„Whether modeling or real life, never give up easily!”
(Wen-Hsing Chiang, a PMWIN megalkotója)

KOVÁCS BALÁZS

Hidrodinamikai és transzportmodellezés (Processing MODFLOW környezetben) I.

Miskolci Egyetem, Műszaki Földtudományi Kar
Szegedi Tudományegyetem, Ásványtani, Geokémiai és Kőzettani Tanszék
GÁMA-GEO Kft.
2004

Lektorálták:

Prof. emer. Dr. Berecz Endre
ny. egyetemi tanár
a kémiai tudomány doktora

és

Dr. Szanyi János
hidrogeológus

A tankönyv megjelenését támogatták:

AQUAPLUS Kft., Sándorfalva
Geo-Reflex Kft., Budapest
GEOHIDRO Kft., Budapest
GEOKOMPLEX Kft., Miskolc
Golder Associates Magyarország Kft., Budapest
Mendikás Kft., Miskolc
Miskolci Egyetem, Műszaki Földtudományi Kara, Miskolc
Smaragd-GSH Kft, Budapest
Oktatási Minisztérium Posztdoktori Ösztöndíja
MTA Bolyai János Kutatói Ösztöndíja

ISBN 963 661 636 1 Ö
ISBN 963 661 637 X

Első kiadás, 2004
© Kovács Balázs, 2004

A kiadásért felel a GÁMA-GEO Kft. ügyvezetője
3519 Miskolc, Bencések útja 111.
www.gama-geo.hu

Nyomdai munkák:
Páskum Nyomda, Szekszárd
Felelős vezető: Farkas János ügyvezető igazgató

1. Előszó helyett…

Ez a könyv egy kétrészesre tervezett mű első kötete. Célja bevezetni az olvasót a hidrodinamikai és transzportmodellezés elméletébe és gyakorlatába.

A kötet első fele a Szabó Imre szerkesztésében korábban megjelent, „Szennyezett területek kármentesítése” című könyv (FILEP et. al., 2002) modellezéssel foglalkozó részének kissé átdolgozott, aktualizált kiadása. A kötet második felében adom közre a Processing MODFLOW for Windows (PMWIN) környezet magyar nyelvű leírását. A közeljövőben – kollégáim közreműködésével - megjelentetni szándékozott második kötetbe a PMWIN környezetben történő transzportmodellezést foglaljuk össze, továbbá számos példán és esettanulmányon keresztül gyakorlati tanácsokat is adunk.

A számítógépes szimuláció egyfelől komoly szakmai feladat, tekintve, hogy nemcsak a vízföldtannak, a szivárgás hidraulikájának, a matematika egyes fejezeteinek ismeretét, de számítástechnikai, sőt egyes esetekben programozási ismereteket is megkövetel. Mielőtt azonban gyorsan letenné a könyvet az olvasó, mondván ez valami ördöngösség, meg kell jegyeznem: éppen az ellenkezője az igaz! A modellezés egy olyan eszköz, amivel könnyen sikerélményhez jutunk, játszva tanulhatjuk meg – általában saját hibáinkon keresztül - a felszín alatti vizek szivárgásának törvényszerűségeit, a fizika által szabott korlátokat. A modellezés során eljátszhatunk a „mi lenne, ha” típusú gondolatokkal, vizsgálhatjuk, hogy „működhet-e” a Természet úgy, ahogyan azt mi gondoltuk.

Lassan 10 éve kezdtem el a modellezés „oktatását” az egyetemeken, és mára elég impulzus ért, hogy belefogjak egy erről szóló könyv írásába. Bevallom, a legtöbbet a hallgatók által felvetett jó, illetve a logikusnak tűnő, de végiggondolva sokszor abszurdnak bizonyult kérdésekből és felvetésekből tanultam, no és saját hibáimból. Volt olyan, hogy egy általam jónak vélt modell előtt akár egy hetet is ültem, mert „nem akart működni”. Valójában sosem a program volt a hibás: vagy téves volt a munkahipotézis, vagy ami még bosszantóbb: nem azt a feladatot írtam le a gép nyelvére, mint amit szerettem volna. A programozók alapigazsága: „a számítógép nem az akaratunkat hajtja végre, hanem a programot”. Ezért a modellezés - a programozáshoz hasonlóan - rászoktat, hogy logikusan rendszerezzük ismereteinket, azokat értelmes formában és akár évekkel később is visszakereshetően lejegyezzük; hogy folyamatosan ellenőrizzük magunkat és akár a legbonyolultabb rendszerekben is - önállóan is értelmes egységeket vizsgálva - tudjunk hibát keresni és találni. Kémikusoktól hallottam azt a modellezésre is igaz mondást, miszerint „Két fajta kísérlet van: a sikeres és a tanulságos!”. Általában csak „tanulságos” modellek sorozatán keresztül jutunk végül el a sikereshez. Ha így nézzük a modellezést, akkor ez az egész olyan, mint egy nagy keresztrejtvény, ahol esetleg sokáig nem illeszkednek a vízszintesen és függőlegesen beírt szavak, de a végére minden a helyére kerül, és egy tiszta, ellentmondásmentes kép alakul ki.

A közös „rejtvényfejtéshez” a Processing MODFLOW for Windows környezetet választottam. Tettem egyrészt azért, mert régóta használom ezt a logikus felépítésű, egyszerű és átlátható programrendszert, másrészt, mert a program Magyarországon is könnyen hozzáférhető teljes verzióban a Springer könyvkiadó által forgalmazott

könyv mellékleteként (Wen-Hsing Chiang - Wolfgang Kinzelbach: "3D-Groundwater Modeling with PMWIN", ISBN 3-540-67744-5, SPIN 10774334; Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York). A programfrissítések letölthetők a http://www.pmwin.net honlapról. A program szerzője sokat segített a magyar Windows és a kód inkompatibilitási hibáinak megoldásában, ötleteket adva a továbbjutáshoz. Nem véletlen, hogy a könyv kapcsán kértem tőle a magyar modellezni tanulóknak egy rövid mottót, ami ott található a könyv első oldalán. Tömörebben nehéz kifejezni a dolog lényegét: Sose add fel, mert sokszor napokig kell gondolkodnod egy probléma megoldásán! Mivel minden modell más és más, a hibák száma is persze végtelen, ezért lehetetlen, hogy „megtanítsak" bárkit is modellezni. A könyv remélem segít bevezetni az érdeklődőket a témakörbe, illetve elmélyíteni korábban szerzett ismereteiket.

A könyv kézikönyv és segédlet is egyben, egyes részei külön-külön is használhatók lehetnek. Az alapegyenletek ismerete nélkül is meg lehet ismerkedni a programmal és viszont. A második kötetben bemutatni szándékozott példák és esettanulmányok is érthetőek és hasznosak lehetnek a korábbi fejezetek ismerete nélkül. Javaslom mindenkinek, bátran lapozzon, ha olyan helyre ért, amit adott helyzetben számára feleslegesnek érez. Több könyvvel voltam már magam is úgy, hogy mindig a legaktuálisabb fejezeteket olvasva szinte mozaikszerűen ismertem meg az egészet, megörülve annak, hogy éppen az is benne van, amit az adott pillanatban kerestem.

Végül megköszönöm a hallgatóim érdeklődését, egyetemi kollégáim segítségét, továbbá a Miskolci Egyetem Műszaki Földtudományi Karának, illetve a Szegedi Tudományegyetem Ásványtani, Geokémiai és Kőzettani Tanszékének, valamint a kötetben szereplő cégek erkölcsi és anyagi támogatását. Ez utóbbi teszi lehetővé, hogy a szakirányú hallgatók a kötethez olcsón, gyakorlatilag a másolás árának megfelelő összegért juthassanak hozzá. Hozzájárulásukkal nemcsak a könyvet, hanem ezen keresztül a magyar felsőoktatást is támogatták, hiszen a könyvet valamennyi magyarországi egyetem szakirányú hallgatója részére elérhetővé kívánjuk tenni. Itt köszönöm meg az előzménymű lektorának Berecz Endre emeritusz professzornak lelkiismeretes munkáját és jelen kötet lektorának, Szanyi Jánosnak valamennyi észrevételét és gondolatát. Számos megjegyzésük, észrevételük egyes részek továbbgondolására, átírására késztetett, amiért hálás vagyok mindkettőjüknek.

Remélem a könyv hasznos segítőtársa lesz a hidrodinamikai és transzportmodellezéssel foglalkozó valamennyi szakembernek, akiknek munkájához és a tanuláshoz kívánok a kitartáson kívül – szószerinti értelemben és bányászköszöntéssel is –

Jó szerencsét!

Kovács Balázs

Miskolc-Szeged, 2004. december 6.

2. A hidrodinamikai és transzportmodellezés feladatai, célja, sajátosságai

A hidrodinamikai és transzportmodellezés, melyet a továbbiakban egyszerűen modellezésnek fogunk hívni, a valóságban a felszín alatt lejátszódó vízmigrációs és ezekhez kapcsolódó szennyezőanyag terjedési folyamatok szimulációja, követése számításokkal. Amennyiben a felállított modellel elvégzett számítások már bekövetkezett, azaz ismert folyamatokat jól követnek, akkor várhatóan alkalmasak feltételezett hatásokra bekövetkező víz-, illetve szennyezőanyag-mozgás számítására, azaz előrejelzésre is.

A modellezés három legfontosabb feladata tehát

- a valóságot jól követő modellek felállítása, és ezáltal a valóságos környezet- és vízföldtani rendszerek működésének megismerése, vízföldtani jellemzőinek és a szennyezőanyagok adott környezetben érvényes terjedési tulajdonságainak meghatározása,
- feltételezett helyzetekben (pl. havária-esetek) bekövetkező események szimulációja, a hatások által érintett térségek meghatározása,
- valós helyzetekben lezajló tér- és időbeli változások előrejelzése (pl. szennyezett terület kármentesítésének előrehaladásának szimulációja, vagy éppen egy magára-hagyott szennyeződés hígulásának maghatározása).

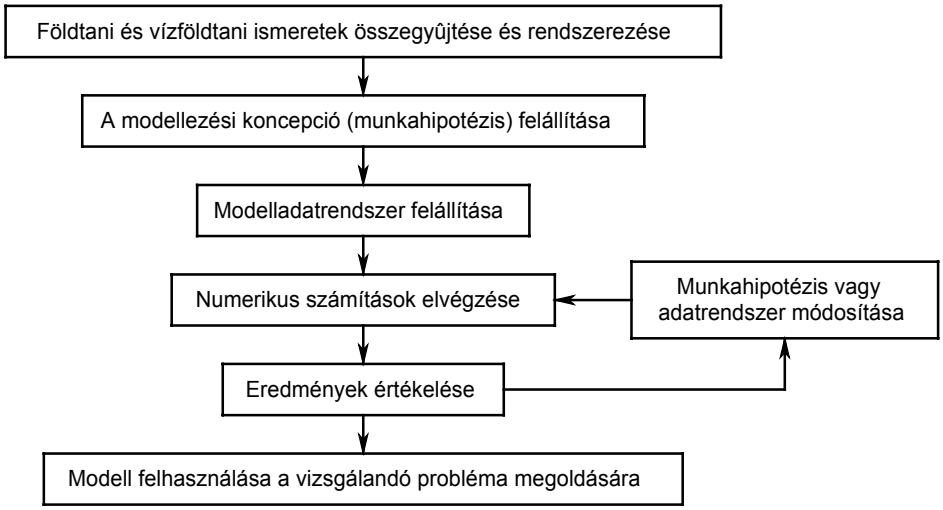
A szimulációs modellek a vízbázisvédelem, továbbá a hulladék-elhelyezés - kármentesítés területén számos probléma vizsgálatára alkalmasak, melyek a teljesség igénye nélkül a következők:

- a felszín alatti vizek áramlási viszonyainak meghatározása egy-egy tervezett vagy megvalósult vízbázis, nagyobb vízföldtani egység vagy hulladéklerakó környezetében,
- termelőkutak, továbbá szennyezőforrások hatóterületének, depressziós terének meghatározása a felszín alatti képződményekben,
- a vízkivételi pontokig vagy a szennyezőforrásoktól kiindulva elérési idők meghatározása, veszélyeztetett vízkivételek meghatározása,
- vízháztartás vizsgálata,
- a hulladéklerakók aljzatszigetelésének, illetve szennyezőforrások izolációjának vizsgálata,
- a szigetelő-rendszerek hatékonysági vizsgálata, adott szennyezőforrás által okozott vagy okozható környezeti terhelések megismerése,
- szigetelő rendszerek egyenértékűségének meghatározása,
- szennyezett területek hatásvizsgálata,
- koncentrációk tér- és időbeli változásának számítása,
- magára hagyott szennyeződések szétterjedésének, az érintett vízadó rétegek öntisztulásának számítása,
- kármentesítési variánsok vizsgálata, a kármentesítés hatékonyságának ellenőrzése, optimális mentesítő létesítmény elhelyezés tervezése, a kármentesítés várható időtartamának maghatározása,

- laboratóriumi kísérletek alapján szennyezőanyagoknak adott képződményben való terjedési jellemzőinek meghatározása.

A modellezés célja bonyolult felépítésű rendszerekben a felszín alatti víz szivárgási irányainak és sebességének kijelölése, a víz nyomásszintjeinek számítása (depresszióstér-alakulás) a térben és az időben. A felszín alatti vizek mozgását szimuláló modelleket *hidrodinamikai modellek*nek nevezzük. A hidrodinamikai modellek eredményeinek felhasználásával különböző szennyezőanyagok mozgását, azaz a koncentrációk tér- és időbeli alakulását is számíthatjuk, ezeket a rendszereket *transzportmodellek*nek nevezzük.

A hidrodinamikai és transzportmodellezés egy fontos sajátossága, hogy előzetes munkahipotézisen, azaz egy prekoncepción alapul, a számítások első feladata a munkahipotézisnek megfelelő modell felépítése, és amennyiben azzal a valós folyamatok követése megvalósítható, akkor a prekoncepciót az adott feladat megoldása szempontjából elfogadhatjuk. Amennyiben a valóságos folyamatok szimulációja nem vagy nem megfelelő szinten végezhető el, úgy az egyébként a terület korábbi vizsgálatain alapuló munkahipotézist módosítani kell, illetve a megváltoztatott munkahipotézisre vonatkozó (azt megerősítő vagy cáfoló) szakmai ismereteket összegyűjteni szükséges (1. ábra). *A munkahipotézis fejlesztését mindaddig szükséges folytatni, amíg az egyfelől a szimulációs feladat megoldásához megfelelővé nem válik, másfelől összhangba nem kerül valamennyi korábbi földtani és vízföldtani ismerettel*.



1. ábra
A modellezési munkafolyamat

Az áramlástanban korábban tanultak során ezzel szemben ismertek voltak geometriai adatok (pl. rétegvastagság), anyagjellemzők (pl. szivárgási tényező, szabad hézagtérfogat, tárolási tényező stb.), a folyamatokat indukáló paraméterek (depressziók,

nyomásszintek, illetve azok különbségei) és egy adott, későbbi időpontban kialakuló helyzet egyértelműen a kiindulási adatokból meghatározhatók voltak.

