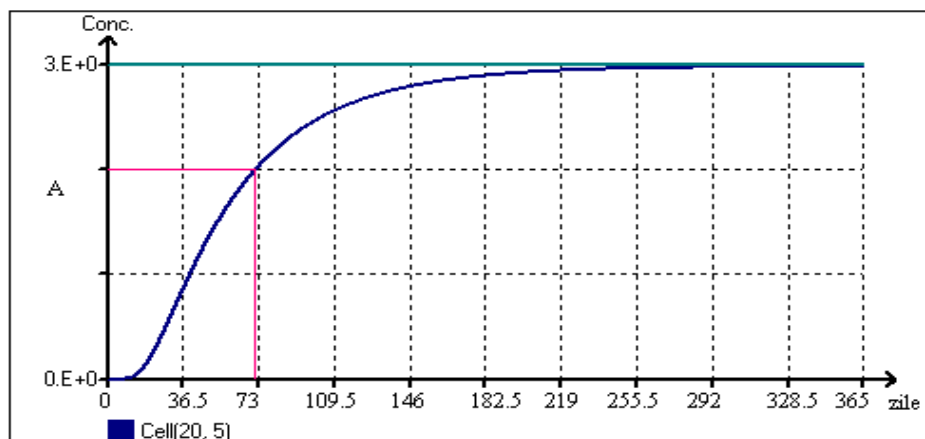


Fig. 5.40 Variația concentrației pentru $\Delta x = \Delta y = 2m$

b) S-a analizat situația $\Delta x = \Delta y = 10\text{m}$



Fig. 5.41 Alegerea pasului de discretizare pentru $\Delta x = \Delta y = 10\text{m}$

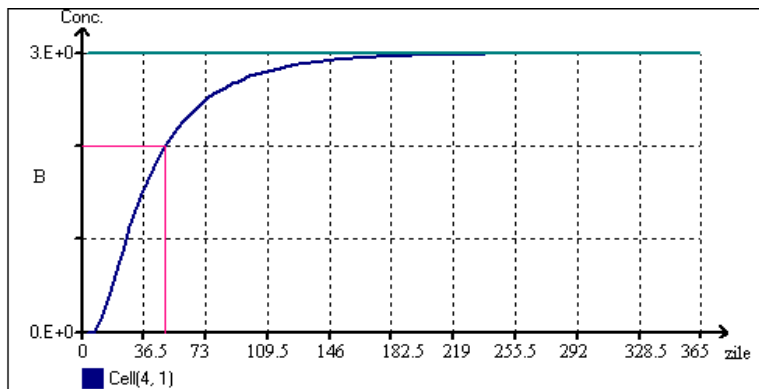


Fig. 5.42 Variația concentrației pentru $\Delta x = \Delta y = 10\text{m}$

c) S-a analizat situația $\Delta x = 10\text{ m} , \Delta y = 2\text{m}$

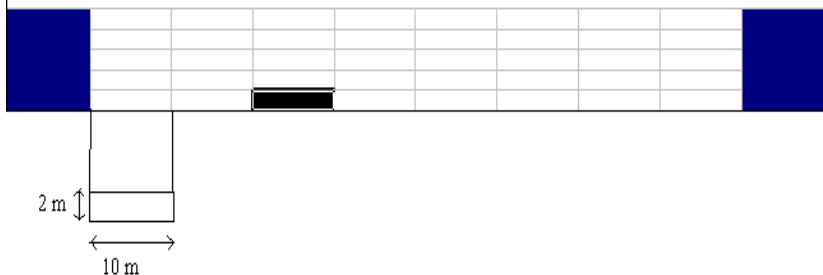


Fig. 5.43 Alegerea pasului de discretizare pentru $\Delta x = 10\text{m} \Delta y = 2\text{m}$

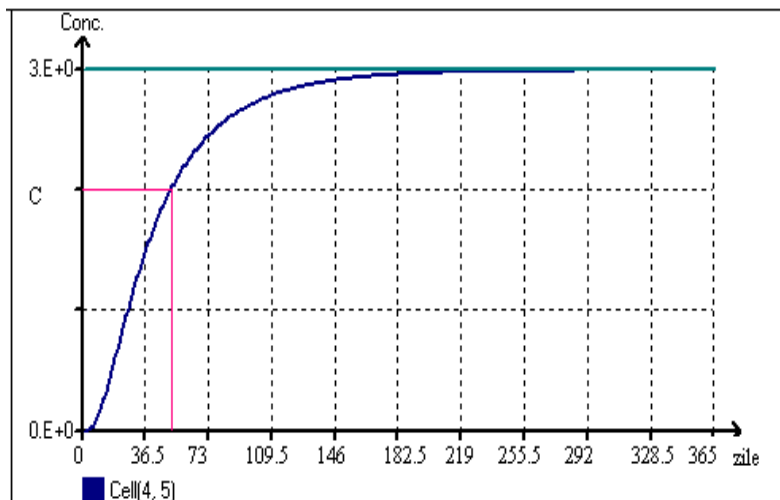


Fig. 5.44 Variația concentrației pentru $\Delta x = 10\text{m} \Delta y = 2\text{m}$

Concluzii referitoare la influența pasului de discretizare asupra rezultatelor simulării

Prin analiza pasului de discretizare nu se observă influențe majore în variația concentrației atunci când Δx este diferit de Δy .

Comparând situațiile A (pasul 2 m) și B (pasul 10 m) se observă în cazul B o grăbire în transportul poluanților de aproximativ 15 zile. Pentru a facilita convergența modelului, pentru a crește stabilitatea și pentru a reduce inexactitatea, o variație treptată între dimensiunile celulelor este necesară, un raport de maxim 2.0 între celulele adiacente fiind recomandat.

V.3 Experimente numerice asupra condițiilor de aplicabilitate a unor metode de modelare a proceselor de transport în acvifer

V.3.1 Stabilitatea și convergența în metodele numerice

Metodele numerice permit restrângerea soluției la un set de puncte de rețea convenabil distribuite, utilizând sistemul de coordonate carteziene. Ecuațiile cu derivate parțiale sunt rezolvate prin scheme discrete, concentrațiile sunt constante într-un element, dar variază între elemente diferite. În acest fel, un acvifer neomogen este aproximat ca o colecție de diferite regiuni omogene. Soluțiile sunt obținute în nodurile rețelei. O metodă numerică des folosită în soluționarea problemelor de transport este Metoda Diferențelor Finite.

Ca majoritatea metodelor numerice, Metoda Diferențelor Finite, este doar în anumite condiții stabilă. Dacă nu este respectat criteriul de stabilitate, modelul numeric este predispus la oscilații în spațiu sau timp.

Domeniul folosit pentru modelare are următoarele caracteristici, prezentate în fig.5.43

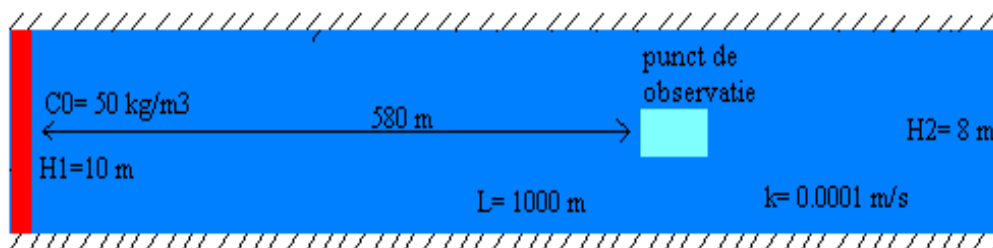


Fig.5.43 Domeniul modelat pentru calculul stabilității

Pentru analiza stabilității se vor face 3 scenarii, în care se ține seama de raportul dintre pasul de discretizare și coeficientul de dispersie longitudinal.

Domeniul studiat este omogen, variația concentrației va fi analizată prin metoda Diferențelor finite (cele două forme central și upwind) și prin metoda analitică.

- Domeniul este stabil, Pe are valoare 2
- Domeniul este instabil, Pe are valoare 4
- Domeniul este instabil, Pe are valoare 6,66

Parametrii folosiți în modelare sunt prezentați în tabelul 10

Parametrii folosiți în studiul stabilității

Tabelul 10

Parametrii de intrare pentru curgere		Parametrii de ieșire pentru curgere
Pasul de discretizare	$\Delta x = \Delta y = 20 \text{ m}$	Hidroizohipsele Viteze de curgere
Tipul de acvifer	Cu nivel liber	
Viteza în acvifer	10^{-6} m/s	
Gradientul hidraulic	0.002	

Nivelurile de apa	H1=10 m, H2=8 m	
Conductivitatea hidraulica/Transmisivitatea	K= 0.0001 m/s,	
Porozitatea	0.2	
Parametrii de intrare pentru transport		Parametrii de ieșire pentru transport
Puncte de observație	La 580 m sursa	Variații ale concentrației
Sursa de poluare	La m x=0 C0= 50 kg/m ³	
Timpul de modelare	T=10 ⁹ s sau 3.14 ani	
Coeficient de dispersie	$\alpha_L = 10$ m, $\alpha_L = 5$, $\alpha_L = 3$,	
Factor de degradare	1	

Pentru cazul 1 D aplicând metoda analitică și numerică obținem rezultate din fig.5.44. Curbele se suprapun, cele obținute prin metoda numerică fiind afectate de dispersie. În figurile 5.45 și 5.46 nu mai este îndeplinită condiția de stabilitate și se urmărește comportamentul celor două forme ale diferențelor finite. (central și upwind)

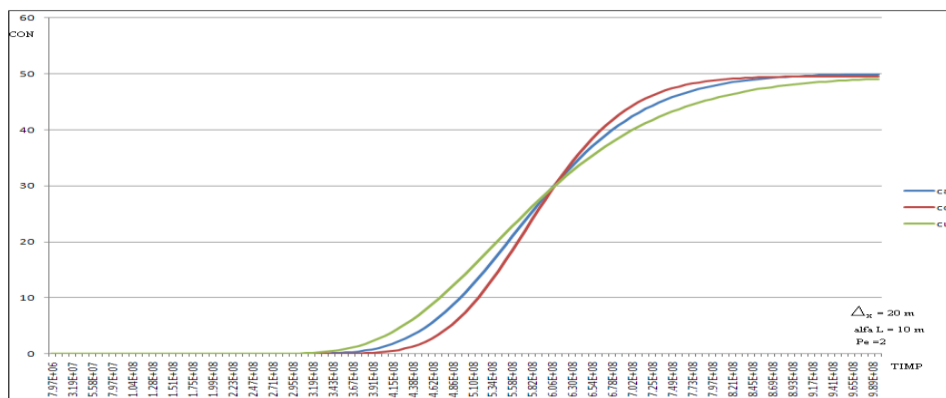


Fig.5.44 Corelația între analitic (ca), diferențe finite central (cc) și diferențe finite upwind(cu), pentru domeniu convergent și stabil, Pe=2, injecție permanenta

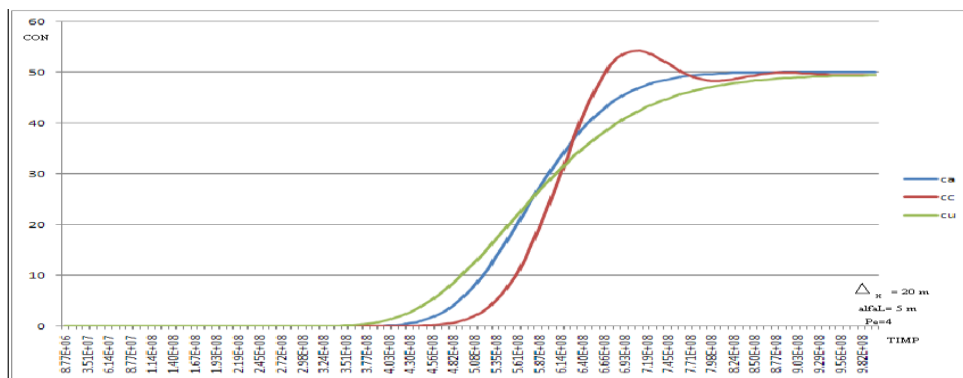


Fig 5.45 Corelația între analitic(ca), diferente finite central (cc) și diferente finite upwind(cu), pentru domeniu instabil, Pe=4, injecție permanenta