Az alapvető különbség a két megközelítés között, hogy az egyik esetben ismerjük mind a pontos geometriai jellemzőket, mind az összes képződmény tulajdonságait, ennek következtében az eredményt explicit módon meghatározhatjuk. A vízföldtan területén viszont csak pontokra (fúrási mintákra), vonalakra (pl. fúrólyuk-geofizikai vagy más néven karottázs vizsgálat), esetleg kisebb-nagyobb, de méretileg pontosan meg sem határozható térrészre (pl. próbaszivattyúzás, vertikális elektromos szelvényezés (VESZ)) jellemző tulajdonságokat (szivárgási tényező, fajlagos ellenállás stb.) ismerünk. A geofizikai ismeretek – bár nagyon fontosak a vízföldtani kutatásban, - mégis csupán közvetett információk (földtani interpretációk). A felsoroltak miatt a vízföldtani rendszerek ismeretességi nem lehet olyan szintű, hogy a számítások során az alapadatokból azonnal a végeredmény (pl. nyomásszintek vagy koncentrációk alakulása a térben és az időben) egy lépésben meghatározható legyen. (Az egyszerű áramlástani esetekben homogén izotróp közeget, állandó rétegvastagságot, vízszintes feküt stb. tételeztünk fel, és ilyen módon az eredményt azonnal számíthattuk.)

Másképpen fogalmazva a hidrodinamikai és transzportmodellezés során önmagukban az alapadatok mennyisége és minősége sem teszi lehetővé a feladat matematikailag korrekt megoldását, ezért olyan munkahipotézisre vagy modellezési koncepcióra van szükség, amellyel a hiányzó adatokat, ismereteket pótolni lehet. Tekintettel mind az adatokban, mind a hipotézisben rejlő bizonytalanságokra, a számítás eredményeinek is lesz egy bizonytalansága. Az hogy az eredmények mennyire jól hasonlítanak a valóságra, azt meghatározza a földtani és vízföldtani ismereteken alapuló modellkoncepció minősége, a felépített modell struktúrája, az elvégzett számítási variánsok, illetve a variánsok tapasztalatai alapján végzett koncepcionális modellfejlesztés mértéke. Mindezen tényezőkből eredő kockázat nagysága a modellező szakmai (földtani, vízföldtani, matematikai és számítástechnikai) felkészültségének függvénye, amiből az következik, hogy egy adott probléma vizsgálatára különböző személyek által felépített modellek természetszerűleg különböznek egymástól. A jó modellek ugyanakkor adott kérdésre egymáshoz és a valósághoz nagyon hasonló eredményeket szolgáltatnak. A modell „jósága” csak a megoldandó feladat ismeretében határozható meg, hiszen nincs olyan modell, amelyik minden kérdésre egyformán jó választ lenne képes adni. Általában azt a modellt tekintjük jobbnak két azonos „tudású” rendszer közül, amelyik egyszerűbb. A modellezés során nem lehet olyan szoftvert kifejleszteni, amit bárki használni tud, mert az eredményeket a modellező szakember felkészültsége alapvetően határozza meg. A hidrodinamikai és transzportmodellezés szépsége éppen a feladat alulhatározottságából eredő problémák kiküszöbölésében, a kreatív megoldások alkalmazásában áll.

3. A modellezés szakaszai és lépései

A hidrodinamikai modellezés során a *szivárgás alapegyenletét*, a transzportmodellezéskor a szennyezőanyagok migrációját leíró ún. *transzport-egyenletet* oldjuk meg a nyomásszintek, illetve a koncentrációk meghatározása érdekében. Az egyenletek megoldása mind analitikus, mind numerikus úton történhet. A hidrodinamikai és/vagy transzportmodellek általában numerikus modellek, melyek általában a *véges differencia* vagy a *végeselem módszer* alkalmazásán alapulnak.

A modellezés teljes folyamata általában *két szakaszra bontható*. Az *első szakasz*ban a cél az áramló közeg sebességének és áramlási irányának meghatározása a modellezett térben. A számítási eredmények alapján lehetőség nyílik a rendszerek vízháztartásának, vízmérlegének meghatározására is. Ezt követi a számított szivárgási sebességeknek és a transzportegyenletnek felhasználásával - a meghatározott terjedési és anyagi tulajdonságokkal rendelkező - szennyezőanyag mozgásnak számítása, amit a modellezés *második szakaszának* nevezünk (2. ábra).

Az áramlási sebességek irányának és nagyságának, valamint annak időbeli változásának ismeretében az első szivárgáshidraulikai számítási lépcső elhagyható, és a transzportfolyamat szimulációja közvetlenül megkezdhető, illetve amennyiben a probléma megoldása a szennyezőanyagok terjedésének számítását nem igényli, akkor a második szakasz hagyható el.

Mind a hidrodinamikai, mind a transzportmodellezési szakasz több lépésből áll:

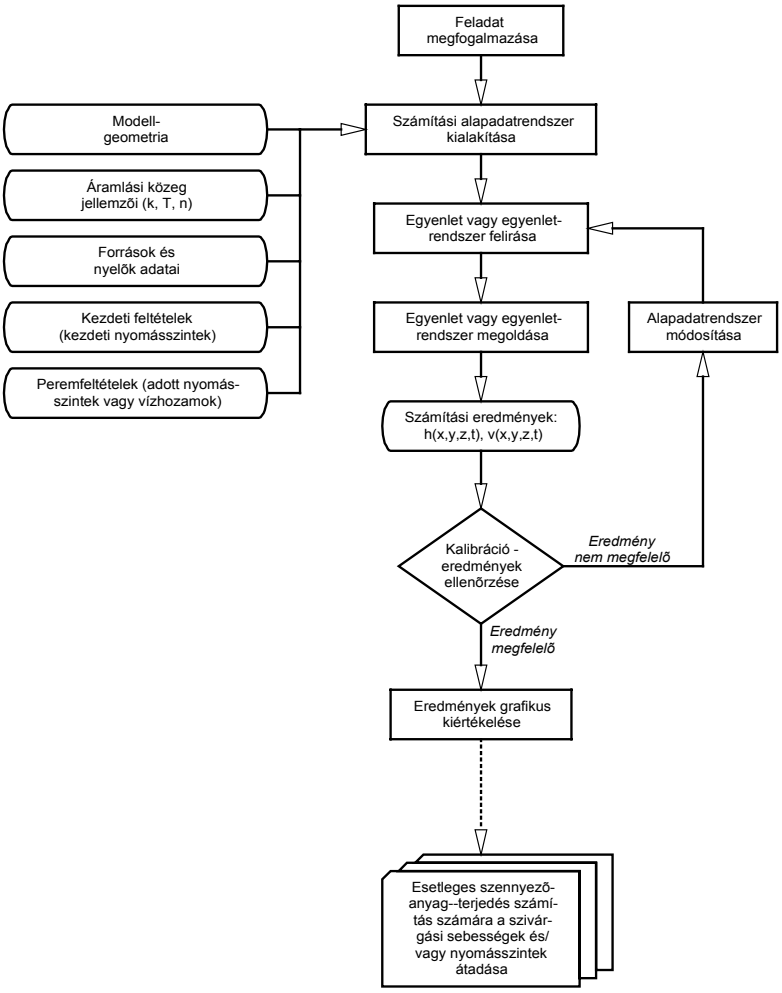
1. lépés, az előkészítés
Az előkészítő munkafázis célja a teljes elvégzendő számítási folyamat körvonalazása a feladat konkretizálása. A feladat meghatározásával egyidejűleg célszerű a modellszámítástól elvárható eredményeket számba venni, és azokat összevetni a megrendelő által megfogalmazott elvárásokkal. A gyakorlati modellezés során felmerülnek olyan problémák, melyeknek a megoldására a számítások egyáltalán nem alkalmasak, esetleg olyan mértékbe pontatlanok, ami miatt értelmetlenné válhat az alkalmazásuk.

Már az előkészítés fázisában fontos kigondolni, hogy az adott feladat szempontjából milyen egyszerűsítések engedhetők meg. Ezen belül is fontos lehet a szimmetriaviszonyok kihasználása, a modell dimenziószámának előzetes meghatározása, azaz, hogy a vizsgálandó folyamatokat lineáris, sík vagy térmodellezés segítségével lehet a legcélravezetőbben leírni.

Az előkészítés egy kritikus pontja a modellezendő térnek a lehatárolása, mert az ekkor meghatározott térrészre fog a második lépés, az adatgyűjtés elsősorban koncentrálni. Mivel pontosan a modellezendő térrész az előkészítő fázisban nem határozható meg, mindig a még indokolható legnagyobb területben határozzuk meg a földtani és vízföldtani adatgyűjtés tárgyát.

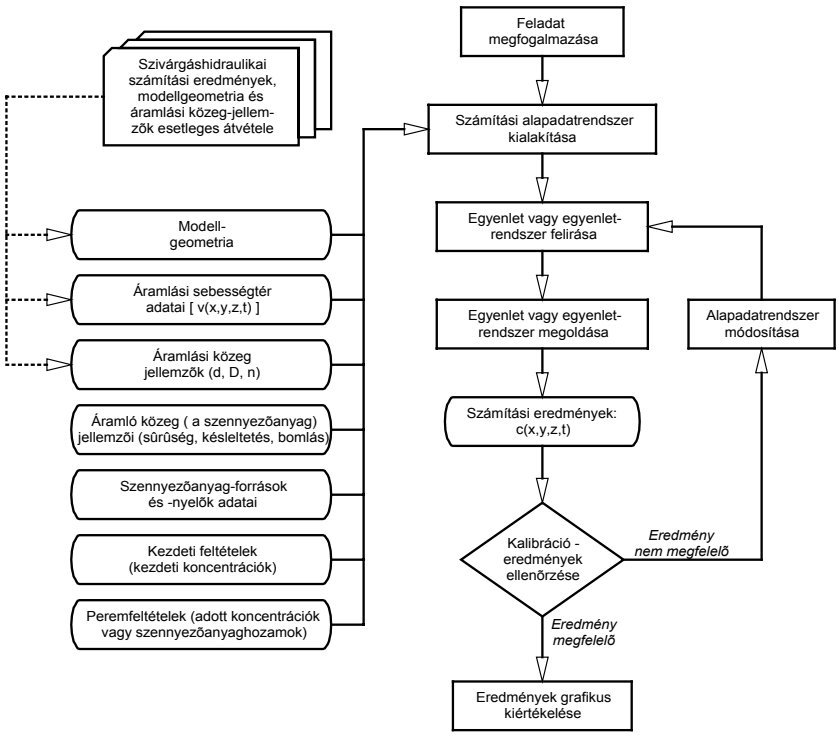
Az előkészítés során már megfontolandó a célszerű matematikai számítási eljárás kiválasztása, amelynek segítségével az előzetesen felmért mennyiségű és minőségű adatállományból a körvonalazott feladat a megkívánt szinten megoldható, de ameny-

nyiben ez nem lehetséges, akkor a probléma megoldására biztosan nem alkalmazható módszereket ki kell zárni.



2.a ábra
A hidrodinamikai számítás folyamata

2. lépés, a földtani és vízföldtani adatgyűjtés és kutatás
A modellezéshez szükséges földtani és vízföldtani adatok összegyűjtésén túl sokszor nyílik lehetőség új ismeretek megszerzésére is kutatás révén. A kutatást csak a meglévő ismeretek áttekintése és rendszerezése után célszerű megkezdeni, mert akkor derülnek ki adathiányos vagy kevésbé ismert területrészek. Az adatgyűjtés és a kutatás során a kutatáskor meghatározott valamennyi elvet figyelembe kell venni, de a modellezés szempontjából különös fontosságot kell tulajdonítani a teljesség elvének és az egyenletes megismerés elvének a teljesülésére.



2.b ábra
A transzport-számítás folyamata

A munkafázis célja egy a feladat megoldásához megfelelő szintű, ellentmondásmentes földtani és vízföldtani képnek a kialakítása. A munkába célszerű a térséget ismerő, tapasztalt geológus és hidrogeológus szakemberek bevonása. A munkafázis során meg kell ismerni a modellezett tér és tágabb környezetének geológiáját és vízföldtanát és ennek alapján a megoldáshoz szükséges adatrendszert össze kell állítani (a helyszíni és laboratóriumi mérések eredményei, földtani és vízföldtani térképek, hidrológiai, hidrometeorológiai adatok, stb.). Amennyiben lehetséges, akkor feltétlenül javasolható a régebbi adatoknak újabb adatokkal való kiegészítése és ellenőrzése. Különösen fontos a felszín alatti vizek áramlási és nyomásviszonyaira vonatkozó ismeretek frissítése és kiegészítése, mert pl. a rétegvízadók nyomásviszonyai akár 10-15 éves viszonylatban is számottevően megváltozhatnak. A nyomásviszonyok pontosítása mind a hidrodinamikai, mind a transzportmodellezés szempontjából nagyon fontos. Ugyancsak figyelmet kell fordítani a terület környezetében található víztermelési helyek megismerésére, valamint a szennyező-források feltárására. Mind a vízigények, mind a szennyező-források intenzitása időben jelentősen változhat, új potenciális vagy valós szennyező-források jelenhetnek meg, melyeknek a figyelembe vétele alapvető fontosságú. A szennyező-forrásokkal kapcsolatosan szükséges a szennyezett talajokat és talajvizet térben lehatárolni víz és talajkémiai mérések alapján. Lehetőség van az adathiányos területeken a meglévő ismeretek alapján

geostatisztikai módszerekkel sűríteni az adatokat, azonban az így származtatott adatok szükségképpen magukban hordozzák a kiindulási adatmező hibáit.

Az adatgyűjtési lépcsőbe tartozik az első számítási szakasz elhagyása esetén a vízadó szivárgási viszonyaira vonatkozó adatrendszer kialakítása, esetleg korábbi hidraulikai számítások eredményeinek átvétele. Gondoskodni kell az esetlegesen átvett hidrodinamikai modelladatok ellenőrzéséről.

Az adatgyűjtés és a kutatás során felhalmozott ismereteket szükséges rendezett formában összefoglalni és annak alapján a modellezésre vonatkozó korábbi döntéseket (modellezett tér lehatárolása, alkalmazandó számítási módszer kiválasztása stb.) felül kell vizsgálni. A rendelkezésre álló adatrendszert értékelni kell, az esetleges felmerülő ellentmondások kiszűrését a területre vonatkozó földtani vízföldtani koncepció alapján el kell végezni.

Az adatgyűjtés és kutatás tekintetében általános irányelv, hogy a modellezés eredményeinek pontossága legfeljebb az adatrendszer pontosságával egyező nagyságú lehet. Az angolszász irodalomban ezt „Rubish in, rubish out" jelenségnek nevezik, azaz rosszul felállított adatrendszer csak hibás eredményekhez vezethet.

3. lépés, első számítási lépcső

Az első számítási lépcső során elvégezzük az első próbaszámításokat, feltárjuk az adathiányokat és pótoljuk azokat. Bármennyire is alapos a kutatás és adatgyűjtés mégis előfordul, hogy a vízföldtani vagy földtani szakemberek által felállított koncepció csak részben igazolódik, ilyenkor az első számítási eredmények alapján további adatgyűjtést esetleg újabb vízadó rétegekre vonatkozó adatok megszerzését irányozhatjuk elő.

A leggyakoribb hibák:

- A vízföldtani kutatás alapján a modellezett térrész határain felvett peremfeltételeket a számítások nem igazolják.
- A földtani, vízföldtani kutatás kapcsolatot állapított meg szomszédos hidrogeológiai egységekkel, mélyebben vagy magasabban települő rétegekkel, melyekre vonatkozóan a számításokat ki kell terjeszteni, ugyanakkor az újonnan a modellbe integrált térrészekre információhiány jellemző.
- A földtani, vízföldtani szakemberek által megadott, becsült vagy szakirodalmi adatok a valóságostól annyira eltérőek, hogy a modell egészében vagy csak egy kis területén irreális eredményekhez vezetnek akár az iteratív számítások legsúlyosabb numerikus hibáját, divergenciáját is okozzák. Leginkább a maradó beszivárgás, szomszédos vízadókból és hidrogeológiai egységekből átadott vízmennyiségek, járulékos vízkészletek téves meghatározása okozza a hibát.

Az első számítási lépcső során lépésről lépésre megoldjuk a számítások során felvetődő problémákat, korrigálva az adatrendszert. Ebben a fázisban komoly segítséget jelent a térséget ismerő hidrogeológus szakemberrel való folyamatos egyeztetés, hiszen a modell stabilitásának biztosítása ugyan a modellező szakember feladata, ugyanakkor a számítások alapján felvetődő koncepcionális ellentmondások kiszűrése és feloldása már csak a modellező és a koncepciót kidolgozó szakember együttműködésével lehetséges.

Az első számítási lépcső biztosítja a kalibráció alapadatait.

4. lépés, a modell kalibrálása és paraméterérzékenységi vizsgálat:

A kalibráció során a ismert valós folyamatokat szimulálunk a koncepcionálisan helyesnek tartott számítási modellel, miközben a számítási eredményeket a valós eredményekhez közelítjük az alapadat-rendszer szisztematikus változtatásával.

A kalibrációt megkönnyíti az ún. paraméter-érzékenységi vizsgálat. A vizsgálat során a már jól működő modellben az egyes felvett paraméterek racionális szélsőértékei mellett vizsgáljuk a modell válaszait, ezen keresztül az egész szimulált rendszer viselkedését ismerjük meg. A paraméter-érzékenységi vizsgálattal arra is választ kapunk, hogy egy paraméter ismertségének bizonytalansága lehetővé teszi-e a vizsgált kérdés megválaszolását.

A kalibrációt követően egy olyan számítási rendszer alakul ki, amely az ismert folyamatokra a valóságos, vagy azt legjobban megközelítő választ szolgáltat. Munkahipotézisünk, hogy amennyiben ez a helyzet fennáll, akkor várhatóan ismeretlen új hatásokra (új víztermelő létesítmények, új vagy megszüntetett szennyezőanyag források) a modell valósághű válaszokat fog produkálni, ami természetesen csak bizonyos határok között lehet igaz.

5. lépés, második számítási lépcső

A második számítási lépcsőben elvégezzük azokat a szimulációkat, amelyeket az első szakaszban feltett kérdésekre a választ megadhatják. Ekkor elkészítjük az adott rendszer viselkedésére vonatkozó előrejelzéseket, a legkedvezőbb és a legkedvezőtlenebb eseteket szimulálva. A tervezett variánsok közül kiválasztjuk a leghatékonyabbat, esetleg az ismeretlen felépítésű képződményeket sztochasztikus modellezéssel vizsgáljuk. A második számítási lépcső az, amikor a modellt már valóban új problémák vizsgálatára használjuk fel.

6. lépés, az eredmények kiértékelése

A kiértékelés folyamán összegezzük és ábrázoljuk az eredményeket, ezeknek alapján megadjuk feltett kérdésekre a szabatos választ. A kiértékelési fázis feladata megfogalmazni a számítások korlátjait, összegezni az elkerülhetetlenül elkövetett hibákat, egyszerűsítéseket, megadni a felsorolt tényezők eredményre gyakorolt hatásait. A kiértékelés során további, mások által végzett munkafázisok részére megfelelő adaptációkat is készítünk (pl. környezeti hatástanulmányhoz, létesítési vagy megvalósítási tervhez stb.).

A munka lezárásaképpen elkészítjük a modell teljes és részletes dokumentációját. A dokumentációnak minden lényeges kérdésre kiterjedőnek kell lennie. Ismertetnie kell a kialakított modellkoncepciót, indokolnia kell a mások által korábban felvett koncepcióktól való lényegesebb eltéréseket. A dokumentációnak olyan mértékig részletesnek kell lennie, hogy a modell felépítése teljesen rekonstruálható legyen, annak minden előnyével és hibájával együtt. Korrekt megoldás a modell adatrendszerének átadása a megbízónak, ezzel is segítve további munkáját.

4. A víz porózus közegbeli mozgásának törvényszerűségei

4.1. A hidrodinamikai modellezés elméleti alapjai, a szivárgás alapegyenlete

A hidrodinamikai modellezés során a vízmozgás alapegyenletének megoldását keressük permanens és nem permanens állapotban, illetve telített vagy telítetlen közegben, ezért a megoldási lehetőségek ismertetését megelőzően bemutatjuk a szivárgás alapegyenletének alakjait, a Laplace- és Richards-egyenleteket. A szivárgás alapegyenletének levezetését az ismert felszín alatti szivárgásokkal foglalkozó hidraulika könyvek (BEAR-VERRUIJT, 1987; KINZELBACH, 1986; FREEZE-CHERRY, 1979) részletesen ismertetik.

A szivárgás alapegyenlete matematikai formában írja le a vízmozgás törvényszerűségeit. *A szivárgást leíró alapvető összefüggés a Darcy-törvény; ezt a porózus közegben áramló folyadékok tömegmegmaradásának kontinuitási egyenletével összeillesztve a szivárgás alapegyenletét kapjuk meg.*

Az eredményként kapott parciális differenciál-egyenlet egymástól alig eltérő formában írható fel a permanens és nem permanens, telített közegbeli áramlás esetére, sőt kiterjeszthető a telítetlen közegbeli szivárgásokra is. Mindhárom esetre vonatkozóan megállapítható, hogy a kapott parciális differenciálegyenlet a matematikusok számára nagyon ismert, ezért megoldásukra vonatkozóan számos eljárást dolgoztak ki.

4.1.1. Telített közegbeli permanens szivárgás

Telített közegben a permanens vízmozgást – mellőzve a levezetést - az alábbi egyenlet írja le:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 h}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 h}{\partial z^2}=0\,. \qquad (4.1.)$$

Ez az egyenlet a matematikában jól ismert *Laplace-egyenlet*, *melynek megoldása mutatja meg a h piezometrikus szint nagyságát bárhol egy háromdimenziós áramlási térben*. Kétdimenziós esetben a Laplace-egyenlet megfelelő tagja kiesik, így kapjuk a nyomás-szint eloszlást a vizsgált sík mentén.

Amennyiben a közeg anizotróp, akkor a szivárgási tényező vektor k_x, k_y és k_z komponensei nem egyenlők és ekkor a szivárgás alapegyenlete anizotróp, porózus, telített közeg esetére permanens állapotot feltételezve:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(k_x\frac{\partial h}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(k_y\frac{\partial h}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(k_z\frac{\partial h}{\partial z}\right)=0\,, \qquad (4.2.)$$

ahol k_x, k_y és k_z a szivárgási tényező tenzor főátlójának elemei.

4.1.2. Telített közegbeli nem permanens szivárgás

A nem-permanens szivárgás telített közegbeli alapegyenlete:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(k_x \frac{\partial h}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(k_y \frac{\partial h}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(k_z \frac{\partial h}{\partial z}\right)=\rho S_s \frac{\partial h}{\partial t}, \qquad (4.3.)$$

ahol ρ a folyadék sűrűsége, S_s a fajlagos tárolási tényező. *A fajlagos tárolási tényező az egységnyi nyomásszint-változás hatására a kőzet kompressziója miatt, illetve a víz tágulása miatt felszabaduló vízmennyiség összege*, azaz

$$S_s = \rho g(\alpha + n\beta), \qquad (4.4.)$$

ahol α a kőzet, β a folyadék kompresszibilitása és n a hézagtérfogat. A fajlagos tárolási tényező dimenziója [1/L], általában 1/m az SI rendszerben.

Egy m vastagságú telített rétegben (zárt tükrű vízadó) a *transzmisszivitás* T=km és a *tárolási tényező* definíciószerűen $S=S_s m$:

$$S = S_s m = \rho g m(\alpha + n\beta) \qquad (4.5.)$$

A tárolási tényező egy zárttükrű vízadóban megmutatja, hogy mekkora vízmennyiség szabadul fel egy egységnyi felületű részén a vízadónak, miközben a nyomásszint egységnyit csökken. A tárolási tényező dimenziónélküli szám, nagysága a 0,005-0,00005 intervallumban szokott változni. SZÉKELY F. (1986) szerint az Alföldön a tárolási tényező nagysága 0,001 körüli. A tárolási tényező vízrekesztő képződményekre is definiálható, azonban ebben az esetben az nβ tag elhanyagolható nagyságú.

Amennyiben a közeg izotróp és homogén, akkor a matematikában diffúzió-egyenletként ismert formulát kapjuk:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 h}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 h}{\partial z^2}=\frac{S_s}{k}\frac{\partial h}{\partial t}=\frac{\rho g(\alpha + n\beta)}{k}\frac{\partial h}{\partial t} \quad . \qquad (4.6.)$$

Az áramlási térben tehát a nyomásszintek változása a térben és az időben a k szivárgási tényező, α közeg összenyomhatóság és n hézagtérfogattól, mint közegjellemzőtől, és a folyadék β összenyomhatóságától és ρ sűrűségétől függ.

Amennyiben egy m vastagságú horizontális vízadót tekintünk, akkor a tárolási tényező $S=m\cdot S_S$, illetve a transzmisszivitás $T=k\cdot m$ és ekkor

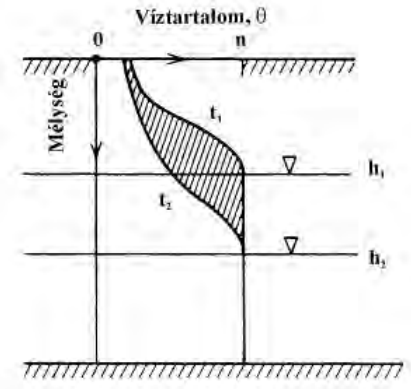
$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 h}{\partial y^2}=\frac{S}{T}\frac{\partial h}{\partial t}, \qquad (4.7.)$$

ami a Theis-Jacob-féle analitikus megoldás kiinduló összefüggése. Az egyenlettel számítható a x, y síkbeli koordináták függvényében a piezometrikus szint, amennyiben a vízadó T transzmisszivitása és S tárolási tényezője ismert.

A nyílt tükrű rendszerben a víztárolási képességet a *fajlagos hozam*mal jellemezhetjük. *A fajlagos hozam az a vízmennyiség, amennyi felszabadul egy egységnyi felületű, nyílt tükrű vízadóból miközben a nyomásszint egységnyit csökken*. A 3. ábra a víztartalom változását mutatja két időpontban (t_1 és t_2) a mélység függvényében. Az ábrán sraffozással jelölt, a görbék közötti terület nagysága arányos a felszabaduló vízmennyiséggel. Amennyiben a nyomásszint-változás éppen egységnyi, akkor a sraffozott terület éppen a fajlagos hozamnak megfelelő nagyságú. Amennyiben a telítetlen zó-

nában tárolt vízmennyiségeket elhanyagoljuk, akkor a fajlagos hozam értéke megegyezik a szabad hézagtérfogat értékével.

A fajlagos hozam S_y értéke általában 0,01-0,3 közötti. A nagyobb értékek azt jelzik, hogy a pórusok nagy része leürül a nyomásváltozások hatására, a maximális vízkapacitás, azaz a vízmennyiség, amit a kőzet a gravitációs erő ellenében magában tartani képes, kicsi.



3. ábra
A fajlagos hozam értelmezése

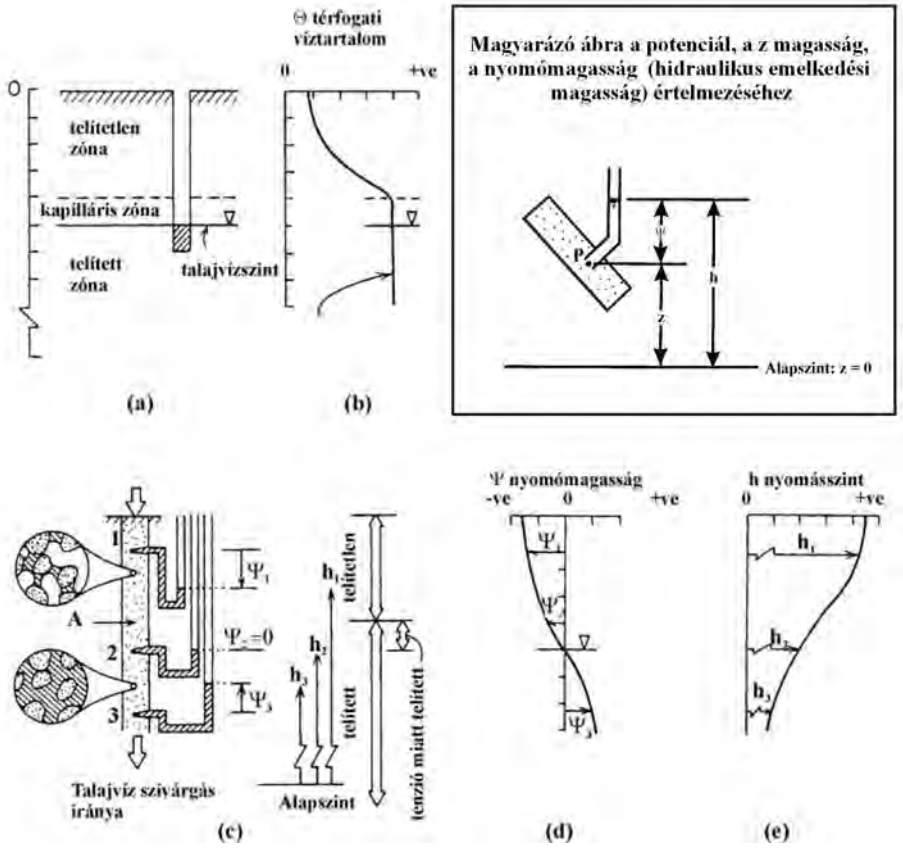
4.1.3. Nem permanens szivárgás telítetlen közegben

A *telítettséget* tekintsük a $\Theta' = \Theta / n$ alakban, ahol Θ a térfogati víztartalom és n a hézagtérfogat. Következményként a telítettség akkor 100%, amikor a térfogati víztartalom és a hézagtérfogat értéke azonos. Tekintsünk egy függélyt a felszíntől a talajvízig. A felszínen és közelében telítetlen a közeg, a talajvízszint közelében telített. Bár egyszerűsítve a telített és telítetlen közeg határát a talajvízszint magasságában tételezhetnénk fel, ez nem igaz, mert a talajvíz felett a kapilláris zóna található. A talajvízszint mélységében a pórusfolyadék p nyomásszintje pontosan megegyezik a légköri nyomással ezért a ψ nyomómagasság zérus. A talajvízszint alatt az értelmezés szerint $\psi>0$, ezért logikusan a talajvízszint felett $\psi<0$, ha $h=z+\psi$ (4. ábra). Telítetlen közegben a víz a talaj pórusaiban felületi feszültség miatt fellépő erők hatása alatt áll és az emiatt fellépő negatív nyomómagasságot szívómagasságnak vagy tenziónak szokták nevezni.