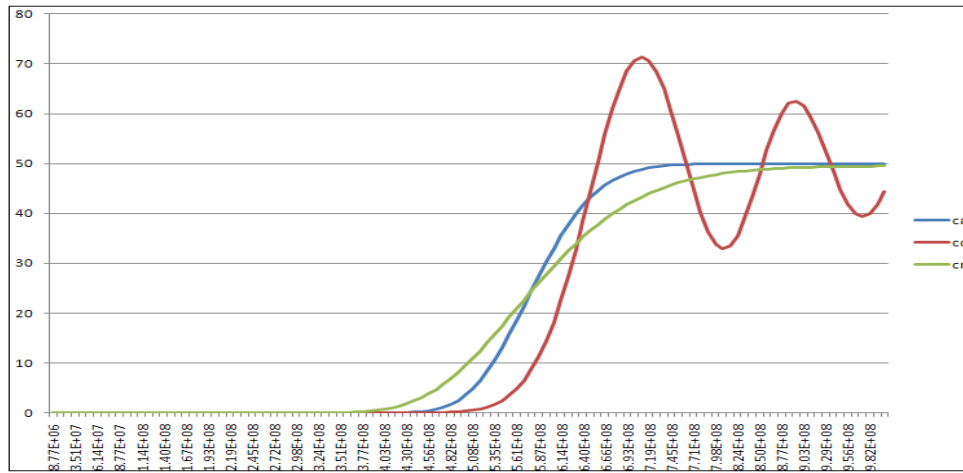


Fig. 5.46 Corelația între analitic(ca), diferențe finite central (cc) și diferențe finite upwind(cu), pentru domeniu instabil, Pe=6.66, injecție permanenta

Din analiza datelor obținute prin rularea programului ASMWIN 6.0 și compararea lor cu analiticul se observă că forma upwind este stabilă și convergentă, independent de variația coeficientului de dispersie longitudinal, iar forma central este instabilă. Au fost aleși 3 timpi (T1, T2, T3) și s-a urmărit evoluția erorii în cele trei situații. (tabel 11) În cea ce privește respectarea criteriului $|\xi_i^{j+1}| \leq |\xi_i^j|$, cu cât instabilitatea crește această condiția nu mai este respectată. (valorile trecute cu roșu în tabel indică instabilitatea formei central) O mare influență asupra rezultatelor o are aprecierea coeficientului de dispersie, cel mai bine fiind ca el să se determine din teren. Se observă că la apariția instabilității eroarea este mai mare.

Studiu asupra evoluției erorii pentru domenii stabile și instabile

α_L = 10 m	Timpul	Eroarea calculata cu formula $\xi = \frac{ ca - cc }{ca} 100$ sau $\xi = \frac{ ca - cu }{ca} 100$	Concentrația analitica	Concentrația obținuta cu diferențe finite central	Concentrația obținuta cu diferențe finite upwind
	T1=2.54E+08s	$\xi_{ca/cc} = 81.33\%$ si $\xi_{ca/cu} = 83.13\%$	1.4E-4	7.51E-4	8.30E-4
	T2=5.17E+08s	$\xi_{ca/cc} = 34.42\%$ $\xi_{ca/cu} = 18.13\%$	13.59	10.11	16.60
	T3=8.68E+08s	$\xi_{ca/cc} = 0.42\%$ $\xi_{ca/cu} = 3.33\%$	49.20	49.41	47.61
α_L = 5 m					
	T1=2.54E+08s	$\xi_{ca/cc} = 0$ $\xi_{ca/cu} = 0$	3.19E-13	0	0
	T2=5.17E+08s	$\xi_{ca/cc} = 259.39\%$ $\xi_{ca/cu} = 31,17\%$	9.56	2.66	13.89
	T3=8.68E+08s	$\xi_{ca/cc} = 0.38\%$ $\xi_{ca/cu} = 2.73\%$	49.94	49.75	48.61
α_L = 3 m					
	T1=2.54E+08s	$\xi_{ca/cc} = 24.25\%$ $\xi_{ca/cu} = 99.99$	2.78E-15	3.67E-15	5.63E-8
	T2=5.17E+08s	$\xi_{ca/cc} = 742.85\%$ $\xi_{ca/cu} = 48.08$	6.49	0.77	12.50
	T3=8.68E+08s	$\xi_{ca/cc} = 11.98 \%$ $\xi_{ca/cu} = 2.08\%$	49.99	56.80	48.97

V.3.2 Stabilirea unui număr minim de particule, N , pentru care soluția obținută prin metoda R.W să fie stabilă.

Un exemplu de modelare prin metoda drumului aleator este redat în figurile 5.47 și 5.48. Acest exemplu pune în evidență erorile ce apar în distribuția poluantului prin folosirea unui N oarecare în distribuția concentrației. Pentru graficul din fig. 5.47 s-a folosit doar 1 particulă/celulă, iar pentru graficul din figura 5.48 s-au folosit 60 particule/celulă.

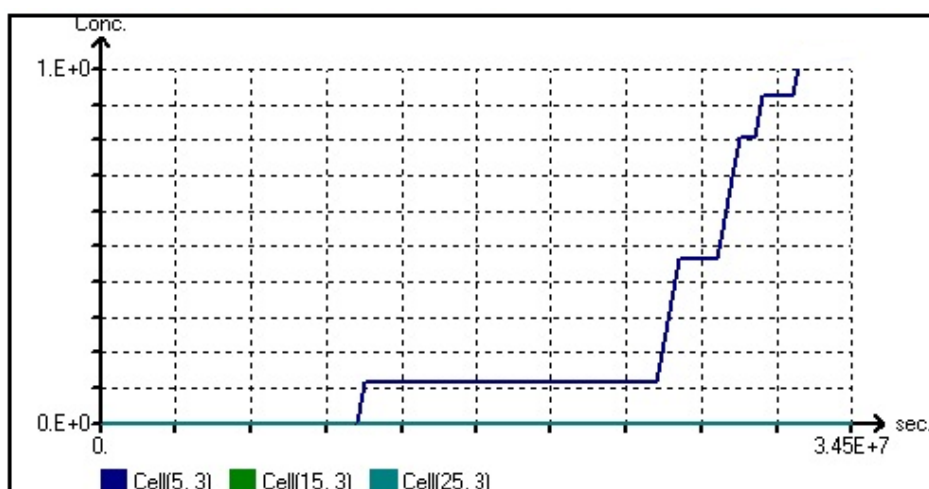


Fig. 5.47 Variația concentrației pentru 1 particulă/ celula

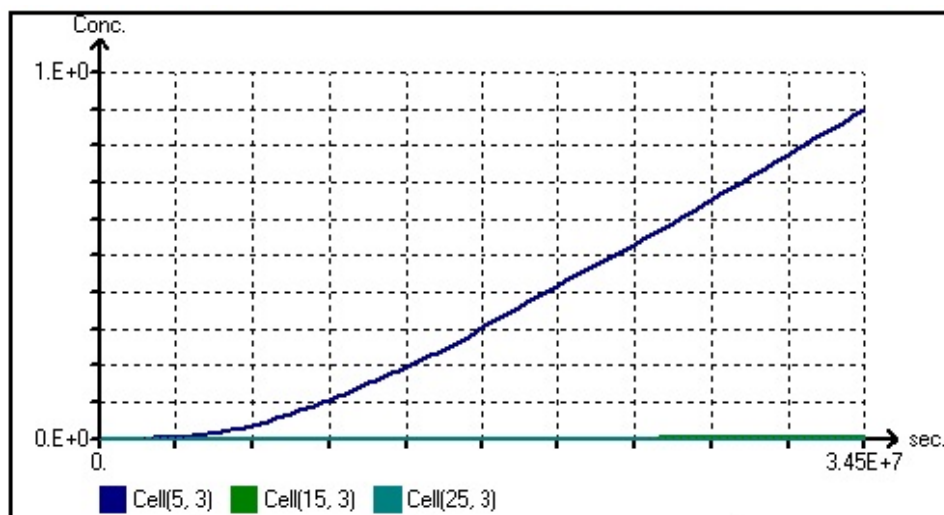


Fig.5.48 Variația concentrației pentru 60 particule/ celula

În literatura de specialitate nu este specificat un număr de particule N pentru care metoda drumului aleator să conducă la obținerea unei soluții stabile, iar rezultatele obținute în figurile 5.47 și 5.48 ne-au obligat la realizarea unui experiment numeric pentru determinarea lui N .

Am folosit parametrii prezentați în fig 5.49.

Pentru cazul 1D ecuația ce descrie transportul în metoda drumului aleatoriu este

$$x_p(t + \Delta t) = x_p(t) + v_a \frac{\Delta t}{R} + Z \sqrt{2D_L \frac{\Delta t}{R}} \quad (5.1)$$

S-a studiat variației în timp și spațiu a unei concentrații de poluant injectat permanent într-un acvifer omogen cu variația pasului de discretizarea, a pasului de timp, și al numărul de particule N întâlnit prin metoda RW .

Domeniul modelat este prezentat în fig.5.49.

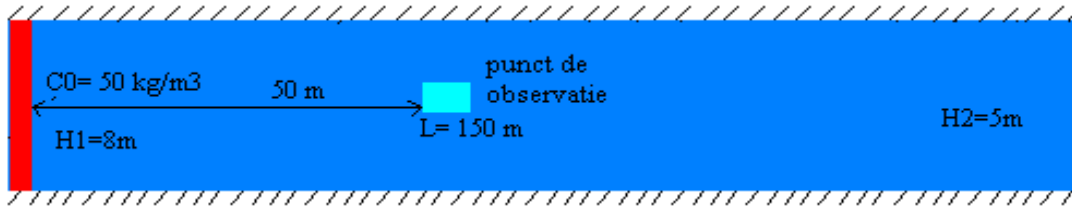


Fig.5.49 Domeniul modelat

S-au făcut scenarii pentru variații ale pasului de discretizare de 1m, 2m, 4m, pentru variații ale pasului de timp de 1 și 10 zile, și pentru un număr de particule ce variază de la 10 la 100/ celulă.

a) pentru cazul în care pasul de discretizare este 1 m, pentru pașii de timp 1 și 10 zile, pentru un număr de particule de la 10 la 100 s-au obținut rezultate ale concentrației prezentate în tabelul 12, care sunt reprezentate și în fig.5.50

Fluctuațiile concentrației în funcție de N pentru Δx = 1 m

Tabelul 12

concentrație	Δx =1m Δt =1	concentrație	Δx=1m Δt= 10
	nr de particule N		nr de particule N
41,03	10	43,2	10
50,86	20	47,52	20
49,8	30	41,34	30
49,59	40	59,39	40
51,97	50	47	50
50,03	60	52,65	60
50,25	70	49,7	70
48,67	80	49,39	80
49,86	90	46,38	90
49,73	100	49,16	100

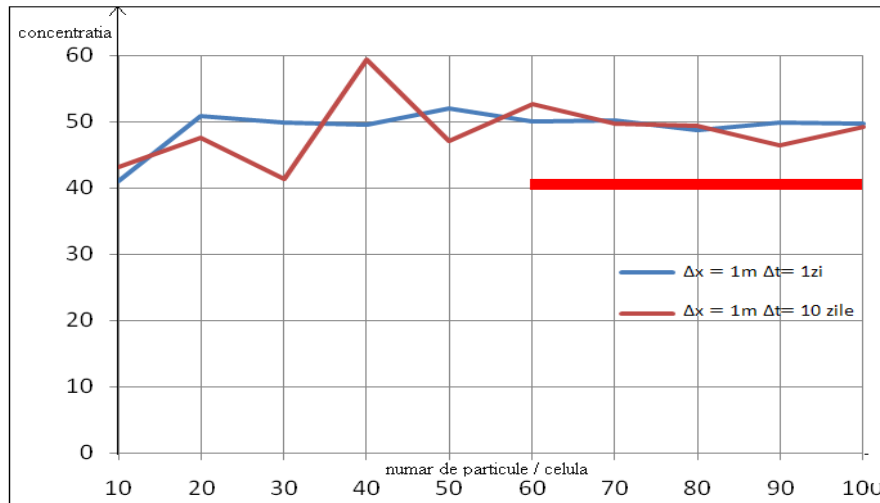


Fig.5.50 Variația concentrației pentru $\Delta x = 1 +$

b) pentru cazul în care pasul de discretizare este 2 m, pentru pașii de timp 1 și 10 zile, pentru un număr de particule de la 10 la 100 s-au obținut rezultate ale concentrației prezentate în tabelul 13, care sunt reprezentate și în fig.5.51.

Fluctuațiile concentrației în funcție de N pentru $\Delta x = 2$ m

Tabelul 13

concentratie	$\Delta x=2$ $\Delta t= 1$ nr de particule N	concentratie	$\Delta x =2$ $\Delta t =10$ nr de particule N
54,43	10	51,84	10
53,02	20	55,08	20
46,65	30	46,99	30
49,7	40	44	40
49,78	50	48,55	50
50,01	60	52,53	60
48,77	70	50,05	70
49,41	80	47,51	80
48,75	90	50,01	90
49,26	100	48,42	100

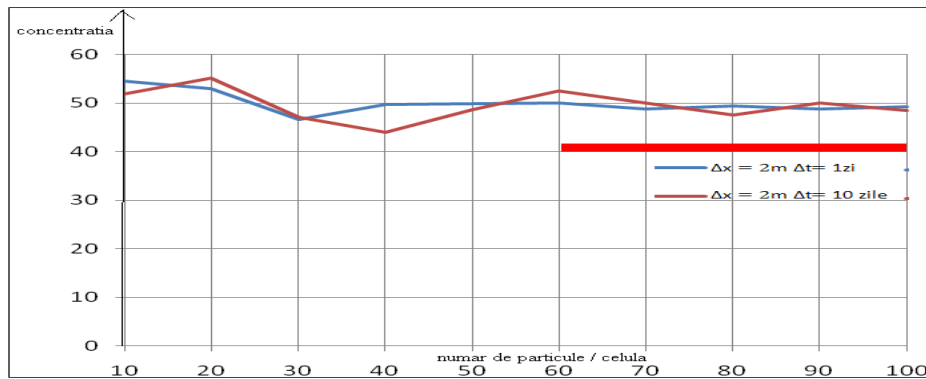


Fig. 5.51 Variația concentrației pentru pasul de discretizare de 2 m

c) pentru cazul în care pasul de discretizare este 4 m, pentru pașii de timp 1 și 10 zile, pentru un număr de particule de la 10 la 100 s-au obținut rezultate ale concentrației prezentate în tabelul 14, care sunt reprezentate și în fig.5.52

Fluctuațiile concentrației în funcție de N pentru $\Delta x = 2$ m

Tabelul 14

$\Delta x = 4$ $\Delta t = 1$			$\Delta x = 4$ $\Delta t = 10$
concentrație	nr de particule N	concentrație	nr de particule N
45,79	10	56,16	10
50,86	20	58,32	20
46,51	30	58,5	30
50,94	40	54,8	40
49,69	50	55,29	50
50,24	60	44,87	60
49,93	70	48,82	70
50,38	80	49,33	80
50,09	90	48,08	90
50,16	100	51,27	100

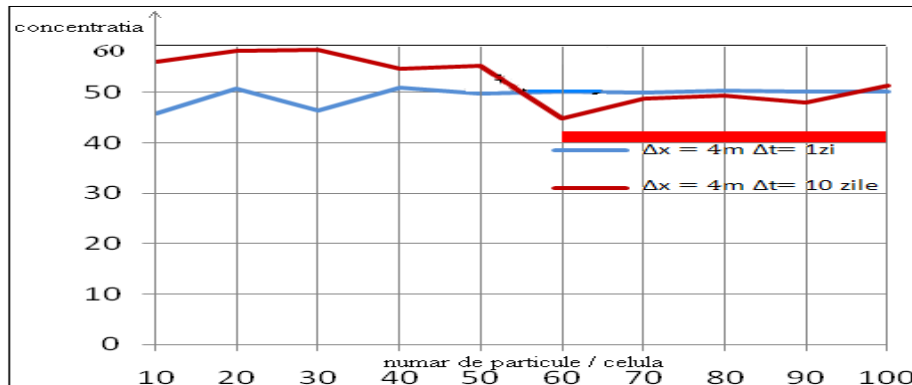


Fig.5.52 Variația concentrației pentru pasul de discretizare de 4 m

Din cele 3 grafice se poate observa că pentru un număr mai mare de 60 de particule pe celulă soluția obținută este stabilă.

V.3.3 Analiza influenței dispersiei numerice asupra rezultatelor obținute prin modelare

Pentru un mediu omogen a fost analizată dispersia numerică, apărută prin rotunjirile făcute la dezvoltarea în serie Taylor a ecuației transportului.

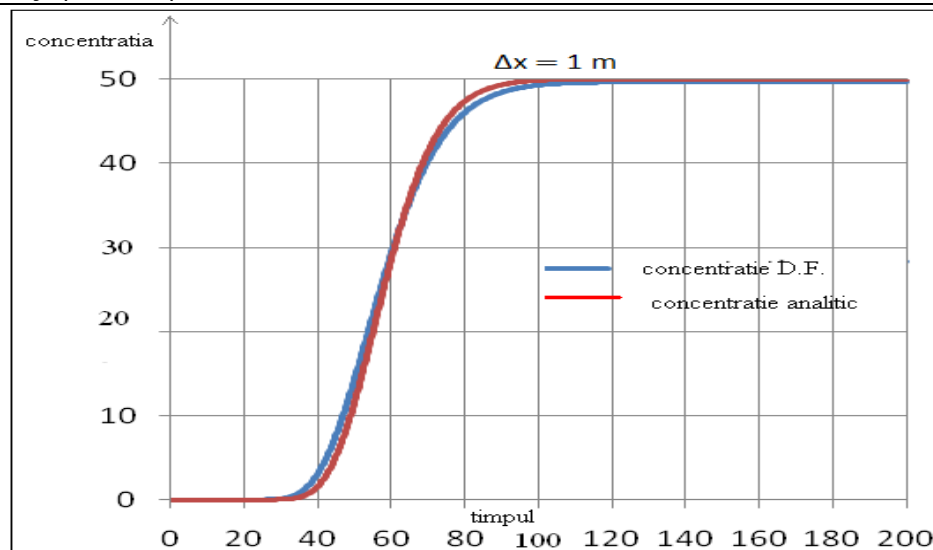


Fig.5.53 Dispersia numerică pentru pasul de discretizare de 1 m

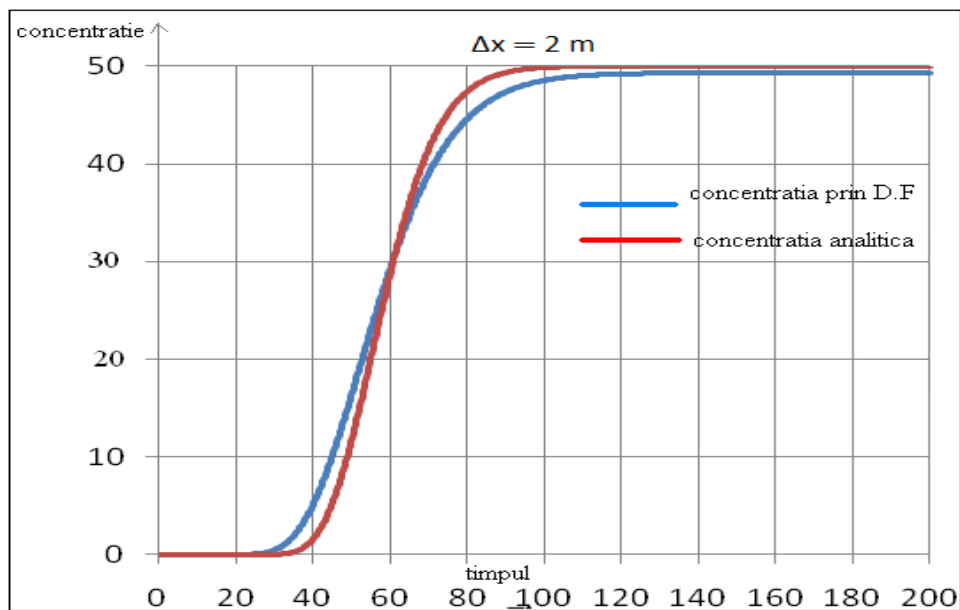


Fig.5.54 Dispersia numerică pentru pasul de discretizare de 2 m

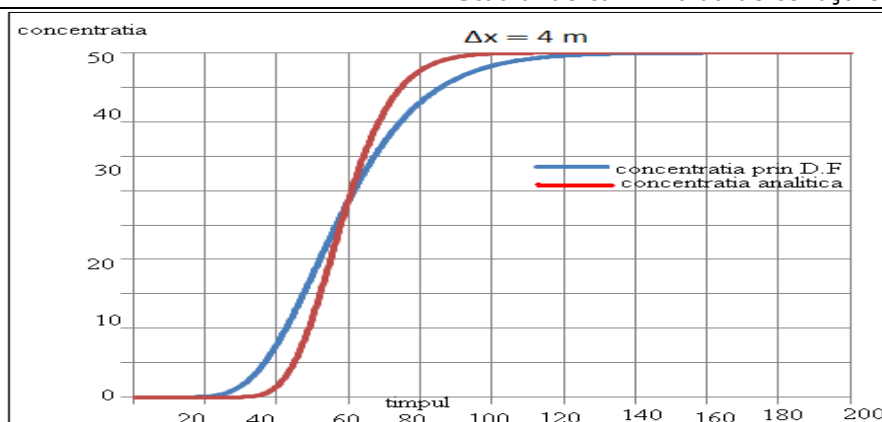


Fig.5.55 Dispersia numerică pentru pasul de discretizare de 4 m

Domeniul omogen a fost modelat prin metoda Diferențelor Finite și analitic. Rezultatele obținute (fig.5.53, fig.5.54, fig.5.55) indică faptul că odată cu creșterea pasului de discretizare este mai evidentă dispersia numerică.

V.4 Studiul de caz – Halda de cenușă Utvin

Poluarea este un fenomen ce face parte din viața noastră, un fenomen cu care ne-am obișnuit și despre care vorbim cu mare ușurință. Apa subterană face parte din circuitul închis al apei în natură, de aceea studiul poluării în acvifer este indispensabil într-un sistem de analiză a calității mediului.

Calitatea apelor subterane din România se află încă la un nivel necorespunzător, ca urmare a ritmului lent de autoepurare, potrivit unui raport prezentat de Administrația Națională Apele Române la sfârșitul anului 2009.

Poluarea apei subterane este asociată unei multitudini de aspecte neplăcute cum ar fi gustul, mirosul, culoarea, duritatea, existența unor organisme patogene sau a unor substanțe toxice, explozive sau inflamabile. Poluarea apei subterane duce la imposibilitatea utilizării acviferului pentru perioade foarte lungi de timp, de ordinul deceniilor sau chiar secolelor. Acest fapt este datorat vitezelor extrem de mici ale apei subterane.

Prin crearea rețelei hidrogeologice în zona de Vest a țării s-au obținut date importante hidrogeologice atât în ceea ce privește extinderea complexului acvifer freatic cât și potențialul acvifer.

Zona studiată este situată în partea de sud – vest a localității Timișoara, în centrul județului Timiș. Depozitul de zgură și cenușă Utvin (fig 5.56) este un depozit de șes, care ocupă o suprafață de 50 ha. Depozitul se încadrează în clasa b – depozit de deșeuri nepericuloase, conform clasificării din HG nr. 349 / 2005 cu modificările și completările ulterioare.



Fig.5.56 Halda de cenușă Utvin

Rețeaua hidrogeologică a zonei studiate

În regiunea Banat, rețeaua hidrogeologică cuprinde și postul hidrogeologic de ordinul I din Sânmihaiul Român, reprezentat printr-un profil alcătuit din șase foraje. Trei din aceste foraje (F1, F2, F3) sunt amplasate pe malul drept al canalului Bega, iar celelalte trei (F4, F5, F6) situate pe malul stâng. (Sursa Administrația Națională Apele Române Timiș)

Scopul lor este de a urmări variația în timp a nivelului apei subterane freatice, și corelația cu apa de suprafață din canalul Bega.