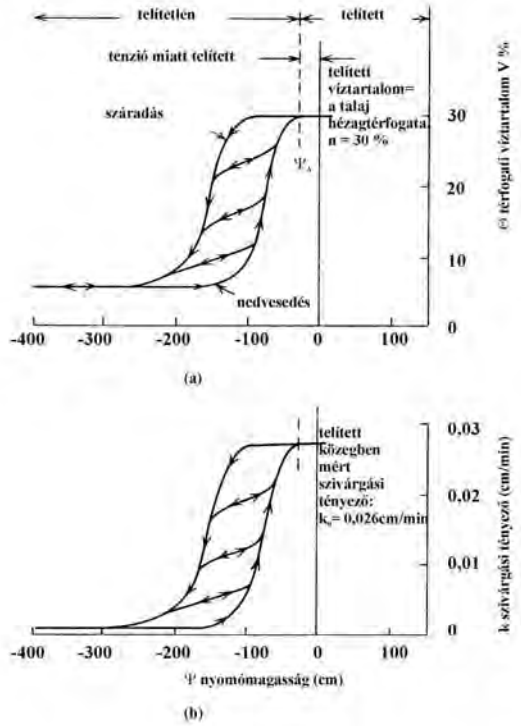
A telítetlen zónában mind a Θ térfogati víztartalom, mind a k szivárgási tényező a ψ nyomómagasság függvénye. Mint azt kísérletek bizonyították a térfogati víztartalom-nyomómagasság összefüggésnek alakja eltérő nedvesedés és száradás folyamán, azaz a görbének hiszterézise van (5. ábra:a). Mint ahogy az ábráról látható, a Θ térfogati víztartalom nemcsak a telített közegben ($\psi\geq0$), hanem a telített állapothoz közeli, kis negatív nyomómagasságok, tenziók tartományában is megegyezik a hézagtérfogattal. Ez a tartomány finom szemcsés képződményeknél nagyobb, durva szemcsés anyagoknál gyakorlatilag nem létezik. Azt a ψ_a tenzió-értéket, ahol a térfogati víztartalom csökkenni kezd levegő-belépési nyomómagasságnak, a p_a nyomásszintet levegő-be-

lépési vagy másképpen buborék nyomásnak nevezik. A térfogati víztartalomhoz hasonlóan a szivárgási tényezők negatív nyomómagasság függésének is hiszterézise van. A $\psi \geq \psi_a$ tartományban $k=k_0$, ahol k_0 a telített közeg szivárgási tényezője. Mivel a k szivárgási tényező a ψ nyomómagasság függvénye és ugyanakkor a Θ térfogati víztartalom is függvénye a ψ nyomómagasságnak, ebből következik hogy a szivárgási tényező egyben a térfogati víztartalom, illetve a telítettségnek is a függvénye, azaz a szivárgási tényező növekszik a telítettséggel (5. ábra:b) Telítetlen közegben a víz mozgását az ábrán látható karakterisztikus görbék, azaz a $k=k(\psi)$ és a $\Theta=\Theta(\psi)$ görbék határozzák meg, ezért ezeket a telítetlen közegben végbemenő vízmozgás karakterisztikus görbéinek is szokták nevezni. A karakterisztikus görbe meredeksége a telítetlen közeg tárolási jellemzője, amit *c fajlagos talajnedvesség kapacitás*nak neveznek:

$$c = \frac{d\Theta}{d\psi}. \qquad (4.8.)$$



4. ábra
A talajvíz állapota a felszín közelében
(FREEZE – CHERRY, 1979)



5. ábra
A telítetlen közegbeli vízmozgás karakterisztikus görbéi
(FREEZE – CHERRY, 1979)

Tekintettel arra, hogy a karakterisztikus görbe nem lineáris és hiszterézise is van, ugyanez mondható el a fajlagos talajnedvesség-kapacitásról is. Amennyiben a nyomómagasság nagyobb, mint ψ_a, akkor c=0, azaz további víz nem tárolódik, mert a közeg telítetté vált.

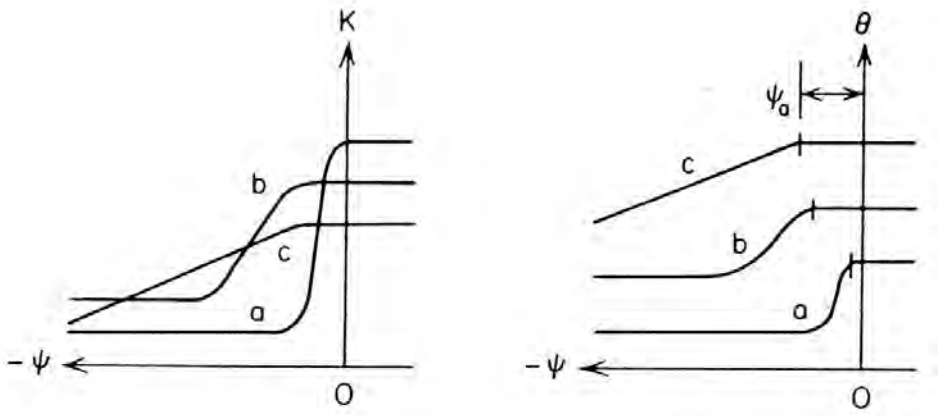
A karakterisztikus görbék alakja a porózus közeg szemnagyságától jellegzetesen függ. A 6. ábra néhány képződmény összehasonlító karakterisztikus görbéit mutatja be a hiszterézist figyelmen kívül hagyva.

A Darcy- törvényt telítetlen közegre vonatkozóan az alábbi formában írhatjuk fel:

$$v = -k(\psi) \cdot \nabla h \qquad (4.9.)$$

A szivárgás alapegyenletének szokásos formája telítetlen közeg esetére:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(k(\psi)\frac{\partial h}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(k(\psi)\frac{\partial h}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(k(\psi)\frac{\partial h}{\partial z}\right) = \frac{\partial \Theta}{\partial t}. \qquad (4.10.)$$



6. ábra
Homok (a), iszapos homok (b) és iszapos agyag (c) jellemző karakterisztikus görbéje (FREEZE – CHERRY, 1979)

A (4.10.) egyenletet olyan formára is szokás hozni, hogy a független változó a Θ térfogati víztartalom helyett a ψ nyomómagasság, ehhez vegyük figyelembe, hogy a térfogati víztartalom időbeli változása a nyomómagasság változásán keresztül megy végbe, azaz $\frac{\partial\Theta}{\partial t}=\frac{\partial\Theta}{\partial\psi}\cdot\frac{\partial\psi}{\partial t}$, majd használjuk a c fajlagos talajnedvesség-kapacitás definícióját, valamint, hogy h=z+ψ:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(k(\psi)\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(k(\psi)\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left[k(\psi)\left(\frac{\partial\psi}{\partial z}+1\right)\right]=c(\psi)\frac{\partial\psi}{\partial t}. \qquad (4.11.)$$

A (4.11.) egyenlet a talajfizikában igen gyakran használt Richards-egyenlet amely meghatározza a ψ nyomómagasságokat a telítetlen áramlási tér bármely pontjában egy adott időpontban. A megoldás a k=k(ψ) és a C=C(ψ) vagy Θ=Θ(ψ) karakterisztikus görbék ismeretét kívánja meg.

4.2. A szivárgás alapegyenletének megoldási módjai

A szivárgás alapegyenletét mind analitikus, mind numerikus úton meg lehet oldani. Az analitikus megoldásokat az egyenlet integrálással való megoldásával kapjuk meg. Az integrálás csak néhány esetben és kizárólag úgy oldható meg, ha néhány közegjellemzőt vagy egyéb paramétert a teljes rendszerben állandónak tekintünk és kihasználjuk a megoldandó probléma speciális tulajdonságait, pl. hengerszimmetriáját vagy végtelen hosszúnak tételezzük fel a vizsgált létesítményt. Az analitikus megoldás eredménye matematikailag általában egzakt, ritkább esetben közelítő, pl. sorba fejtéses megoldás. Az analitikus megoldások jellemzője, hogy az eredményt egy explicit összefüggéssel meghatározható.

A *numerikus megoldások* ezzel szemben matematikai szempontból közelítő megoldások. Lehetővé teszik, hogy a képződmény jellemzők tér és időbeli változásait figyelembe vegyük a megoldásoknál. Általános alakú létesítmények környezetében határozhatók a nyomásszintek, illetve a szivárgás sebességvektorának komponensei. A numerikus megoldások általában egy egyenlet-rendszer vagy mátrix-egyenlet iteratív megoldására vezetik vissza a vizsgált problémát. A megoldás nemcsak közelítő, hanem numerikus hibákkal is terhelt. A szivárgás alapegyenletének legismertebb numerikus megoldásai a véges differencia módszerrel és a végeselem módszerrel való megoldás, melyeket a következőkben részletesen bemutatunk.

4.2.1. Analitikus megoldások

Zárt tükrű rendszerben, álló víz esetén , permanens vagy más néven stacionér áramlási helyzetben a (4.1.) Laplace egyenletet használhatjuk a nyomásszintek változásának meghatározására.

Egy végtelen hosszú galéria esetén (7. ábra) a galériára merőleges irányú x tengely mentén a változásokat (tekintettel arra, hogy a nyomásszintek nem változnak y és z irányban, azaz $\frac{\partial h}{\partial y} = 0$ és $\frac{\partial h}{\partial z} = 0$) az alábbi egyenlet írja le:

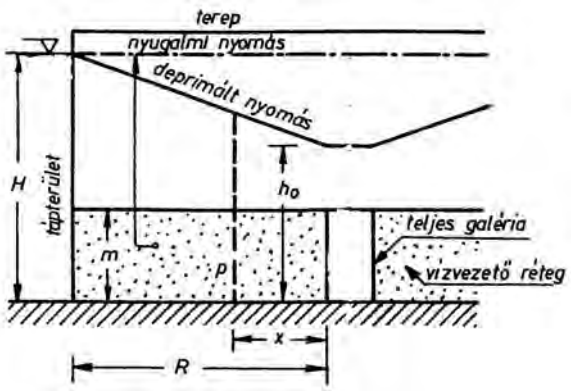
$$\frac{d^2 h}{dx^2} = 0. \qquad (4.12.)$$

Integrálva:

$$\frac{dh}{dx} = K_1, \qquad (4.13.)$$

majd tovább integrálva:

$$h = K_1 x + K_2, \qquad (4.14.)$$



7. ábra
Zárt tükrű galéria számítási ábrája

azaz a piezometrikus szintek zárttükrű galériánál a galériától mért távolság függvényében lineárisan változnak, a szivárgás sebessége, ami a nyomásszintek első deriváltja (4.13.) állandó.

Tekintettel arra, hogy a nyomásszint a galériában h_0 a tápterület határán H, a megoldás két peremfeltétele $h=h_0$ az x=0 helyen és h=H az x=R helyen, ahol R a galéria távolhatása, vagy a végtelennek tekintett utánpótlódási hely (pl. folyó) távolsága. Behelyettesítve a peremfeltételeket (4.14.) egyenletbe a K_1 és K_2 konstans értéke meghatározható:

$K_2 = h_0 \quad és \quad K_1 = \dfrac{H - h_0}{R}$, és ezért a (4.12.) egyenlet megoldása:

$$h = \frac{H - h_0}{R} x + h_0, \qquad (4.15.)$$

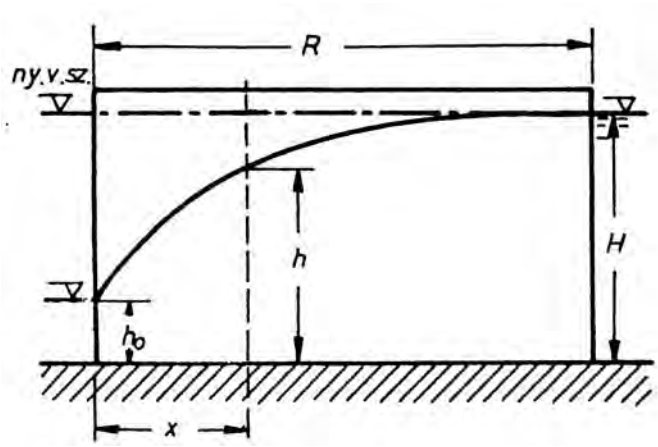
a *lamináris (Darcy-féle) szivárgási sebesség* pedig (4.15.) első deriváltja, az I hidraulikus gradiens és a szivárgási tényező szorzata, azaz

$$v = kI = k\frac{dh}{dx} = k\frac{H - h_0}{R} \qquad (4.16.)$$

A *végtelen galéria egységnyi hosszúságú szakaszán belépő hozam* az m vastagságú réteget figyelembe véve az adott irányból:

$$q_g = mv = mk\frac{H - h_0}{R} \qquad (4.17.)$$

Nyílt-tükrű, oldalról táplált galéria esetén (8. ábra) az áramlási keresztmetszet (ami zárttükrű esetben a rétegvastagság és a hosszúság-egységnyi vastagság szorzata) nem állandó, hanem h nyomásszint függvényében változik.



8. ábra
Nyílt tükrű galéria számítási ábrája
(JUHÁSZ, 1981)

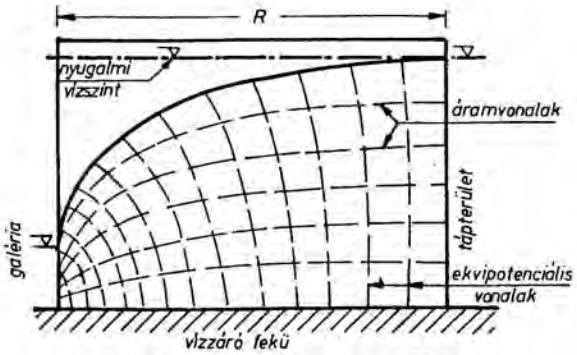
A galéria hosszúságegységre eső hozama:

$$q_g = hv = h \cdot kI = kh\frac{dh}{dx} = k\frac{H^2 - h_0^2}{2R} \qquad (4.18.)$$

amiből a nyílt-tükrű galéria esetén a depressziógörbe egyenletére egy gyökös összefüggést kapunk:

$$h = \sqrt{\frac{2q_g}{k}x + h_0} \qquad (4.19.)$$

A megoldás *az áramtér Dupuit-Thiem-féle* közelítésén alakul, vagyis hogy az ekvipotenciális vonalak függőlegesek, és az arra merőleges áramvonalak vízszintesek. Ezen feltételezés mellett az áramvonalak egy-egy görbévé nem köthetők össze, hanem szakadásuk van. A valós áramlási helyzetben az áramkép a 9. ábra szerinti, azonban ebben az esetben az egyenlet integrálással nem oldható meg.