Ca amplasament profilul hidrogeologic începe cu F1 situat la cca. 2 km nord de comuna Sânmihaiul Român, urmează direcția NV-SE trecând prin imediata apropiere a comunei Sânmihaiul Român și se oprește la cca. 1,8 km SV de aceasta (F6).

Zona în care se află postul hidrogeologic aparține câmpiei Timișului, care prezintă slabe undulațiuni ale ternului, variind între 82-83 m cote absolute.

Panta generală a solului este NE-SV, asemănătoare cu cea a canalului Bega.

Morfologic se întâlnesc văi cu terase și lunci nediferențiate cu porțiuni inundabile și brațe moarte ale râului Bega Veche. Din punct de vedere geologic apare cuaternalul reprezentat prin depuneri aluvionare pe văi și loessuri pe terase. Profilul hidrogeologic al forajelor este redat în fig.5.57.

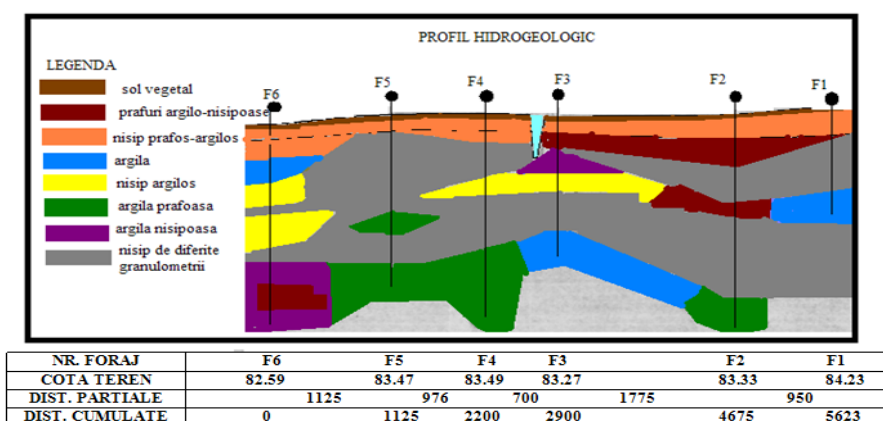


Fig. 5.57 Profilul hidrogeologic al forajelor de observație

Sursa Administrația Națională Apele Române Timiș

Forajele executate se află la distanțe între 250 m (F3) și 3000 m (F1). Adâncimea lor este cuprinsă între 9.50 m (F1) și 18,80 m (F2), în funcție de adâncimea patului stratului acvifer.

Stratificația întâlnită a indicat sub solul vegetal un complex prăfos - argilos-nisipos între adâncimile 0,50 m (F1) și 5,10 m (F6).

Urmează apoi stratul acvifer alcătuit din nisip fin, cu grosimi ce variază între 1,60 m (F5) și 16,8 m (F2), cu lentile de argilă prăfoasă - nisipoasă și prafuri argiloase.

Patul stratului este reprezentat printr-o argilă prăfoasă, pe alocuri nisipoasă (F6).

Nivelul apei are caracter ascensional și s-a stabilizat în foraje la adâncimile de 1,30 m (F6) – 2.48 m (F1)

Caracteristicile forajelor de observație

Tabel 15

Nr. foraj	Pomp area	N.H. adancime apa	Ad. Pat strat acvifer	Ad. Tavan strat acvifer	M grosime strat acvifer	H colona apa	Debitul pompat	Denivel area	Raza filtrului	K pt. strat cu nivel liber	K pt. Strat sub presiune	K ad mis
		m	M	m	m	m	mc/zi	m	m	m/zi	m/zi	m/zi
F1	I	2.48	6.70	5.80	0.90	4.22	68.25	2.86	0.105		30.7	22.7
	II						112.32	3.65		14.8		
F2	I	2.20	7.70	4.80	10.40	14.60	185.57	1.43	0.105		12.2	12.7
	II		16.80	9.30			302.40	2.34			13.2	
F3	I	1.62	9.80	6.20	3.60	8.18	179.71	1.25	0.105		42.2	48.4
	II						293.76	2.36			39.5	
F4	I	1.63	13.60	2.70	10.90	11.97	129.60	0.75	0.105		14	15.1
	II						191.80	1.26		12.9		
F5	I	1.60	6.70	1.80	9.50	11.80	319.68	1.04	0.105		26.9	32.2
	II		13.40	10.80			570.24	2.00		29.1		
F6	I	1.30	8.50	7.10	2.70	11.00	103.68	1.45	0.105		27.5	33.0
	II		12.3	11.0			224.	2.87			33.9	

În tabelul 15 sunt redate principalele caracteristici ale forajelor de observație cu specificarea adâncimii de pompare, a razei de filtrare și o scurtă descriere a stratelor.

Considerațiuni asupra forajelor executate.

Din punct de vedere a structurii hidrogeologice zona este cunoscută din forajele executate atât pentru exploatare - cercetare, cât și pentru alimentarea cu apă a unităților economice limitrofe. Direcția de curgere a apei subterane este NE-SV., valorile hidroizohipselor sunt cuprinse între 80-88 m, rezultând un gradient hidraulic $I=0.5-0.7\%$ în partea de vest și $I=0.8-1.2\%$ în estul zonei. Orizontul freatic este alcătuit din 2-3 strate cu grosimi variabile între 5-15 m alcătuite din roci detritice grosiere, cu o permeabilitate de peste 1.0 m/zi. Nivelul piezometric este cuprins între 1.5 - 9 m.

Complexul acvifer de adâncime este cantonat pe intervalul 50-100 m, fiind alcătuit din 4-6 strate. Caracteristicile hidrogeologice variază în cadrul zonei de la foraj la foraj, în funcție de stratele captate, compoziția acestora și modul de captare.

Din rezultatele obținute și calculul parametrilor rezultă că potențialul acvifer este dezvoltat prezentând următoarele caracteristici hidrogeologice:

- debit specific $q=0,9-1,24$ l/s/m
- coeficient de permeabilitate $k = 5,95-7,80$ m/zi
- Transmisivitatea $T = 92,3-121$ m²/zi
- Debit de exploatare $q=5.0-6.0$ l/s

Coloanele definitive au următoarele caracteristici, în funcție de elementele hidrogeologice

Tabelul 16

Foraj	Adâncime forată (m)	Adâncime definitivă (m)	N.H. (m)	Cote coloane slițuite (m)
F1	9,50	9,50	2,48	5,90-6,60
F2	18,80	18,80	2,20	4,90-7,60 9,40-16,70
F3	11,70	11,70	1,62	6,33-9,70
F4	18,20	18,20	1,63	7,50-13,00
F5	15,10	14,40	1,60	2,4-8,50 11,00-13,20
F6	18,00	14,20	1,30	7,20-8,40 11,10-12,20

Forajul executat până la adâncimea de 8.50 m indică următoarea succesiune litologică

- Sub stratul de sol urmează un strat gros de 4,70 m de argilă care în bază devine nisipoasă. Forajul pune în evidență existența unui strat permeabil până la 8,50 m format din nisip fin prăfos, cu lentile de praf argilos.

- Un alt foraj executat până la 10 m prezintă primul strat permeabil între 2,30-4,50 m, format dintr-un nisip mediu spre mare, iar al doilea strat, până la 8,20 m format din nisip fin cu liant argilos. Între cele două straturi se găsește un strat de argilă nisipoasă galbenă.

Modelarea zonei

Pentru a analiza influența parametrilor hidrogeologici (asupra proceselor din acvifer și asupra rezultatelor simulării) pe un caz real, am ales pentru studiu zona depozitului de cenușă Utvin. S-a modelat zona sub patru aspecte

- Cazul în care parametrii folosiți pentru modelare sunt cei reali,
- Cazul în care parametrii folosiți pentru modelare sunt cei reali cu excepția conductivității hidraulice (k este omogenizat prin media aritmetică a valorilor din teren, $k_{\text{mediu}} = 3.20 \cdot 10^{-4}$ m/s)

- Cazul în care parametrii folosiți pentru modelare sunt cei reali cu excepția porozității (n este omogenizat prin media aritmetică a valorilor din teren $n_{\text{mediu}} = 0.283$)
 - Cazul în care parametrii folosiți pentru modelare sunt omogenizați prin media aritmetică a valorilor din teren (n, k)
- Alegerea și discretizarea domeniului modelat este prezentat în fig.5.55.

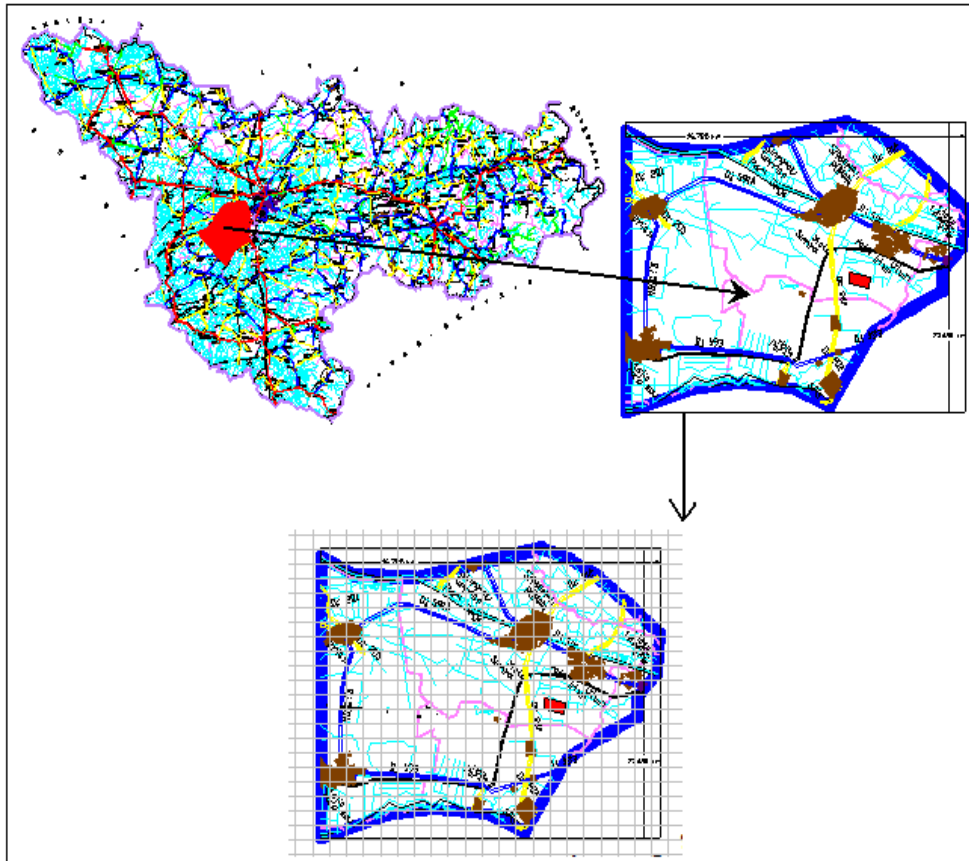


Fig 5.60 Localizarea zonei de studiu și discretizarea domeniului

Variația parametrilor, comuni, folosiți în cele patru simulări sunt prezentați în figura 5.61,. Este vorba despre cota superioară și cota inferioară a acviferului. În figura 5.62 sunt reprezentate valorile reale ale conductivității hidraulice și porozității.