9. ábra
Nyílt tükrű galéria közelében kialakuló áramvonalak
(JUHÁSZ, 1981)

Magányos kút esetén permanens állapotban a z irányú nyomásszint-változásokat hanyagoljuk el, ekkor a (4.1.) Laplace egyenletet az alábbi alakban írhatjuk fel:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} = 0, \left(\frac{\partial h}{\partial z} = 0\right). \qquad (4.20.)$$

Tekintettel a kút körül kialakuló depresszióstér hengerszimmetriájára a Laplace egyenlet polár-koordinátás alakjára térünk át:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial h}{\partial r} = 0. \qquad (4.21.)$$

Integrálva:

$$\frac{\partial h}{\partial r} = K_3 \ln r\,, \tag{4.22.}$$

majd

$$h = K_3 \ln r + K_4\,, \tag{4.23.}$$

azaz a piezometrikus szintek a magányos kútnál az r sugárirányú távolság függvényében logaritmikusan változnak, a szivárgás sebessége, ami a nyomásszintek első deriváltja (4.22.) a sugárirányú távolsággal logaritmikus összefüggésben áll.

Tekintettel arra, hogy a nyomásszint a kútban h_0 a tápterület határán H, a megoldás két peremfeltétele $h=h_0$ az r=0 helyen és h=H az r=R helyen, ahol R a kút távolhatása. Behelyettesítve a peremfeltételeket (4.23.) egyenletbe a K_3 és K_4 konstans értéke meghatározható:

$$h_0 = K_3 \cdot \ln r_0 + K_4 \quad \textit{és} \quad H = K_3 \cdot \ln R + K_4\,, \tag{4.24.}$$

amiből

$$K_3 = \frac{H - h_0}{\ln \frac{R}{r_0}} \quad \textit{és} \quad K_4 = H - \frac{H - h_0}{\ln \frac{R}{r_0}} \ln r_0\,, \tag{4.25.}$$

azaz a (4.23.) egyenlet az alábbi formában írható fel:

$$h = \frac{H - h_0}{\ln \frac{R}{r_0}} \ln r + H - \frac{H - h_0}{\ln \frac{R}{r_0}} \ln r_0\,. \tag{4.26.}$$

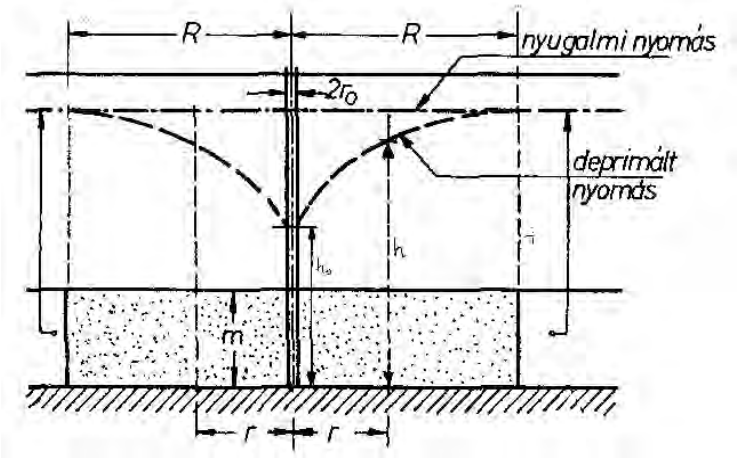
A lamináris (Darcy-féle) szivárgási sebesség pedig (4.26.) első deriváltja, az I hidraulikus gradiens és a szivárgási tényező szorzata, azaz

$$v = kI = k\frac{dh}{dr} = k\frac{H - h_0}{\ln \frac{R}{r_0}} \frac{1}{r}\,. \tag{4.27.}$$

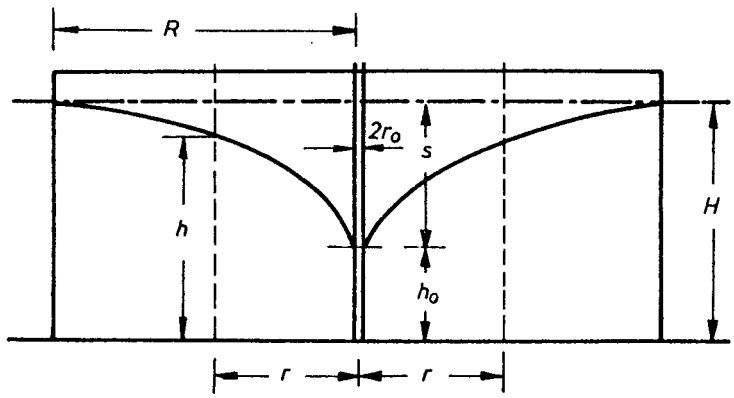
A *nyomás alatti vízadót megcsapoló kútba* (10. ábra) a hengerszimmetrikus áramlási térben a belépő hozamot a bármely r sugarú hengeren v sebességgel áthaladó víz mennyisége adja, ami zárttükrű rendszerben:

$$Q = Av = 2r\pi m \cdot v = 2k\pi m \frac{H - h_0}{\ln \frac{R}{r_0}} \tag{4.28.}$$

Nyílt-tükrű, oldalról táplált kút (11. ábra) esetén az áramlási keresztmetszet (ami zárttükrű esetben a hengerpalást felülete) az r sugárral változik a h nyomásszint függvényében változik, ezért a kút hozama:



10. ábra
Zárt tükrű vízadóra telepített kút számítási ábrája
(JUHÁSZ, 1981)



11. ábra
Nyílt tükrű vízadóra telepített kút számítási ábrája
(JUHÁSZ, 1981)

$$Q = 2r\pi hv = 2r\pi h \cdot kI = 2r\pi kh\frac{dh}{dr} \qquad (4.29.)$$

A változókat szétválasztva:

$$\int_{r_0}^{R}\frac{1}{r}dr = \frac{2\pi k}{Q}\int_{h_0}^{H} hdh \qquad (4.30.)$$

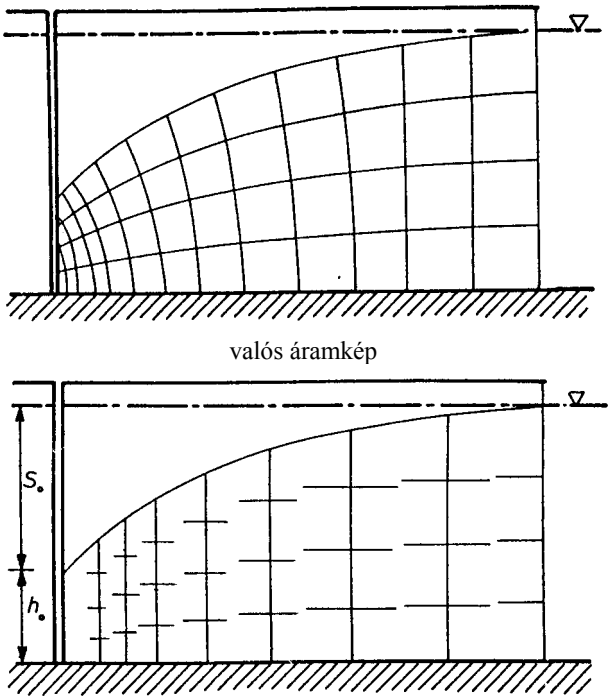
majd integrálva:

$$Q = k\pi \frac{H^2 - h_0^2}{\ln \frac{R}{r_0}} \qquad (4.31.)$$

Amennyiben az integrálást r és r_0, valamint h és h_0 határok között végezzük el, akkor megkapjuk a depressziógörbe egyenletét:

$$h = \sqrt{\frac{Q}{k\pi} \ln \frac{r}{r_0} + h_0^2} \qquad (4.32.)$$

A megoldás ebben az esetben is az áramtér Dupuit-Thiem-féle közelítésén alakul, vagyis hogy az ekvipotenciális vonalak függőlegesek, és az arra merőleges áramvonalak vízszintesek. Ezen feltételezés mellett az áramvonalak egy-egy görbévé nem köthetők össze, hanem szakadásuk van (12. ábra).



12. ábra
Egy kút körül kialakuló valós és a számításokhoz használt közelítőleges áramkép
(JUHÁSZ, 1981)

Egy kút körül nem permanens esetben az időben változó depresszióstér számításához a (4.3.) egyenletből indulhatunk ki, melyet a hengerszimmetria miatt polár-koordinátákkal felírva alkalmazunk:

$$\frac{S}{T}\frac{\partial h}{\partial t}=\frac{\partial^2 h}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial h}{\partial r}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial h}{\partial r}\right) \tag{4.33.}$$

ahol $r=\sqrt{x^2+y^2}$, $h=h(t,r)$.

vagy másképpen, felhasználva, hogy a s depresszió $s=H-h$

$$\frac{S}{T}\frac{\partial h}{\partial t}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial s}{\partial r}\right) \tag{4.34.}$$

Ha a kút üzemelése t=0 időpontban kezdődött és Q=konstans hozammal folyik. Ebben az esetben a kezdeti és peremfeltételek: $s(t,r=\infty)=0$, $s(t=0,r)=0$ és $Q=2\pi Tr\frac{\partial s}{\partial r}$, amennyiben t > 0.

Megoldás az s depresszióra nézve $s(r,t)=\frac{Q}{T}f(u)$ helyettesítéssel lehetséges, ahol $u=\frac{Sr^2}{4Tt}$, ekkor:

$$f(u)=-K_5\int_u^\infty e^{-u}\frac{du}{u}+K_6\,, \tag{4.35.}$$

a kezdeti és peremfeltételek behelyettesítésével:

$$s(t,r)=\frac{Q}{4T\pi}F(u) \tag{4.36.}$$

ahol $F(u)=\int_u^\infty e^{-u}\frac{du}{u}$, és $u=\frac{Sr^2}{4Tt}$ (Theis-féle megoldás).

F(u) függvény sorba fejthető:

$$F(u)=-0{,}5772-\ln(u)+u-\frac{u^2}{2\cdot 2!}+\frac{u^3}{3\cdot 3!}-\ldots+\ldots- \tag{4.37.}$$

Ha u kicsi (azaz a szivattyúzás kezdete óta eltelt t idő nagy, vagy a termelt kúthoz közel számítjuk a depressziót, azaz a r sugár kicsi): elegendő a sor első két tagjának figyelembe-vétele (Jacob-féle megoldás). Jacob szerint az elhanyagolás feltétele, hogy u<0,01 vagy F(u)>4,0. Az F(u) függvényt Eiry függvénynek is nevezik és egyes szerzők Ei(u)-val jelölik.

A Theis-Jacob-féle megoldás során a T transzmisszivitást állandónak tekintjük, ami implicit módon magában hordja a feltételezést, hogy vagy zárt tükrű, állandó vastagságú és homogén szivárgási tényezőjű a vízadó, vagy amennyiben nyílt tükrű a réteg, akkor olyan nagy vastagságú, hogy az okozott s depresszió elhanyagolható hozzá képest és emiatt válik a transzmisszivitás állandóvá.

Amennyiben a zárttükrű vízadó felett egy b' vastagságú, k' szivárgási tényezőjű szemipermeabilis réteg és afelett egy felső vízadó réteg található, akkor az alsó vízadóban létesített depresszió hatására a féligáteresztő rétegen keresztül a kutat tápláló szivárgás indul meg.

Ebben az esetben az alsó vízadó rétegre a szivárgás alapegyenlete:

$$\frac{S}{T}\frac{\partial h}{\partial t}=\frac{\partial^2 h}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial h}{\partial r}-\frac{hk'}{Tb'}. \qquad (4.38.)$$

Az egyenlet analitikus megoldását Hantush, majd egy könnyebben alkalmazható formában Walton adta meg:

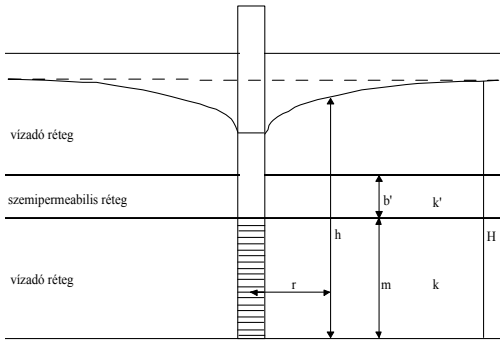
$$s(t,r)=\frac{Q}{4T\pi}\int_u^\infty \frac{1}{y}\exp\left(-y-\frac{r^2}{B^2 y}\right)dy, \qquad (4.39.)$$

vagy egyszerűbben

$$s(t,r)=\frac{Q}{4T\pi}W\left(u,\frac{r}{B}\right), \qquad (4.40.)$$

ahol

$$u=\frac{Sr^2}{4Tt},\quad \frac{r}{B}=r\sqrt{\frac{k'}{kmb'}},\quad B=\sqrt{kmc},\quad c=\frac{b'}{k'}. \qquad (4.41.)$$



13. ábra
Magyarázó ábra a Hantush-féle megoldáshoz

A megoldás k'=0 esetén, azaz ha a „szemipermeabilis" réteg „vízzáró", a Theis féle megoldást adja eredményül.

Nyílttükrű rendszer esetére a Theis- és az azokból levezetett módszerek nem korrektek, minthogy a számítások során feltétel a transzmisszivitás állandósága. Erre az esetre ismeretes Neuman megoldása, aki a depresszió idő függvényt az alábbi formában vezette le:

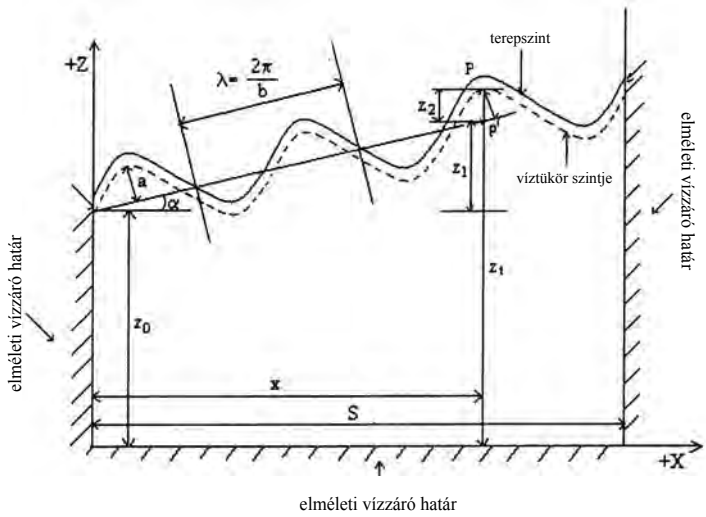
$$s(t,r) = \frac{Q}{4T\pi} W(u_A, u_B, \beta), \tag{4.42.}$$

ahol

$$u_A = \frac{r^2 S}{4tT}, \quad u_B = \frac{r^2 S_y}{4tT}, \quad \beta = \frac{r^2 k_v}{H^2 k_h}, \tag{4.43.}$$

ahol H a telített vízoszlop magasság, S_y a fajlagos hozam, S a tárolási tényező, T a transzmisszivitás.

Ugyancsak a Laplace egyenletből indult ki Tóth (1963), amikor egy függőleges szelvény mellett határozta meg a potenciál-eloszlást, aminek segítségével medencében kialakuló vízáramlási rendszerek vizsgálatát végezte el (14. ábra).



14. ábra
A Tóth-féle medence-modell (Tóth, 1963)

A vertikális metszetben a potenciál:

$$\Psi = gz + \int_{p_0}^{p} \frac{dp}{\rho}, \tag{4.44.}$$

ahol z a medence vízzáró feküje felett mért magasság, g a nehézségi gyorsulás, p_0 a légköri nyomás, p a nyomás a rendszer bármely pontjában és ρ a víz sűrűsége. Amennyiben a víztükör szintje egy olyan speciális piezometrikus szintet jelent, ahol definíciószerűen a gravitációs potenciál maximális és ahol a nyomás megegyezik a légköri nyomással, akkor az egyenlet egyszerűsödik:

$$\Psi = gz_t\,, \qquad (4.45.)$$

ahol z_t víztükör topográfiai magassága a rendszer bármely pontján. Mivel a terepi mérések mutatják, hogy a talajvíztükör helyzete lokálisan követi a domborzatot, ezért a z_t magasságot tekintsük három tag: z_0, z_1 és z_2 összegeként.

z_0 legyen állandó és jelentse a medence mélypontjának a magasságát a vízzáró fekü felett, z_1 legyen a medence-felszín átlagos emelkedésének mértékével azonos és z_2 a medencefelszín magasság-eltérésének mértéke az egyenletesen emelkedő felszíntől. z_2 tényezőt tételezzük fel szinuszosan változónak, ennek alapján legyen:

$$z_1 = x \cdot tg\alpha, \quad z_2 = a\frac{\sin\frac{bx}{\cos\alpha}}{\cos\alpha}, \qquad (4.46.)$$

ahol x a medence mélypontjától mért távolság, a a sinushullám amplitúdója, b=2π/λ a frekvenciája és λ a periódusa. A víztükör magasságát a három tag összegeként kapjuk:

$$z_t = z_0 + x \cdot tg\alpha + a\frac{\sin\frac{bx}{\cos\alpha}}{\cos\alpha} \qquad (4.47.)$$

Bevezetve a következő jelöléseket: c'=tgα, a'=a/cosα, b'=b/cosα z_t a következő egyszerűbb formába írható fel:

$$z_t = z_0 + c' \cdot x + a' \sin b' x\,. \qquad (4.48.)$$

Ezek alapján a potenciál:

$$\Psi = g\left(z_0 + c' \cdot x + a' \sin b' x\right) \qquad (4.49.)$$

Mivel a medencében a vízmennyiség állandó, ezért permanens állapot van, azaz a vízmozgást az aktualizált Laplace egyenlet (4.1.) írja le:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = 0\,. \qquad (4.50.)$$

A megoldás peremfeltételei:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \Psi}{\partial x} = 0, \quad ha \quad x = 0 \quad és \quad x = s \quad a \quad 0 \le z \le z_0 \quad tartományban \\
&\frac{\partial \Psi}{\partial z} = 0, \quad ha \quad z = 0 \quad a \quad 0 \le x \le s \quad tartományban \qquad (4.51.) \\
&\Psi_t = g\left(z_0 + c' \cdot x + a' \sin b' x\right), \quad ha \quad z = z_0 \quad a \quad 0 \le x \le s \quad tartományban
\end{aligned}$$

A megoldás általános alakja:

$$\Psi = e^{-kz}\left(A \cdot \cos(kx) + B \cdot \sin(kx)\right) + e^{kz}\left(M \cdot \cos(kx) + N \cdot \sin(kx)\right), \qquad (4.52.)$$

ahol Az A, B, M és N konstansok a peremfeltételekből számíthatók.

A potenciálra ezután a következő végeredményt kapjuk:

$$\Psi = g\left\{ z_0 + \frac{c's}{2} + \frac{a'}{sb'}\left(1 + \cos(b's)\right) + \right.$$

$$+ 2 \cdot \sum_{m=1}^{\infty} \left[\frac{a'b'\left(1 - \cos(b's) \cdot \cos(m\pi)\right)}{b'^2 - \frac{m^2\pi^2}{s^2}} + \frac{c's^2}{m^2\pi^2}\left(\cos(m\pi) - 1\right) \right] \cdot \qquad (4.53.)$$

$$\cdot \frac{\cos\left(\frac{m\pi x}{s}\right)\cosh\left(\frac{m\pi z}{s}\right)}{s \cdot \cosh\left(\frac{m\pi z_0}{s}\right)}$$

A kapott képlettel a potenciál számítható az x,z síkon és a Darcy- törvény felhasználásával bármely irányban mozgó folyadékhozamok számítását is el lehet végezni:

$$j = -\rho\sigma \cdot grad\Psi\,, \qquad (4.54.)$$

ahol σ=kρ/η és η a folyadék kinematikai viszkozitása.

4.2.2. Numerikus megoldások

A numerikus megoldások a szivárgás alapegyenletének közelítő megoldásai. A közelítő megoldást matematikai értelemben kell érteni, azaz hogy a megoldás nem egzakt. Ha a megoldás közelítő, akkor hibákkal terhelt, amelyeket *numerikus hibáknak* hívunk.

A numerikus megoldások úgy közelítik a valós folyamatokat, hogy mind időben, mind térben szakaszolják a lezajló folyamatokat. Az egyes szakaszokon belül a számításhoz szükséges paramétereket állandónak tekintik, és ezzel válik lehetővé a megoldás.

A *térbeli szakaszolás* alatt a numerikus módszerek alkalmazásánál az elemekre bontást értjük. A vizsgált térrészt olyan elemekre bontjuk melyeken belül az egyes közegjellemzők (pl. szivárgási tényező, transzmisszivitás, szabad hézagtérfogat, tárolási tényező, stb.) állandónak tekinthető.

Az *időbeli szakaszolást* időlépcsőkre bontással oldjuk meg. Az időben történő változásokat olyan egységekre bontjuk, melyek alatt az időben változó tényezők (pl. a kutak hozama) állandónak, ritkább esetben lineárisan változónak tekinthetők.

Mind az elemek, mind az időlépcsők száma elvileg korlátlan, így a szakaszolás mind térben, mind időben tetszőleges. Minél több elemre vagy időlépcsőre bontjuk a vizsgált folyamatot, annál pontosabban tudjuk a tér-, illetve időbeli változásokat követni. Tudni kell azonban, hogy a tér és időbeli szakaszolás növelésével egyes numerikus hibák is nőnek és a probléma számításigénye is exponenciálisan növekszik. Éppen

ezért *a feladat tér- és időbeli szakaszolásának van egy optimuma*, ahol a numerikus módszerrel közelített probléma már megfelelő mértékben követi a valós folyamatokat az időben és a térben, ugyanakkor a számítási igénye és különösképpen a numerikus hibák nagysága még elhanyagolható.

A víz porózus közegbeli szivárgásának jellemzőit a következő numerikus módszerekkel lehet vizsgálni:

- véges differencia módszer
- véges elem módszer
- peremelem módszer
- analitikus elemek módszere

A felsoroltak közül most röviden a leginkább elterjedt véges differencia és végeselem módszereket mutatjuk be.

4.2.2.1. Véges differencia-módszer

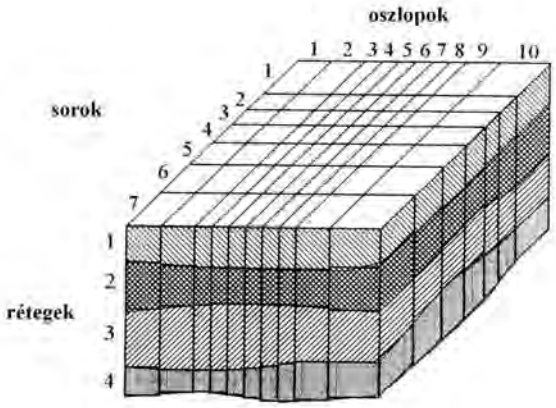
A véges differencia módszer alapgondolata a szivárgás alapegyenletének, mely egy parciális differenciál-egyenlet, differencia egyenletté történő alakítása. A számítási eljárás alkalmazásának jellegzetes lépései:

- A modellezett teret tetszőleges számú síkban tetszőleges darabszámú, de azonos eloszlású, egymással hézagmentesen érintkező, téglatest alakú elemekre bontjuk, egyenletes vagy változó osztású rácsháló segítségével (15. ábra).
- A szivárgás alapegyenletét (a differenciál-egyenletet) differencia-egyenletté alakítjuk.
- Meghatározzuk az egyes hasábelemek és az azokkal közvetlenül érintkező elemek közötti vízhozamokat a Darcy-törvény és a kontinuitási tétel felhasználásával,
- Meghatározzuk az egyes kutak, galériák, és egyéb létesítmények (pl. szivárgók) által az egyes elemekbe táplált vagy onnan kivett hozamokat, valamint a rendszer vízmérlegét befolyásoló egyéb objektumok (pl. felszíni vizek és vízadók kommunikációjából eredő hozamok) vízmérlegre gyakorolt hatását.
- Összegezzük minden egyes elemre a vízmérleg-elemeit. A hiányzó elemek pótlására a modell szélein peremfeltételeket alkalmazunk. Felírva az összes elemre a vízmérleg elemeket, felállítjuk a modellezett tér vízforgalmát az adott időlépcsőben leíró lineáris egyenletrendszert, majd numerikus iteratív eljárásokkal megoldjuk.
- Az egyes elemekre felírt vízmérleg aktívum vagy passzívum, azaz az elemben tárolt vízkészlet növekedés vagy csökkenés alapján meghatározzuk az elemben bekövetkező vízszint (nyílt tükrű rendszer) vagy nyomásszint (zárt tükrű rendszer) változásokat.
- Nem permanens rendszerben a következő időlépcsőre ismét felírjuk a Darcy-törvényen alapuló, elemek közötti vízhozamokat és a számítás fázisait – a szükség szerinti időlépcsőkre – megismételjük.

A módszerrel abszolút nyomásszinteket nem tudunk számítani, csak a nyomásszintek változásait, éppen ezért szükséges a számításhoz egy kiindulási állapot, egy alaphelyzet, amit számítás *kezdeti feltétel*ének nevezünk. A szivárgás alapegyenletének

megoldásához szükséges kezdeti feltétel egy tetszőleges, de ismert kezdeti időpontban a nyugalmi nyomásszint-eloszlás.

A leírtak alapján kirajzolódnak a *módszer előnyei és hátrányai*:



15. ábra
Négy rétegből álló rendszer véges differencia elemekre bontása
(CHIANG és KINZELBACH, 1999)

A módszer használatának legnagyobb előnye, hogy a megoldás során a differenciál-operátort differenciaoperátorral helyettesítjük és így a megoldás során *megmarad az eredeti differenciálegyenlet-összefüggés*. Ennek következtében *a számítás részeredményei valós fizikai tartalommal bírnak*, ami a számítás folyamatának követését elősegíti. Az egyes hasábelemekre felírt vízmérleg-elemek időbeli változása jól követhető, ezért a módszer nagyon *szemléletes*. Előny továbbá a többé-kevésbé szabályos elemkiosztás miatt a modell alapadat-rendszere részben függvényeket és geostatisztikai módszerek használatával generálható, ami - tekintettel az alapadat-rendszer méretére – számottevő gyakorlati könnyebbség.

Sajnos az ilyen téglalap alapú hasábokkal a modellezett térben az egymástól eltérő vízföldtani tulajdonságokkal rendelkező és ezért *a modellben egymástól elhatárolandó térbeli testek csak nehezen követhetőek*. További hátrány, hogy a rendelkezésre álló földtani és vízföldtani információk többnyire pontszerűek (fúrási helyek, magminták vizsgálati eredményei), a modellben azonban az egyes elemekre jellemző értékek szerepelnek. Minthogy *a háló nem követheti a fúrási hálózatot*, gyakran előfordulnak olyan elemek, amelyekre vonatkozóan csak közvetett információkkal rendelkezünk, esetleg teljesen információhiányos térrészek is lehetnek.

A kapott eredmények az egyes elemekre jellemző átlagértékek lesznek, ezért csak megfelelően nagy sűrűségű háló esetén lehetnek az eredmények megfelelően reprezentatívak.

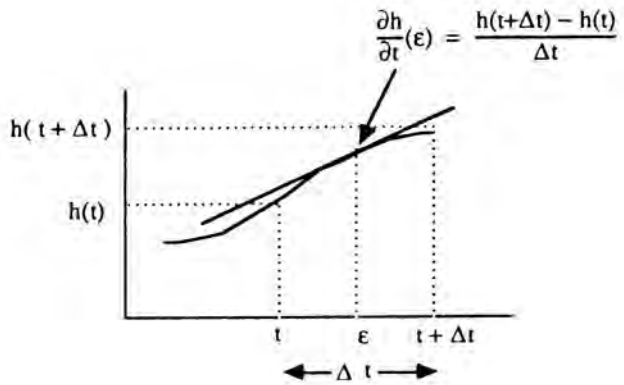
A háló lokálisan nem, vagy csak speciális technika alkalmazásával sűríthető, ami a modellalkotás és feldolgozás során számos kellemetlen következményhez vezethet.

4.2.2.1.1. A differenciálegyenlet differenciaegyenletekké történő alakításának módjai

Mint azt a véges differencia módszer rövid bevezetőjében már említettük, *a módszer alapgondolata a differenciáloperátor differenciaoperátorral való helyettesítése*, azaz a differenciálegyenletek differenciaegyenletekké történő alakítása. A *térbeli differenciálhányadosok differenciahányadosokká alakítása* formálisan a differenciáloperátor differenciaoperátorra cserélésével történik, azaz

$$\frac{\partial h}{\partial x} \Rightarrow \frac{\Delta h}{\Delta x}. \qquad (4.55.)$$

Az *időbeli differenciaképzés*nek ugyanakkor van egy sajátossága, amely a modellszámítások numerikus hibáinak előfordulását alapvetően meghatározza. Tételezzük fel, hogy a h nyomásszintek az időben a 16. ábra szerint alakulnak. Az átlagérték teoréma alapján tudjuk, hogy a h=h(t) függvény időszerinti deriváltját kiszámíthatjuk egy a [t, t+Δt] időintervallumon belül található ε időpillanatban, az időintervallum két végpontjában észlelt h(t) és h(t+Δt) értékek alapján. Sajnos az ε időpillanat helyét a [t, t+Δt] időintervallumon belül nem ismerjük, ezért különböző feltételezésekkel élhetünk, melyek alapján az időbeli differenciaképzés különböző módszerei alakultak ki.



16. ábra
Az időbeli differenciaképzés magyarázó ábrája
(ISTOK, 1989)

A 16. ábra alapján a h(ε) nyomásszintet a h(t) alaphelyzetből az alábbi összefüggéssel kapjuk:

$$h(\varepsilon) = h(t) + (\varepsilon - t)\frac{\partial h}{\partial t}(\varepsilon). \qquad (4.56.)$$

Definiáljunk egy $\omega = \frac{\varepsilon - t}{\Delta t}$ változót. Az ω változó segítségével (4.56.) differenciálegyenlet az alábbi differencia-egyenletté alakítható:

$$h(\varepsilon) = (1-\omega)\cdot h(t) + \omega \cdot h(t+\Delta t). \qquad (4.57.)$$

A (4.57.) egyenletben amennyiben ω=0, azaz az ε időpontot a [t, t+Δt] időintervallum kezdetén tételezzük fel, akkor *előrelépéses differenciá*ról (Forward Difference Method), beszélünk. Amennyiben ω=1, azaz az ε időpontot a [t, t+Δt] időintervallum végén tételezzük fel, akkor *hátralépéses differenciákat alkalmazunk* (Backward Difference Method). Amennyiben az ε időpontot a [t, t+Δt] időintervallum közepén tételezzük fel, akkor ω=0,5, ezt *központi vagy középponti differenciák* (Central Difference Method) alkalmazásának nevezzük. Szokás a középponti differenciák alkalmazását Crank-Nicholson módszernek is hívni.