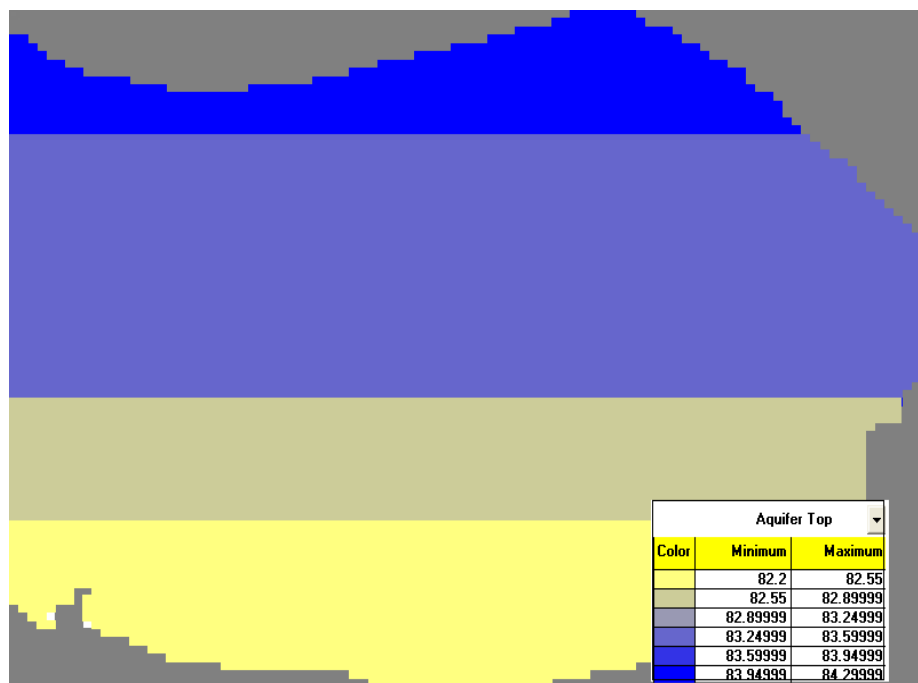


Fig. 5.61 Zonarea domeniului în funcție de cota superioară a acviferului



Fig. 5.62 Zonarea domeniului în funcție de cota inferioară a acviferului

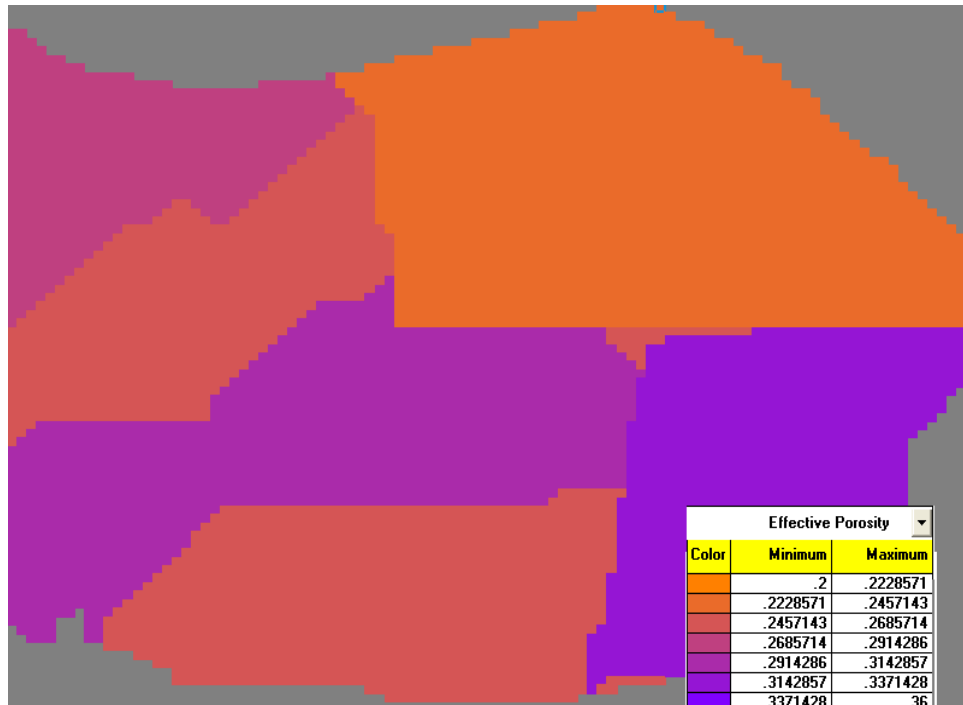


Fig. 5.63 Zonarea domeniului în funcție de porozitatea

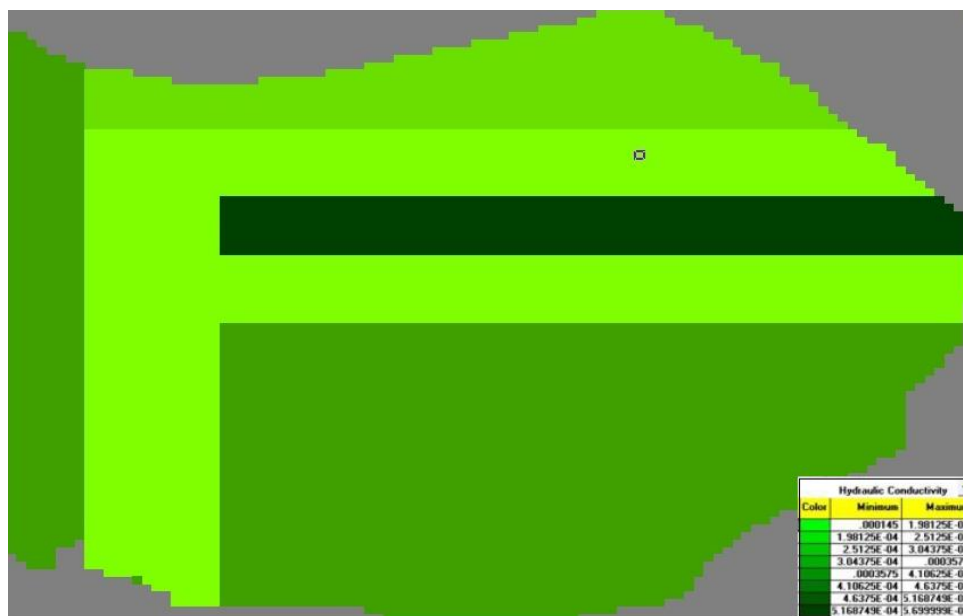


Fig. 5.64 Zonarea domeniului în funcție de conductivitate

După ce au fost introduse datele din teren s-a realizat curgerea folosind metoda prezentată în fig.5.65 și s-au calat parametrii curgerii prin compararea măsurătorilor din teren cu cele obținute prin modelare (fig.5.66).

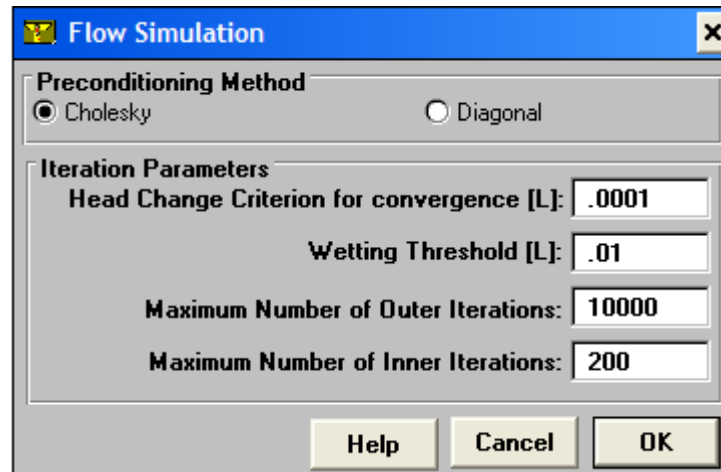


Fig.5.65 Metoda folosită pentru rezolvarea ecuației curgerii

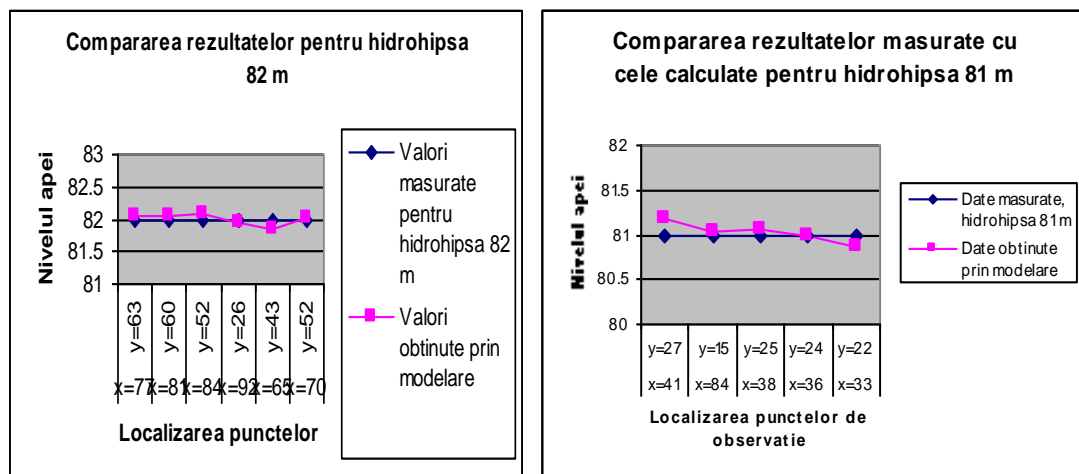


Fig. 5.66 Calarea parametrilor curgerii pentru mediu real

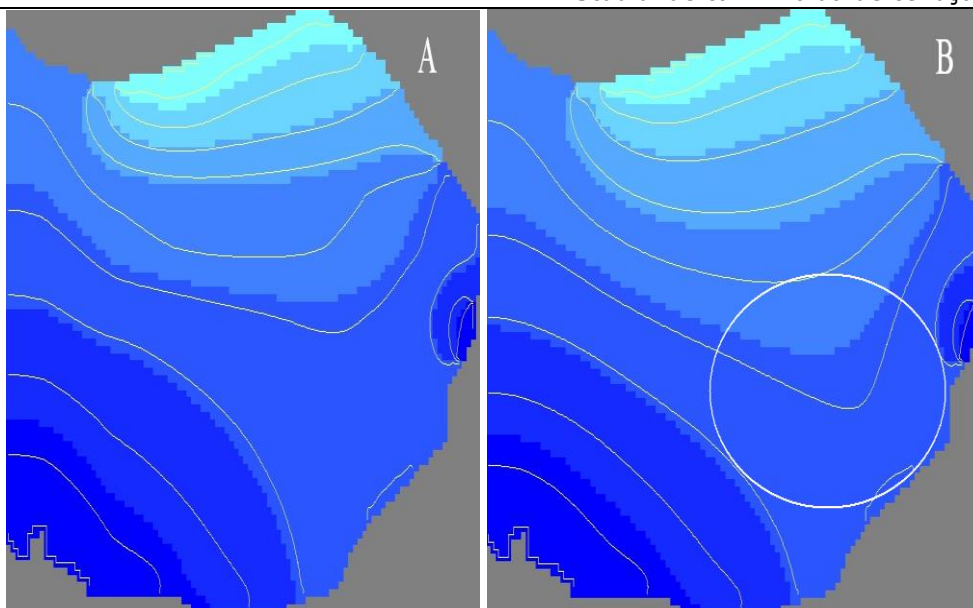


Fig. 5.67 Variația nivelului apei pentru mediu real (A) și pentru mediu k omogen, n variabil (B)

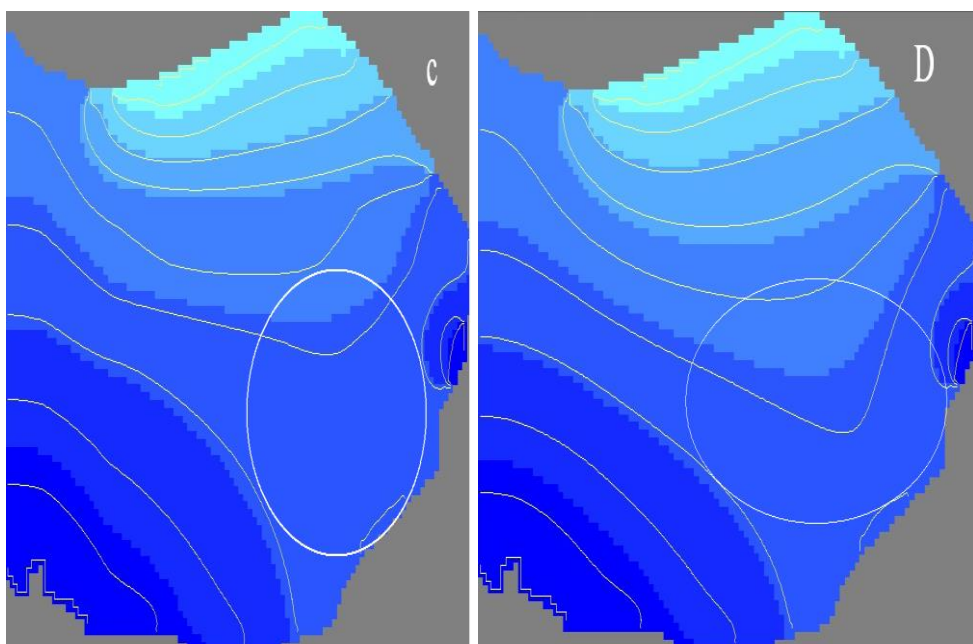


Fig. 5.68 Variația nivelului apei pentru mediu k variabil, n omogen (C) și pentru mediu k omogen, n omogen (D)

Analizând graficele B, C și D, comparate cu A (mediu real) se observă următoarele :

- În cazul B au loc modificări importante în procesul de curgere, datorită folosirii în program a unei singure valori pentru k (media aritmetică a valorilor din teren)

- În cazul C nu au loc modificări importante în procesul de curgere (comparativ cu A), prin folosirea în program a unei singure valori pentru n (media aritmetică a valorilor din teren)

- În cazul D au loc modificări importante în procesul de curgere, datorită folosirii în program a valorilor medii pentru k și n

Din analiza rezultatelor obținute pentru procesul de curgere se observă influența puternică a parametrilor hidrogeologici asupra rezultatelor simulării. (în special a conductivității hidraulice)

După ce s-a realizat curgerea pentru cele patru situații se studiază transportul poluanților. Pentru transport s-a impus o rată de injecție poluant de $0.005 \mu\text{g/s}$, și simulările s-au făcut pe perioade de 100 și 200 ani. Localizarea punctelor de observație este prezentată în fig.5.69, cu indicarea punctului în care sunt prezentate măsurătorile. Celelalte două puncte de observație sunt situate în cele două localități din zonă. Rezultatele obținute (pentru rata de injecție impusă) arată că nu sunt afectate de unda de poluant cele două localități (Sânmihaiul Roman și Utvin)

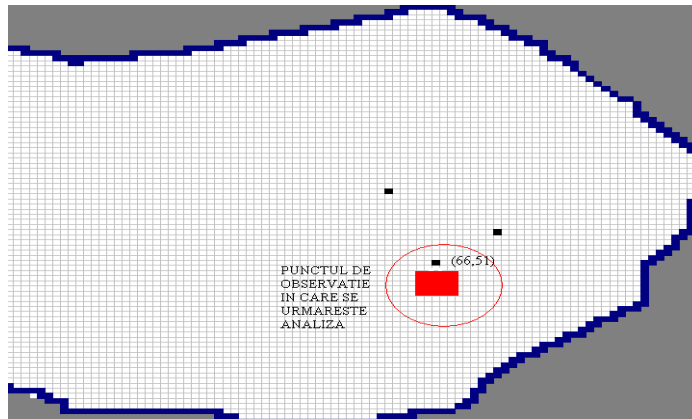


Fig.5.69 Localizarea punctelor de observație

Rezultatele obținute în procesul de transport sunt realizate prin metoda diferențelor finite (forma central), pentru un coeficient de dispersie longitudinală $\alpha_L = 50 \text{ m}$ și coeficient de dispersie transversală $\alpha_T = 5 \text{ m}$, pentru un factor de retardare 1.

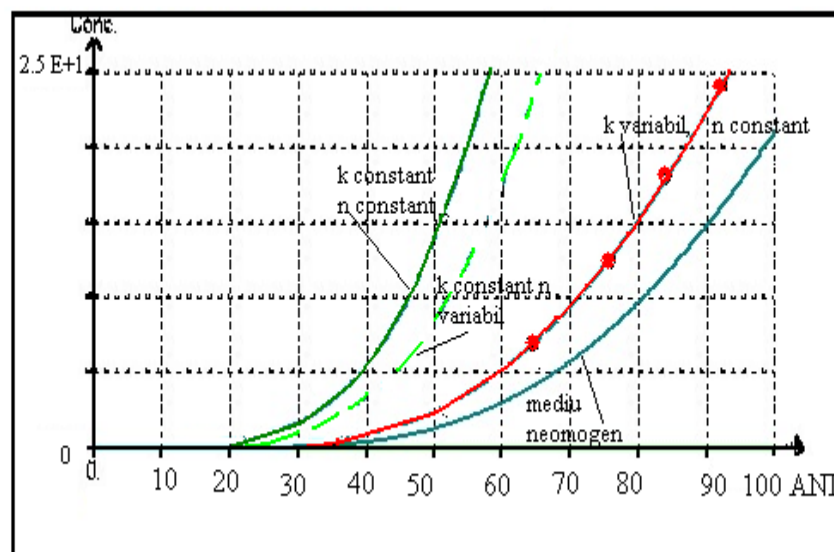


Fig.5.70 Variația concentrației în punctul de observație pe 100 ani

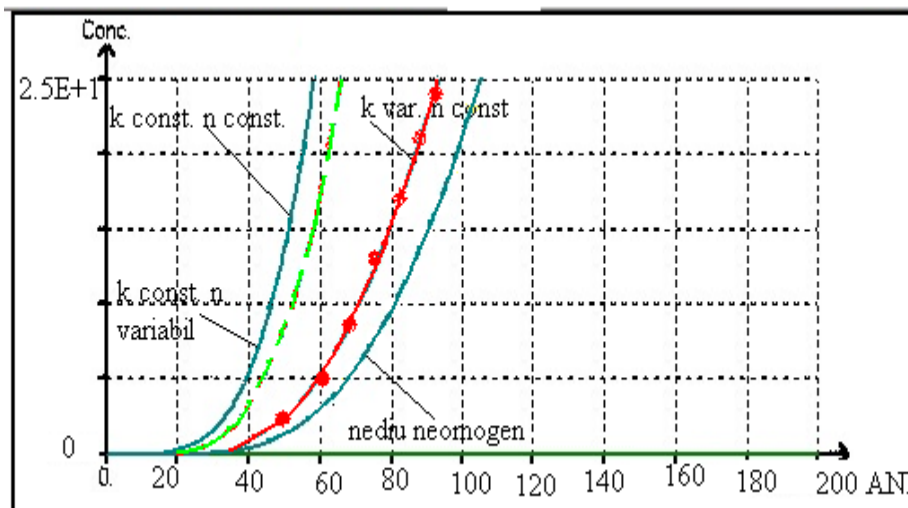


Fig.5.71 Variația concentrației în punctul de observație pe 200 ani

Concluzii

Cunoașterea proceselor de curgere și transport din acvifer este esențială pentru eficacitatea și eficiența de gestionare a resurselor de apă și mediu.

Neomogenitatea conduce la incertitudini cu privire la valorile proprietăților acviferelor și, prin urmare, la incertitudine în estimările fluxului apelor subterane și în distribuția poluanților. Eterogenitatea spațială a conductivității hidraulice, este una din problemele principale cu care se confruntă hidrogeologii și specialiștii în domeniu. În studiu de caz prezentat am urmărit influența neomogenităților asupra proceselor din acvifer și efectul asupra rezultatelor obținute prin modelare.

Situația transportului poluanților se prezintă astfel

Pentru mediu în care avem n mediu (constant) și k mediu (constant), poluantul ajunge primul în punctul de observație după o perioadă de 19 ani, concentrația de 25 g/m^3 este atinsă după o perioadă de aproximativ 58 ani. Aceste aspecte sunt întâlnite atât la simularea pe 100 ani cât și la cea pe 200 ani.

Pentru mediu în care avem n variabil, k constant, poluantul ajunge în punctul de observație după o perioadă de 20 ani, concentrația de 25 g/m^3 este atinsă după o perioadă de aproximativ 65 ani. Aceste aspecte sunt întâlnite atât la simularea pe 100 ani cât și la cea pe 200 ani.

Pentru mediu în care avem n constant, k variabil, poluantul ajunge în punctul de observație după o perioadă de 38 ani, concentrația de 25 g/m^3 este atinsă după o perioadă de aproximativ 92 ani. Aceste aspecte sunt întâlnite atât la simularea pe 100 ani cât și la cea pe 200 ani.

Pentru mediu în care avem n variabil, k variabil (mediu real) poluantul ajunge primul în punctul de observație după o perioadă de 39 ani, concentrația de 25 g/m^3 este atinsă după o perioadă de aproximativ 120 ani.

Din analiza datelor putem observa influența puternică pe care o au parametrii hidrogeologici asupra rezultatelor simulării.

Analiza făcută are caracter orientativ datorită lipsei unor date amănunțite privind hidrogeologia zonei. Este cunoscut faptul ca neuniformitatea zonei generează mari probleme de calcul a parametrilor caracteristici.

VI. SINTEZA CONTRIBUTIILOR PERSONALE, RECOMANDĂRI ȘI PERSPECTIVE

Cunoașterea proceselor de curgere și transport din acvifer este esențială pentru eficacitatea și eficiența de gestionare a resurselor noastre de apă și mediu.

Neomogenitatea conduce la incertitudini cu privire la valorile proprietăților acviferelor și, prin urmare, la incertitudine în estimările fluxului apelor subterane și în distribuția poluanților.

Eterogenitatea a fost asociată cu variabilitatea spațială a parametrilor hidrogeologici ai acviferelor (porozitatea, conductivitate hidraulică). Au fost efectuate simulări numerice pentru studiul curgerii și transportul în mediu poros.

Contribuții personale

Teza aduce o serie de contribuții, vizând perfecționarea tehnicilor de modelare a curgerii subterane și a transportului poluanților în acvifere.

Pe baza unei sinteze bibliografice privind stadiul actual al cercetării și fundamentarea teoretică a problemelor legate de influența variabilității (neomogenității) parametrilor caracteristici ai acviferelor asupra rezultatelor simulării se aduc o serie de contribuții dintre care se menționează în mod deosebit:

- Realizarea unor experimente numerice (simulări sistematice) asupra condițiilor de aplicabilitate a unor programe (ex. ASWIN), respectiv a metodelor de modelare numerică a proceselor de transport din acvifer (ex.: MeDiFin, Random Walk) pe care se bazează aceste programe.

- Sistematizarea rezultatelor simulării și stabilirea unor recomandări concrete, de mare utilitate practică, pentru utilizatorii de programe de simulare a numărului minim de particule necesar la aplicarea metodei RW pentru ca soluția să fie stabilă.

- Realizarea unor simulări sistematice pentru analiza influenței neomogenităților unor parametri caracteristici, care descriu curgerea și transportul în acvifere cum ar fi de ex. porozitate, conductivitate hidraulică, evidențiind că diferențele care apar între procesele de mișcare și transport reale și cele obținute prin modelare – simulare pot fi atribuite aproape integral variabilității spațiale a parametrilor hidrogeologici.

- Aplicarea efectivă a metodelor de analiză a variabilității parametrilor pentru un studiu de caz (halda de cenușă Utvin)

Această teză a demonstrat și a relevat informații importante referitoare la influența neomogenităților locale asupra proceselor din acvifer, iar rezultatele ei pot contribui la o mai bună interpretare a măsurătorilor din teren, precum și la predicții (privind transportul poluanților) în cadrul evaluării riscurilor și remedierea sistemelor.

Perspectiva privind studiul neomogenității

Așa cum am arătat, metode pentru studiul proceselor de curgere și transport din acvifer există și vor fi cu siguranță îmbunătățite, dar ele au nevoie de date suplimentare, inclusiv date geologice, dar și de un mod bun de a gândi problema.

Să ignori neomogenitatea este practic imposibil. Pentru a obține valori reale se fac teste de pompare, pe o durată rezonabilă, din care se obține date ce poate fi utilizată pentru a construi modele și a face predicții.

Testele de pompare sunt cele care „se ocupă” de studiul parametrilor hidrogeologici și produc valori rezonabile și utile pentru scopuri practice.

În cazul procesului de curgere, când măsurătorile sunt disponibile la scară adecvată, este posibilă ignorarea neomogenității, într-o oarecare măsură, și folosirea măsurătorilor globale pentru a face predicții.