A differenciaképzés módja befolyásolja a numerikus hibák előfordulását, ezért szükséges ismeretük. A három felsorolt approximációs eljárás közül a középponti differenciák alkalmazása a leggyakoribb, mivel ebben az esetben a legkisebb a közelítés átlagos hibája az első-differenciálhányados képzése esetén, ezért az ilyen megoldások általában gyorsabbak. A középponti differenciákkal történő megoldás hátránya az oszcillatív hibákra való hajlamosság. Az előre- és hátralépéses differenciákkal való számolás esetén viszont nagyobbak a hibák, ami miatt gyakoribb a számítási sor divergenciája, ugyanakkor nem jelentkezik numerikus oszcilláció a megoldás során. A numerikus hibákat a későbbiek során részletesen bemutatjuk.

A differenciaképzés módja csak a számítási metodikát befolyásolja, nincs köze ahhoz, hogy a számítás során egy ismert állapotból korábbi vagy későbbi állapotra, azaz időben előre vagy hátra történik a számítás.

4.2.2.1.2. A szivárgás alapegyenletének felírása véges differenciák segítségével (az egyes cellák vízmérlege)

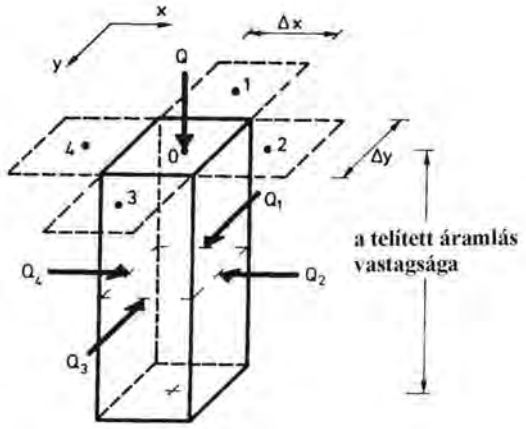
Tekintsünk egy véges differencia elemet, legyen az elem sorszáma 0 és a környező elemeket számozzuk 1-től 4-ig. (17. ábra) Tételezzük fel, hogy a szomszédos elemek felől a vizsgált elem felé Q_i hozamok szivárognak, a vizsgált elemből a források vagy nyelők által kitermelt vagy betáplált vízmennyiség Q_0. A vízmérleg megváltozása Δt idő alatt $\Delta t \cdot \sum_{i=0}^{4} Q_i$. Ez a vízmérleg változás indukálja a h_0 nyomásszint megváltozását a 0 jelű elemben, azaz

$$\Delta t(Q_0 + Q_{10} + Q_{20} + Q_{30} + Q_{40}) = \left(h_0(t+\Delta t) - h_0(t)\right)\cdot S \cdot \Delta x \Delta y, \qquad (4.58.)$$

ahol t a kezdeti időpont és S a tárolási tényező vagy a Darcy- törvényt felhasználva:

$$\Delta x \cdot T_{10}\frac{h_1(t_i)-h_0(t_i)}{\Delta y} + \Delta y \cdot T_{20}\frac{h_2(t_i)-h_0(t_i)}{\Delta x} + \Delta x \cdot T_{30}\frac{h_3(t_i)-h_0(t_i)}{\Delta y} + \\ + \Delta y \cdot T_{40}\frac{h_4(t_i)-h_0(t_i)}{\Delta x} = \frac{\left(h_0(t+\Delta t)-h_0(t)\right)\cdot S \cdot \Delta x \Delta y}{\Delta t}, \qquad (4.59.)$$

ahol T_{i0} a kiszemelt és a szomszédos elem transzmisszivitásai alapján számított mértékadó transzmisszivitás értéke.



17. ábra
A véges differencia módszer vizsgált eleme
(KINZELBACH, 1986)

A (4.59.) egyenleten belül a T_{i0} átlagérték meghatározására különböző módszerek terjedtek el. Lehet *a sorba kötött ellenállások elvé*nek figyelembevételével meghatározott átlagos transzmisszivitásokat

$$T_{10} = \frac{\dfrac{\Delta y_0 + \Delta y_1}{2}}{\dfrac{\dfrac{\Delta y_0}{2}}{T_0} + \dfrac{\dfrac{\Delta y_1}{2}}{T_1}}; \quad T_{20} = \frac{\dfrac{\Delta x_0 + \Delta x_2}{2}}{\dfrac{\dfrac{\Delta x_0}{2}}{T_0} + \dfrac{\dfrac{\Delta x_2}{2}}{T_2}}; \text{ } T_{30} \text{ és } T_{40} \text{ hasonlóképpen,} \qquad (4.60.)$$

de szokták az egyszerű számtani átlagot

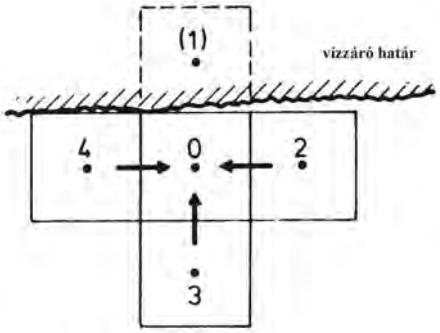
$$T_{i0} = \frac{T_i + T_0}{2}, \qquad (4.61.)$$

vagy a mértani átlagképzést használni:

$$T_{i0} = \frac{2 \cdot T_i \cdot T_0}{T_i + T_0}. \qquad (4.62.)$$

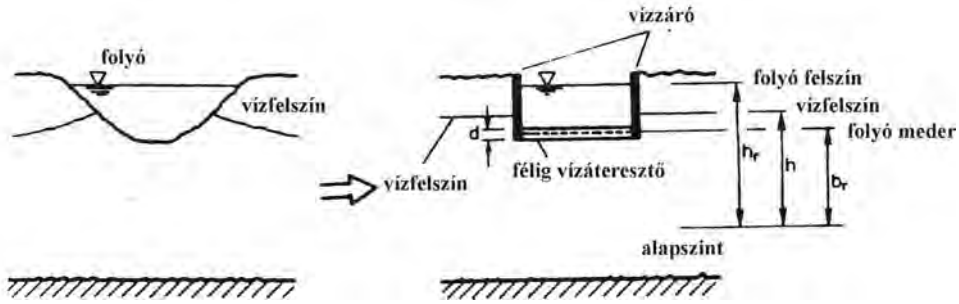
Az egyes átlagképzésekkel végzett számítások között megfelelő hálóképzés esetén általában nincsen nagy különbség, ugyanis a jól megtervezett rácsháló esetén a szomszédos elemek méretei csak kis mértékben különböznek egymástól, nincsenek túlságosan nagy méretbeli ugrások. A lényegi különbség a (4.62.) egyenlet szerinti mértani átlagképzés és a két másik bemutatott módszer között van, mert az a vízzáró peremre eső cellaoldalon zérus hozamokat számít (18. ábra), mert a szorzat egyik tagja: T_1=0. A bemutatott egyéb átlagképzési megoldások esetén a számított T_{10} egy pozitív szám ($T_1<T_{10}<T_0$). Éppen ezért azon programok, amelyek nem a mértani átlagszámításon alapuló transzmisszivitási átlagképzést használnak egy további para-

métert használnak a vízszivárgás engedélyezésére. Ennek alapján aktív és inaktív cellákat kell definiálni, melyek közül az inaktív cellákba/ból definíciószerűen víz se nem lép be, se nem lép ki.



18. ábra
A vízzáró határ esete
(KINZELBACH, 1986)

A felszíni vizekből átadott járulékos készletek számítását a véges differencia módszernél egy egyszerűsítő feltételezéssel végezzük el. Tételezzük fel, hogy a felszíni víz a talajvízadóval hidrodinamikai kapcsolatban, kommunikációban áll. A felszíni víz szintje h_r, a meder fenékszintje b_r. A valós és a modellezett helyzetet a 19. ábra mutatja be.



19. ábra
Felszíni vizekből átadott vízhozamok számítása
(KINZELBACH, 1986)

A folyót tehát olyan cellákkal szimuláljuk, melyeknek az oldala a folyó fenékszintjének mélységéig vízzáró, azaz a kommunikáció a mederfenék-üledékeken keresztül csak függőleges történik. Tételezzük fel, hogy a folyómedernél d vastagságú k_k szivárgási tényezőjű kolmatált zóna alakult ki. A felszíni és felszín alatti vizek között kialakuló kommunikációból származó Q_f hozam arányos az ábra szerinti h_r-h nyomásszintkülönbséggel a folyó és a vízadó között, a k_k kolmatált zóna szivárgási tényezővel, a cella méretével és fordítottan arányos a kolmatált zóna d vastagságával, azaz:

$$Q_f = \frac{k_k}{d}(h_r - h)\cdot \Delta x \Delta y\,. \qquad (4.63.)$$

A képletben szereplő $\frac{k_k}{d}$ [T^{-1}] hányadost átszivárgási tényezőnek nevezik. Az átszivárgási tényező a kommunikáció mértékének jelzőszáma. Amennyiben a felszíni víz csak az elem egy kisebb részét fedi le akkor a Q_f hozam arányosan csökkentendő.

$$Q_f = \frac{k_k}{d}(h_r - h)\cdot \Delta x \Delta y \frac{F_{folyó}}{\Delta x \Delta y} = \frac{k_k}{d}(h_r - h)\cdot F_{folyó}\,. \qquad (4.64.)$$

ahol $F_{folyó}$, a folyó medre által a cellából lefedett terület nagysága. A Q_f hozam függően a folyó h_r vízszintje és a vízadó h nyomásszintjének egymáshoz viszonyított nagyságától pozitív vagy negatív, azaz a folyó táplálja vagy megcsapolja a vízadót.

A folyó szimulációs elvén nyugszik a *drének vagy más néven szivárgók szimulációja*. A drének abban különböznek a folyóktól, hogy csak a vízadó megcsapolására képesek. A megcsapolt hozam függ a vízadó nyomásszintjének és a drén fenékszintjének különbségétől, valamint attól, hogy mekkora a drén környezetében a szivárgási tényező, azaz, hogy milyen könnyen tud a víz a szivárgóba jutni. A drén által megcsapolt Q_d vízhozamot az alábbi képlettel számíthatjuk:

$$Q_d = -C_d(h - h_d) \quad ha \quad h \geq h_d \qquad (4.65.)$$

ahol h a vízadó nyomásszintje, h_d a szivárgó fenékszintje vagy a vízszint a drénben és C_d az a szivárgó vezetőképessége. A C_d szivárgó vezetőképesség a k_d ekvivalens szivárgási tényező, amely figyelembe veszi az összes nyomásveszteséget a vízadó és drén között és a drén elemen belüli L hosszának szorzata:

$$C_d = k_d \cdot L\,. \qquad (4.66.)$$

Tekintettel arra, hogy a k_d ekvivalens szivárgási tényező általában ismeretlen, ezért azt szivárgó ismert hozama alapján szokás inverz úton meghatározni. A (4.65.) egyenletben a negatív előjel azt jelzi, hogy a kivett hozam a vízadó szempontjából negatív. Amennyiben a vízadóban a nyomásszint a drén fenékszintje alatt van, akkor a szivárgó szárazra kerül, nem működik, ekkor Q_d=0.

Az egyes elemekhez hozzárendelendők *a termelő és injektáló kutak* $Q_{kút}$ *hozamai*. Amennyiben egy elembe több kút esne, akkor ezeket összegezve kell a vízmérlegbe helyettesíteni. Mivel a vizsgálat a vízadóra vonatkozik a negatív kúthozamok a termelő kutakat, a pozitívak az injektáló kutakat jelentik.

A *maradó beszivárgás*ból származó hozamokat a cellák alapterületével szorozva tudjuk a számításokban figyelembe venni:

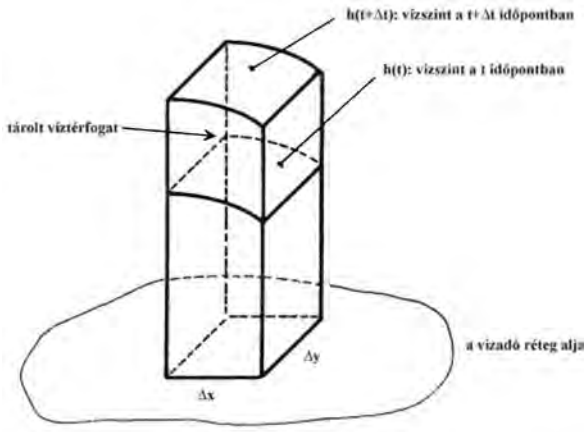
$$Q_B = B\Delta x \Delta y\,, \qquad (4.67.)$$

ahol B az adott mélységben elhelyezkedő talajvízszintig időegység alatt leszivárgó csapadékvíz mennyisége egységnyi felületen [L/T].

A teljes vízmérleget az egyes cellákra a következőképpen írhatjuk fel:

$$\Delta x \cdot T_{10} \frac{h_1(t_i) - h_0(t_i)}{\Delta y} + \Delta y \cdot T_{20} \frac{h_2(t_i) - h_0(t_i)}{\Delta x} + \Delta x \cdot T_{30} \frac{h_3(t_i) - h_0(t_i)}{\Delta y} +$$
$$+ \Delta y \cdot T_{40} \frac{h_4(t_i) - h_0(t_i)}{\Delta x} + Q_f + Q_d + Q_B + Q_{kút} = \frac{\left(h_0(t + \Delta t) - h_0(t)\right) \cdot S \cdot \Delta x \Delta y}{\Delta t} \qquad (4.68.)$$

A (4.68.) egyenlet bal oldalán található hozamok előjeles összege adja a vizsgált elemben tárolandó vízmennyiség megváltozását, ami zárt tükrű vízadó esetén a nyomásszintek változásával, nyílt tükrű vízadó esetén a vízszint emelkedésével következik be (20. ábra) Az egyenlet jobb oldala ezt a nyomás- illetve vízszintnövekedést írja le. Amennyiben a számítást permanens esetre végezzük el, akkor a (4.68.) egyenlet jobb oldala zérus.



20. ábra
A tárolási mechanizmus nyílt tükrű rendszer esetén
(KINZELBACH, 1986)

4.2.2.1.3. A teljes modellezett tér vízmérlege

Eddig az egyes elemekre határoztuk meg a vízmérleget. Ahhoz, hogy a teljes vízadóban lejátszódó folyamatok számítani tudjuk a rendszer valamennyi elemére fel kell írni a vízmérleget. Ezáltal az ismeretlenek száma nem növekszik, mert az egyes elemek között átadott hozamok azonos nagyságúak, tehát a 17. ábra szerinti Q_{10}=-Q_{01}. Ennek következtében ahány elem van a rendszerben, annyi vízmérleget lehet felírni. Ahhoz, hogy az egyenletrendszer megoldható legyen maximálisan annyi lehet az ismeretlenek száma, mint a felírható egyenleteké. Ha jobban szemügyre vesszük a (4.68.) egyenletet, akkor minden vízmérlegben csupán a h(t) nyomásszint ismeretlen, azaz az egyenletrendszer megoldható. A megoldáshoz azonban szükségesek a kezdeti és peremfeltételek.