Dacă în cazul curgerii, neomogenitatea mai poate fi ignorată uneori, în cazul transportului este de neacceptat, jucând un rol economic foarte important în reabilitarea acviferelor.

Există o întrebare controversată în hidrogeologie, atunci când se caută soluții la problemele de transport: Ce metoda se preferă: simplă sau complexă?

Metodele simple nu se mai justifică în această perioadă, în care capacitatea calculatoarelor este foarte mare și timpul de rezolvare nu mai este o problemă.

Acest lucru nu înseamnă că modele simple nu au un rol important în multe cazuri (Voss 1998). Pentru a determina dacă un model simplu este un răspuns satisfăcător la o problemă dată, nu există nici o altă alternativă decât să se compare rezultatele cu cele obținute printr-un model complex.

Situații în care trebuie acordată o mai mare atenție neomogenității

- Problemele de transport necesită, în general, o mai bună înțelegere a eterogenității decât problemele de curgere.

Dar și pentru aceste problemele, abordările pot fi diferite, în funcție de sursa de poluare (difuză sau punctiformă). Spre exemplu pentru surse difuze (contaminare cu pesticide sau nitrați) o descriere a acviferului nu poate fi suficientă; foarte importantă este direcția de curgere.

Acviferele cu structuri complexe sau cu lentile de argila pot necesita un studiu mai amănunțit, în cazul în care concentrații descoperite la diferite orizonturi trebuie anticipate.

- În studiul proceselor cu două faze este importantă descrierea eterogenității. Acesta este și motivul pentru care multe metode de studiu a neomogenității au fost elaborate de către industria petrolieră. Pe lângă permeabilitate și porozitate sunt necesari și alți parametrii (umiditatea, presiunea capilară, sorbția etc.) Toți acești parametrii trebuie tratați în același timp, deoarece sunt corelați între ei.

- În domeniul științei solului, ar trebui să se țină mai mult cont de eterogenitate, pentru a descrie corect structura orizonturilor zonei nesaturate.

- Intruziunea apei de mare sau salinizarea solului prin capilaritate, deși nu sunt procese de transport multifazice, probleme sunt dependente puternic de eterogenitate.

- Eterogenitatea este, de asemenea, un aspect fundamental pentru procesele superficiale hidrologice care au loc în zona vadoasă (infiltrarea, saturație,) și descrierea lor.

- Eterogenitatea straturilor cu permeabilitate scăzută și impermeabile este un subiect neatins, deși foarte relevant pentru studiul depozitării deșeurilor sau poluării acviferelor.

- O abordare genetică a proprietăților acviferului care participă la procesele de poluare este neatinsă.

Luarea în calcul a neomogenității este o problemă cu trei aspecte; colectarea datelor, crearea modelului și alegerea metodei de rezolvare.

De foarte multe ori problema este prost reprezentată: dificultate este acolo, datele sunt acolo, și hidrogeologul trebuie să selecteze și să utilizeze cea mai bună metodă pentru a rezolva problema.

În generală, la crearea modelului există o oarecare flexibilitate reprezentată printr-o fază suplimentară de colectare și analiză a datelor de intrare, care prevede o anumită marjă de eroare.

Multe programe de cercetare au colectat cantități mari de date și folosesc un model inadecvat. Aceste date sunt în mare parte inutile și modelul greșit.

O modalitate de remediere a acestei probleme este dezvoltarea unor zone experimentale, unde măsurătorile sunt analizate și interpretate de un grup de cercetători specialiști în domeniu.

Se pot obține rezultate bune, deoarece experimentele sunt construite pentru a naște modele și acestea pentru a fi modelate.

Imagistica subterană este un pas înainte în ceea ce privește descrierea geometriei sistemelor eterogene. Geofizica ar putea fi utilizată mai sistematic. În prezent, lipsesc exemple

de utilizare cu succes a imaginii geofizice în rezolvarea probleme în care eterogenitatea joacă un rol important.

Este nevoie de o bază de date a acviferelor, cu proprietățile lor, cu metodele folosite în studiu, cu modelarea zonei și cu scopul pentru care s-a făcut studiul. Nu este un proces greu, deoarece există o similitudine mare între sistemele geologice. Exemplu structura unui acvifer din zona „X” are, probabil, o mulțime de caracteristici în comun cu un acvifer din altă zonă. Acest lucru devine valabil atunci când procesele sunt aceleași peste tot, dar condițiile locale (climatice, geometrie, geologie) fac diferența.

Crearea unei astfel de baze de date, la nivel internațional, a fost discutată (Voss 1988, Dagan 2002), dar niciodată pusă în practică. Cele două motive pentru care nu s-a pus în practică sunt costul și conținutul exact al bazei de date. Spre exemplu conductivitatea hidraulică măsurată în Constanța nu va fi de nici un folos pentru studiul unui acvifer din Timiș, dar structura sedimentară, metodele folosite pentru investigarea zonei sunt mai necesare și ele ar trebui cuprinse într-o astfel de bază de date. Organizația Internațională UNESCO încearcă să dezvolte un astfel de proiect la nivel mondial.

Scara la care se lucrează în modelare este o problemă și necesită cercetări suplimentare.

Nu putem folosi scări mici pentru a descrie porțiuni dintr-un sistem, ca apoi să le „asamblăm” și să caracterizăm sistemul. Chiar și sistemele studiate la scări mici au structuri complexe ce nu pot fi ignorate.

Întrebarea firească este „Se va ține cont de neomogenitate în viitor?”

Răspunsul la întrebare depinde în mare măsură de decizia conștientă de a caracteriza și descrie mai bine sistemul, similar cu ceea ce s-a făcut în ultimii 25 de ani în industria petrolului.

În multe cazuri, omogenizare sau o mediere neomogenității a fost frecvent utilizată dar și-a demonstrat limitele. Este necesară existența unei baze de date cu caracterizarea zonelor de studiu, îmbunătățirea imaginii geofizice la adâncimea de interes, cu metode specifice, cum este metoda seismică folosită în industria petrolului.

Prioritar nu este apariția de noi metode pentru studiul neomogenităților. Este foarte necesară o abordare comparativă a metodelor existente pe un set de zone de studiu, deoarece în prezent fiecare autor a demonstrat cât de bună este metoda sa folosind exemple teoretice sau practice, dar nu a demonstrat convingător modul în care aceasta se compară cu alte metode.

Un alt aspect care trebuie dezvoltat este îmbunătățirea metodelor de caracterizare a acviferului. Proprietăți în prezent ignorate (permeabilitatea foarte mică de tipul nisip - noroi, lut lutos) trebuie luate în calcul.

Recomandări

În teză a fost analizată influența neomogenităților locale asupra proceselor din acvifer pentru o sursă permanentă. Este foarte interesant studiul pentru o sursă de poluare nepermanentă.

Studiul proceselor din acvifer pe modele fizice nu trebuie abandonat. Exemplu de trecere de la un caz real la un model de laborator spre a studia procesele la o scară mai mică.

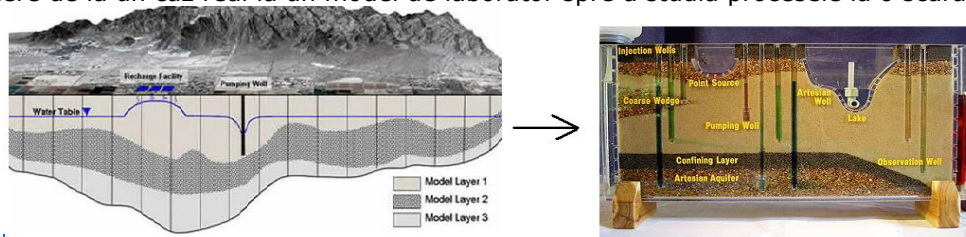


Fig. 5.72 Trecerea de la un unui sistem real la un model de laborator

Sursa http://www.adwr.state.az.us/azdwr/Hydrology/Modeling/Model_Basics.htm

BIBLIOGRAFIE

- [1] Adams, E., E. L. W. Gelhar, "Field Study of Dispersion in a Heterogeneous Aquifer, 2. Spatial Moments Analysis" *Water Resour. Res.*, 28(12), 3293-3307, 1992.
- [2] Ayman A. "A lithologic modeling techniques for aquifer characterization and groundwater flow modeling of the Sohag area, Egypt" *Hydrogeology Journal*, 2009
- [3] Aral, M.M., Liao, B. "Analytical solutions for two-dimensional transport equation with time-dependent dispersion coefficients" *Journal of Hydrologic Engineering* 1 (1), 20-32, 1996
- [4] Attinger, S.M., Dentz, M., Kinzelbach, H., Kinzelbach, W. "Temporal behavior of a solute cloud in a chemically heterogeneous porous medium" *Journal of Fluid Mechanics* 386, 77-104, 1999
- [5] Baeumer, B., Benson, D.A., Meerschaert, M.M., Wheatcraft, S.W. "Subordinated advection-dispersion equation for contaminant transport" *Water Resources Research* 37 (6), 1543-1550, 2001
- [6] Baeumer, B., Benson, D.A., Meerschaert, M.M. "Advection and dispersion in time and in space" *Physica A* 350, 245-262, 2005
- [7] Bakos Mihaela „ Study of pollution processes in the area adjacent ash heap Utvin”, 6th WSEAS International Conference on Energy, Environment, Ecosystems, and Sustainable Development, ISBN 978-960-474-237-0, pag. 442-445, 2010
- [8] Bakos Mihaela „Current software used for resolve problems in environmental engineering” The 14 International Conference Modern Tehnologies, Quality and Innovations, Slanic Moldova, Romania, 20-22 mai, www.modtech.ro, proceeding indexat ISI, ISSN 2066-3919, pag 79, 2010
- [9] Bakos Mihaela „Numerical methods for solving pollution problems in aquifers” Simpozionul international - Tendinte de Dezvoltare in Agricultura Europeana *Research Journal of Agricultural Science, (B+CNCISIS)*, Vol. 42, ISSN 2066-1843, Timisoara, Romania, 20-21 mai, pag 389-396, <http://agricultura.usab-tm.ro/publicatii.php>, 2010
- [10] Bakos Mihaela „The influence of grains size sediment, upon flow processes in porous media” Balwois, Ohrid, Republic of Macedonia, 25-29 May, 2010
- [11] Bakos Mihaela „Aquifer characteristics influence in transport processes” Simpozion international Ingineria hidrotehnică în teorie și practică, publicat în buletinul științific Tom55(69), Fascicola 1,2,2010, ISSN 1224-6042, Ed. Politehnica, pag. 330-333, Romania, 2010
- [12] Bakos Mihaela „Importance for study multiphase in porous media” *Buletinul stiintific al Universitatii Politehnica din Timisoara, Facultatea de Hidrotehnica* pag. 39-43, ISSN 1224-6042, Romania, 2009
- [13] Bakos Mihaela „Evolution of flow through porous medium” *Buletinul stiintific al Universitatii Politehnica din Timisoara, Facultatea de Hidrotehnica*, pag. 35-39, ISSN 1224-6042, Romania, 2009
- [14] Bakos Mihaela V., Crisan Mihaela M. „The condition of the underground waters in Romania caused by the climatic changes” XXIV th Conference of the Danubian Countries, on the hydrological bases of water management, pag 89, ISBN 978-961-91090-3-8 Bled, Slovenia, 2008
- [15] Bakos Mihaela V., Crisan Mihaela M. „The effects of the climatic changes upon the quality of environment and life” Conference on Water Observation and Information System for Decision Support, pag. 74, ISBN 978-608-4510-00-0, Balwois, Ohrid, Republic of Macedonia ,27-31 mai, 2008
- [16] Bartha I., Javgureanu V., Marcov M. „Hidraulică vol.1 și vol.2” Editura Performantica, Iași, 2004
- [17] Bear, J. „Dynamics of Fluids in Porous media” Elsevier Sci., New York, 1972
- [18] Bear, J. „Hydraulics of Groundwater” McGraw-Hill, New York, p. 569, 1979
- [19] Bear, J., Y. Bachmat „A generalized theory of hydrodynamic dispersion in porous media” Symposium of Haifa, March 19-26, 1967, International Association of Scientific Hydrology, Publication No. 72, 7-16, 1967

- [21] Bedient P. „Ground Water Hydrology Introduction”, 2005
- [22] Bica I. „Poluarea acviferelor” Tehnici de remediere, HGA, București 1998
- [23] Bica I. „Protecția mediului , Politici și instrumente” HGA, București 2002
- [24] Carabeț A., David I, „Study and modelling of the groundwater pollution in the areas neighbouring stock pits” Buletin Științific al UPT, Seria Hidrotehnica, 1997
- [25] Carrera, J., Neuman, S. P., Casanovas, J. „On optimum parameterization in aquifer inverse problems. In The Stochastic Approach to Subsurface Flow” Montvillargenne. Comite Mileiux Proeux de L'Association Internationale de Recherche Hydraulique, 1985
- [26] Carrera, J. “An overview of uncertainties in modelling groundwater solute transport” J. Contam. Hydrol., 13(1-4), 23-48, 1993
- Cherblanc, F., Ahmadi, A., Quintard, M. “Two-medium description of dispersion in heterogeneous porous media: comparison between theoretical predictions and numerical experiments” Advances in Water Resources 30 (5), 1127-1143, 2006
- [27] Chiang W.H, Kinzelbach W , R. Rausch „ASMWIN, Groundwater flow and transport modeling, an integrated program” Berlin / Stuttgart, 1998
- Choquette, PW, and LC Pray, „Geologic nomenclature and classification of porosity in sedimentary carbonates” AAPG Bulletin, v. 54, p. 207-250, 1970
- [28] Crisan Mihaela M, Bakos Mihaela V, „Groundwater monitoring in the proximity of an ash storage pit” Conference on Water Observation and Information System for Decision Support, pag. 141, ISBN 978-608-4510-00-0, Balwois, Ohrid, Republic of Macedonia ,27-31 mai, 2008
- [29] Crisan Monica, Piselaga(Bakos) Mihaela „Are you ready for a water quality management system?” Conferinta Internationala Monitorizarea Dezastrelor si poluarii, Iasi, Romania, 2007
- [30] Dagan, G. „Solute transport in heterogeneous porous formations” J. Fluid Mech. 145, 151-177, 1984
- [31] Dagan, G. “Transport in heterogeneous porous formations: spatial moments, ergodicity, and effective dispersion” Water Resources Research 26 (6), 1281-1290, 1990
- [32] Dagan, G., Fiori, A., Jankovic, I. “Flow and transport in highly heterogeneous formations. 1. Conceptual framework and validity of first-order approximations” Water Resources Research 2003.
- [33] David. I. „Hidraulică” LITO IPTV, Timișoara, 1990
- [34] David, I. „Grundwasserhydraulik- Strömung und Transportvorgänge”, pag 157-173, Ed. Vieweg, Braunschweig / Wiesbaden, 1998
- [35] David I., Șumălan I, Carabeț A, Nitușcă A. „Transportul poluanților prin medii fluide” Lito, Timișoara, 1996
- [36] David I., Bakos M., Visescu, M., Stefanescu, C. „Numerical experiment to determine the influence of the particle number of the random walk simulation method for heat and pollutant transport in the aquifer” Part 1 International Workshop Global and Regional Environmental Protection, Vol 2 ISBN 978-606-554-212-9, pag 42-46, Timișoara, <http://benatim2010.mec.upt.ro/informations.html>, 2010,
- [37] Essaid HI, Hess KM „Monte Carlo simulation of multiphase flow incorporating spatial variability of hydraulic properties” Ground Water 31(1):123-134, 1993
- [38] Delleur J.W. „The handbook of groundwater engineering” 2007
- [39] Fetter, C.W., „Applied Hydrogeology. 4th Edition (a)” Prentice Hall, New Jersey, 2001
- [40] Fetter, C.W. „Contaminant Hydrogeology. 2nd Edition(b)”. Prentice Hall, New Jersey, 2001
- [41] Freeze, R.A. and Cherry, J.A. “Groundwater” Prentice Hall, New Jersey, 604 pp, 1979
- [42] Fredlund, D.G. and Rahardjo, H. „Soil mechanics for unsaturated soils” John Willey and Sons, New York 1993
- [43] Gelhar, L. W. „Stochastic subsurface hydrology” pag.63-93. Prentice-Hall, Inc., A Simon & Schuster Company, Englewood Cliffs, New Jersey 07632, 1993
- [44] Golfier, F., Quintard, M., Cherblanc, F., Zinn, B.A., Wood, B.D. “Comparison of theory and experiment for solute transport in highly heterogeneous porous medium” Advances in Water Resources 30 (11), 2235-2261, 2007

- [46] Lorenz, E. „Deterministic Nonperiodic Flow“, Journal of the Atmospheric Sciences, pag 130-140, 1963
- [47] Jakson ,A.S., Miller, Gray, „Modeling of multiphase flow in porous mediums systems” 2008
- [48] Kharusi An, Behbahani H, si alt. “From pore-space images to multiphase transport predictions” 2010
- [49] Koch M. “Aspects of the modeling of groundwater flow” 1989
- [50] Man T.E., Constantinescu L., Dima A.B. “Water Energy in hydroameliorative systems using the hydraulic transformer type A. Barglazan and the hydraulic Hammer (hydraulic pump)” Journal: Annals : Food Science and Technology, 2010
- [51] Man T.E, David I. “A New Solution of Spiral Chambers and Aspiration Elbows of Welded Double Shells for Pumps, Provided by Mathematical Modeling”, <http://www.wseas.us/e-library/conferences/2010/Faro/MACMESE/MACMESE-60.pdf>, 2010
- [52] Man T.E., Retezan, A., Vlaicu, I., Yannick, V., Chaphica, D.D., Dimitriu, M., Vertan G., „Regional Issues in Water Supply, Sewage Pumping and Drainage”, Scientific Bulletin of the „Politehnica” University of Timisoara, Romania, Tranzactions on Hydrotechnics, Tom 55(69), Fasc.1,2, Edit. Politehnica Timisoara ISSN 1224- 6042, pg.195- 201, 2010
- [53] Marsily Gh. ,F. Delay, și al. „Dealing with spatial heterogeneity” Hydrogeol J pg 161-183, 2005
- [54] Maidment, D. R. „Handbook of Hydrology” McGraw-Hill, 1993
- [55] Mermoud, A. „Elements du physique du sol” HGA, Bucarest. 1998.
- [56] Monnig, N.D., Benson, D.A., Meerschaert, M.M., “Ensemble solute transport in two dimensional operator-scaling random fields” Water Resources Research 44, W02434. doi:10.1029/2007WR005998, 2008.
- [57] Mualem, Y. „A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media” Water Resour. Res., 12:513–522, 1976
- [58] Mudy A. „Cours d'hydrologie générale” Site Web de l'Ecole polytechnique de Lausanne, 2005
- [59] Musy, A. and Soutter, M. „Physique du sol” Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, Lausanne, 1991
- [60] Niessner J., Helmig R. “Multi-scale modeling of three-phase–three-component processes in heterogeneous porous media” Advances in Water Resources 30 2309–2325, 2007
- [61] Panfilov, M.,. “Models of Flow Through Highly Heterogeneous Porous Media” Kluwer, Dordrecht, 2000
- [62] Pisleaga (Bakos) Mihaela, Achim Camelia, „Four decades of numerical modeling in the dynamic of the fluids” The 32nd International scientific conference of the military tehcnical academy, pag.121-127, ISBN 978-973-640-127-5, Bucuresti, Romania, 1-2 noiembrie 2007
- [63] Pisleaga (Bakos) Mihaela, Chebutiu Adrian, Crisan Monica, „Modeling and simulation of the tehcnical systems” The 32nd International scientific conference of the military tehcnical academy, pag.128-133, ISBN 978-973-640-127-5, Bucuresti,1-2 noiembrie, Romania, 2007
- [64] Pisleaga (Bakos) Mihaela. „Processes of movement and transfer in non-homogeobous media” Buletinul stiintific al Universitatii Politehnica din Timisoara, Facultatea de Hidrotehnica, Romania, pag. 47-50 , 2007
- [65] Pisleaga (Bakos) Mihaela, „Modelarea in acvifer de la problema la rezolvare” Workshop Managementul integrat al apei, ISBN 978-973-638-326-7, Timisoara, Romania, 2007
- [66] Pisleaga (Bakos) Mihaela „The influence of the local characteristics upon the distribution of the pollutants in aquife – Case Study” 2nd International Symposium Preventing and fighting hydrological disasters, pag 58, Timisoara , Romania ,29 iunie-1 iulie, 2006
- [67] Prickett, T.A. „Designing Pumped Well Characteristics into Electric Analog Models” Ground Water 5(4):38–46, 1967
- [68] Renard Phillipe „Laboratory determination of the full permeability tensor” Journal of Geophysical research, Vol 106, pg26, 443-26, 452, 2001
- [69] Sabău N. C. “Some proposal for the performances bettering of Drenvsibir soft used at the agricultural drainage design” Analele Univeritatii din Oradea, Fascicula Protectia Mediului, Volumul XV, pag 171-178, 2010

- [70] Sanchez-Vila X, Guadagnini A, Carrera J "Representative hydraulic conductivities in saturated groundwater flow" Rev Geophys 44, RG3002. doi:10.1029/2005RG000169, 2006
- Schulze-Makuch D, Carlson DA, Cherkauer DS, Malik P "Scale dependency of hydraulic conductivity in heterogeneous media" Ground Water 37(6):904–919, 1999
- [71] Sivakumar, B. „Chaos theory in hydrology: important issues and interpretations" J. Hydrol., 227(1–4), 1–20, 2000.
- [72] Tyson, H.N., and E.M.Weber „Groundwater management for the Nation's future. Computer simulation of groundwater basins" J.Hydraulics Div.Am.Soc.Civil Engrs. 90 (HY-4), 59-78. 1964
- [73] Todd DK, Mays LW. "Groundwater hydrology" Wiley, New York, 2005
- [74] Walton, W.C., T.A. Prickett. „Hydrogeologic Electric Analog Computers" Proceedings, American Society of Civil Engineers, paper 3695, 89(HY6) 1963
- [75] Werner A. H. „Physik aquatischer Systeme" cap6, pg11, 2006
- [76] Vogel, H.-J., Roth, K. "Moving through scales of flow and transport in soils" Journal of Hydrology 272, 95–106, 2003
- [77] Qi Bei " Simulation und Analyse der Auswirkungen von Inhomogenitäten im Grundwasserleiter auf Stromungs und Transportprozesse" 2005
- [78] Zayed O. „Groundwater Flow" 2007
- [79] Zhang, D. „Stochastic Methods for Flow in Porous Media" Coping With Uncertainties, Academic Press, San Diego, CA, 2002
- [80] Zhang YE, Mark Person b, Carl W. Gable, „Representative hydraulic conductivity of hydrogeologic units: Insights from an experimental stratigraphy" Journal of Hydrology 339, 65–78, 2007
- [81] Zhou X "Determination of aquifer parameters based on measurements of tidal effects on a coastal aquifer near Beihai, China" Hydrol Process 22(16):3176–3180, 2007
- [82] Zinn, B., Meigs, L.C., Harvey, C.F., Haggerty, R., Peplinski, W.J., Freiherr von Schwerin, C., "Experimental visualization of solute transport and mass transfer processes in two-dimensional conductivity fields with connected regions of high conductivity" Environmental Science and Technology 38, 3916–3926, 2004.
- [83] Raport mediu 2009, www.mmediu.ro
- [84] www.anpm.ro
- [85] Grundwasser Modul 269
- [86] http://www.unikassel.de/fb14/geohydraulik/Lehre/Hydrologie_I/skript/IngHydro1.pdf)
- [87] <http://echo2.epfl.ch/VICAIRE/>
- [88] BRGM Formations Caractéristique panzelor freatiche
- [89] http://www.warem.unistuttgart.de/docs/module/download537ME/2006_lecture3_Geol1.pdf
- [90] Sursa: Raport mediu 2009, www.mmediu.ro
- [91] http://www.adwr.state.az.us/azdwr/Hydrology/Modeling/Model_Basics.htm