4.2.2.1.4. Kezdeti és peremfeltételek

A *számítás kezdeti feltételei*re, azaz egy kiindulási állapotra azért van szükség, mert a vázolt számítási rendszer csak tárolt vízmennyiség, azaz víz és nyomásszint-változá-

sokat tud számítani. Ahhoz, hogy a nyomásszinteket abszolút értékben is megadhassuk van szükség a nyomásszinteknek egy kezdeti időpontban való eloszlásának ismeretére.

Peremfeltételekre a számításba bevont térrész szélein van szükség. Ahhoz, hogy a számítást el lehessen végezni, *minden egyes elemre fel kell írni a vízmérleget*. Tekintettel arra, hogy a rendszer szélén található elemeknél valamelyik (sarokelemnél valamelyik szomszédos kettő) 17. ábra szerinti Q_i *hozamot nem ismerjük, ezért a vízmérleg határozatlan*ná válik. Az említett határozatlanság megszüntetése érdekében peremfeltételeket használunk, melyeknek számos megvalósítási módja, típusa ismert.

A peremfeltételek három csoportba sorolhatók a Dirichlet, Neumann és a féligáteresztő (vegyes) típusba.

Dirichlet-típusú peremfeltétel a peremi helyzetű cellában nem a vízmérleget módosító hozamot vesz figyelembe, hanem a cella vízforgalmát a cella előírt *nyomásszint*jén keresztül szabályozza. A nyomásszint lehet időben állandó vagy előírt módon változó.

Az *időben állandó nyomásszint*et kétféleképpen lehet megvalósítani: egyrészt szokás a vízmérleget a hagyományos módon számítani, majd minden időlépcső elején $h(t+\Delta t)=h(t)$ helyettesítéssel a kezdeti nyomásszintek értékeit újrafelhasználni. Egyes programok az állandó nyomásszintű határt a tárolási tényezőn keresztül hozzák létre. A tárolási tényező az egységnyi nyomásszint-változás hatására felszabaduló vagy tárolódó vízmennyiséget jelenti. Amennyiben kicsi vízszintváltozások hatására tetszőlegesen nagy vízmennyiséget szabadítunk fel elérhetjük, hogy bármekkora vízmérleg-változást a tárolási tényezőn keresztül kompenzálni tudunk. A rendszer viselkedését úgy is magyarázhatjuk, hogy az elemben végtelen nagyságú vízmennyiséget tárolunk el, amiből egy tetszőleges mennyiséget eltárolva vagy eltávolítva az adott cellában a vízszint vagy a nyomásszint nem változhat meg.

Az *időben előírt módon változó nyomásszint*eket elsősorban a talajvízjárás vagy folyó vízszintváltozások szimulációjára szokás használni. Általában a feltételezés szerint az előírt nyomásszint az időlépcső kezdetén $h(t)$ a végén (azaz a következő időlépcső kezdetén) $h(t+\Delta t)$ és a két időpont között egyenletesen változik, azaz egy a $[t, t+\Delta t]$ időponton belüli $t+t_i$ időpillanatban az éppen aktuális nyomásszint

$$h(t+t_i) = h(t) + \frac{t_i}{\Delta t}\big(h(\mathbf{t}+\Delta t) - h(t)\big). \qquad (4.69.)$$

A Dirichlet típusú határ hátránya, hogy depresszió a peremen nem alakulhat, ki, ennek következtében a peremhez közeli vízkivételi helyek körül irreális áramlási sebességtér alakul ki. Előnye az ilyen típusú határoknak, hogy a modellt stabillá teszik, a megoldás során fellépő divergencia lehetőségét lecsökkentik.

A *Neumann-típusú peremfeltétel*en a vízmérleget egy adott, *állandó hozam*mal korrigáljuk. A Neumann típusú határ két alapesete a vízzáró és a nem vízzáró határ.

A *vízzáró határ* esetén a perem felől érkező Q_i hozamot zérusnak adjuk meg. Másik megvalósítási lehetőség a peremen túl egy fiktív cella felvétele, melynek szivárgási

tényezője és/vagy transzmisszivitása zérus. Ebben az esetben a mértani átlaggal számított eredő transzmisszivitással a vízzáró határ – a korábbiakban bemutatott módon – automatikusan megvalósul.

Amennyiben a *határ nem vízzáró*, akkor egy tetszőleges pozitív vagy negatív hozammal módosítható a peremi helyzetű cella vízmérlege. A megoldás hibája, hogy függetlenül az aktuális vízföldtani helyzettől a meghatározott vízmennyiséggel a vízmérleg módosul, és amennyiben ez tartósan több, mint amennyi szükséges volna, akkor a nyomás- vagy vízszintek folyamatosan emelkedni, ellenkező esetben csökkenni fognak. Ez azt is okozhatja, hogy a vizsgált elem kiszárad. Bármelyik irányban is tér el a megadott hozam a valóságostól a rendszer instabilitását okozza.

Féligáteresztő típusú a perem, ha a cellák vízmérlegének módosulása, azaz a peremi hozam időben nem állandó, hanem az aktuális hidrodinamikai helyzettől függő nagyságú. Az ilyen peremek egyesítik a Dirichlet és a Neumann típusú peremek előnyeit. Legismertebb képviselője az ún. *általános nyomásszintű határ*, amit angol nevének rövidítéséből *GHB* (General Head Boundary)-*perem*nek is hívnak. A GHB peremen van egy előírt vagy mértékadó h_m nyomásszint, melyet a határon a megközelítőleg tartani szándékozunk. A peremi cellában - a szomszédos elemekkel való vízforgalom következtében - azonban változna a vízmérleg és ennek következtében a nyomás- vagy vízszint Δh értékkel változna. A változás korrekciójára a GHB peremen a Δh értékkel arányos vízmennyiséget táplálunk be.

$$Q_{GHB} = C_{GHB}(h - h_m), \qquad (4.70.)$$

ahol Q_{GHB} a peremi hozam, C_{GHB} az arányossági tényező és h és h_m az aktuális és a mértékadó víz- vagy nyomásszint.

Mettől nagyobb a vízszintváltozás igény, annál nagyobb a peremen átjutó hozam, ami azt eredményezi, hogy az abszolút nyomásszintek egy adott szinten állandósulnak, azaz a peremen egy adott – a mértékadó vízszinthez képest számított - depresszió alakulhat ki. A perem stabilitása és a kialakuló depresszió nagysága a C_{GHB} arányossági tényező nagyságától függ. Amennyiben az arányossági tényező nagy, akkor a GHB cella állandó nyomásszintű peremként viselkedik és tartja a mértékadó vízszintet. Ha az arányossági tényező tart a zérushoz, egyre inkább egy Neumann típusú határ valósul meg, a vízzáró határ.

4.2.2.1.5. A vízmérleg egyenletrendszer megoldási módjai

Amennyiben a (4.68.) egyenlet szerinti t_i időpillanatot a $[t,t+\Delta t]$ időintervallum elején vesszük fel, akkor $t=t_i$ és ebben az esetben a vízmérleg- egyenlet *explicit mód*on is megoldható, azaz az ismeretlen $h_i(t)$ nyomásszintek, kifejezhetők az egyenletekből.

Ennek a megoldásnak a legnagyobb problémája az instabilitás. Kimutatható, hogy a megoldás instabil mindaddig, míg nem teljesül a minden egyes elemre a következő *stabilitási kritérium*:

$$\frac{T}{S}\left(\frac{\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{\Delta t}{\Delta y^2}\right) \le \frac{1}{2}. \qquad (4.71.)$$

A stabilitási kritérium azt fejezi ki, hogy az időlépcső alatt bekövetkező nyomásszint-változás sosem lehet nagyobb, mint az elemek között az időlépcső elején fennállt nyomásszint-különbség. Sajnos a kritérium következtében a gyakorlatban használt rácshálók esetén a Δt időlépcsőt nagyon le kell csökkenteni, ami egyrészt a számítási időigényének növekedésével, másrészt a kerekítési hibák növekedésével jár.

Az *implicit megoldás*ok közül a *közvetlen vagy direkt megoldás* a legstabilabb megoldási módszer. Ebben az esetben a (4.68.) egyenlet szerinti t_i időpillanatot a $[t,t+\Delta t]$ időintervallum végén vesszük fel, akkor $t_i= t+\Delta t$. A megoldási módszert az alkalmazott matematikával foglalkozó szakkönyvek részletesen ismertetik. A megoldási módszer lényege, hogy az elemeket sorszámokkal látjuk el, majd egy az összes elem darabszámával megegyező sor-és oszlopszámú mátrixegyenletet írunk fel. Ebben a mátrixban csak a főátlóban és soronként néhány cellában található zérustól eltérő érték. Amelyik érték nem zérus: az a vizsgált sorhoz tartozó elem és a környező elemek közötti vízforgalomból adódó hozamokból adódik. A főátlóban tárolt szám pedig az adott sorszámú elemben a vízmérleg változásból következik. A mátrix egyenletet valamilyen numerikus módszerrel, általában a Gauss-Jordan eliminációval oldjuk meg.

A direkt megoldó algoritmusok hátránya a nagy és elemeket alig tartalmazó mátrix-egyenlet-rendszer miatti memória-igény. Főként 3D megoldások esetén keletkeznek, akkora egyenletrendszerek, hogy azokkal a számítógép nem képes megbirkózni.

Az implicit megoldások egy következő lehetősége az *iteratív megoldás*. Ezek a megoldások számottevően kisebb memóriát igényelnek, sőt ún. relaxációs paraméterekkel tovább is gyorsíthatók. Sajnos az előnyökkel szemben a kisebb stabilitás áll.

Az iteratív megoldásoknál az alapgondolat az, hogy amennyiben a (4.68.) egyenletben a $t_i= t+\Delta t$ feltételezéssel élünk, akkor minden egyes elemben a $h(t+\Delta t)$ nyomásszint meghatározható lenne a szomszédos elemekben ismert $h(t+\Delta t)$ nyomásszintek ismeretében. Tekintettel arra, hogy azokat nem ismerjük, ezért ha azokat egy-egy felvett értékkel helyettesítjük be, akkor iteratív úton kaphatjuk meg a megoldást. Ilyen módon a rendszer valamennyi elemére számítjuk a megoldás első közelítését, majd ezeket felhasználva a következő közelítést és így tovább. Ezt a módszert hívják a *Jacobi-féle iteráció*nak. Erről a módszerről kimutatható, hogy az mindig konvergens a szivárgás alapegyenletéből származó lineáris egyenletrendszerek esetén.

A Jacobi-iteráció tovább fejleszthető ezáltal gyorsítható. Amennyiben az iteráció során a következő elemre végzett számítások során az előzőleg számított közelítéseket is felhasználjuk, akkor a konvergencia gyorsabb. Ezt a megoldást *Gauss-Seidel módszer*nek hívják. Az iteráció gyorsítására *relaxációs paraméter* használatát vezették be. Az iteráció során a Δh nyomásszint változás:

$$h^{új} = h^{régi} + \Delta h\,. \qquad (4.72.)$$

Amennyiben a konvergenciát gyorsítani kívánjuk akkor az iteráció során a következő közelítő értéket így is meghatározhatjuk, hogy:

$$h^{új} = h^{régi} + R \cdot \Delta h\,, \qquad (4.73.)$$

ahol 1<R<2 a relaxációs paraméter. Amennyiben R értékét túl nagyra választjuk, úgy az iteráció során divergenciát, kedvezőbb esetben oszcillációt okozhatunk. Ha a megoldás relaxációs paraméter nélkül is oszcillál, úgy szükség lehet R<1 relaxációs tényezők használatára az iteráció során.

Változó irányú implicit megoldás (IADI = Iterative Alternating Direction Implicit procedure) valójában a felsorolt korábbi módszerek együttes alkalmazása. Ebben az esetben is a a $t_i = t+\Delta t$ feltételezéssel élünk. A nyomásszintekre vonatkozóan egy mátrixegyenlet-rendszert írunk fel. Tudjuk, hogy a szomszédos elemekben ismerve a nyomásszinteket, a választott elemben is meghatározható volna a nyomásszint. Ezért felveszünk kezdeti értékeket és megkezdjük az iterációt (Jacobi-módszer). Ahogy soronként haladunk végzett számítások során az előzőleg számított közelítéseket is felhasználjuk (Gauss-Seidel módszer). Amikor a soronként elvégeztük a mátrix elemek első közelítésének meghatározását áttérünk az oszloponkénti számításokra. Itt is felhasználjuk a korábban kiszámított közelítő értékeket a Gauss-Seidel módszer szerint. Amikor az összes oszloppal is végeztünk, újrakezdjük a számítást, de soronként alulról felfelé, majd ha ezzel is végeztünk, akkor oszloponként, de jobbról balra számítjuk a következő iterált értékeket. Ezzel egy iterációs ciklus lezárult, és ha a konvergencia még nem következett be, akkor a mátrix bal felső elemével újra kezdjük soronként a számítást. Az IADI iteráció feltétlenül stabil, ezért alkalmazása nagyon előnyös.

A bemutatott eljárások a leggyakrabban használt módszerek a hidrodinamikai modellezés terén.

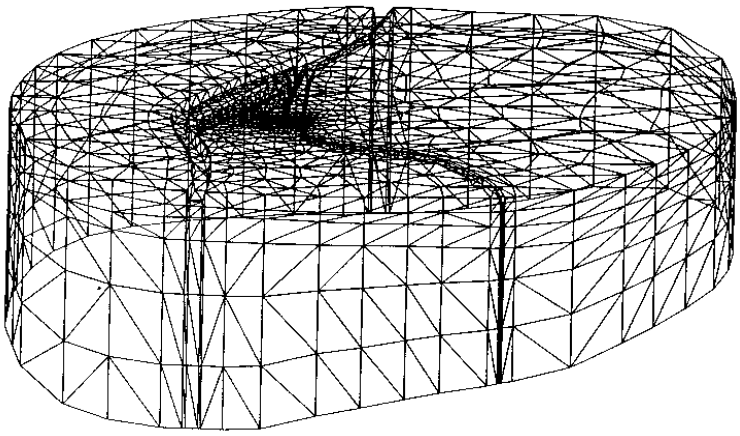
4.2.2.2. Végeselem-módszer

A szennyezőanyag-terjedés alapegyenletének végeselem módszerrel történő megoldása, hasonlóan a véges differencia módszerhez, ugyancsak megköveteli a modellezett tér tetszőleges számú csomópontra és az azokat összekötő vonalak által határolt elemekre történő felosztását. Míg azonban a véges differencia módszer megköveteli a rácsháló alkalmazását, addig *a végeselem módszer elvileg lehetővé teszi a tartomány tetszőleges alakú elemekre való felbontását* (21. ábra). Mindez egyben azt is jelenti, hogy az elemkiosztást a rendelkezésre álló információkhoz sokkal inkább hozzá lehet igazítani, mint azt a véges differencia módszernél láttuk. A továbbiakban a végeselem módszert – tekintettel arra, hogy a PMWIN környezet a véges differencia-megoldást használja - csak röviden mutatjuk be.

4.2.2.2.1.1. A végeselem módszer alapgondolata

A végeselem módszer alapgondolata a *lokális approximáció (lokális közelítés) elve*, ami azt jelenti, hogy az egyes, felvett elemek mentén a keresett mezőt vagy mezőket előre felvett paramétereket tartalmazó függvényekkel közelítjük. (Esetünkben nyomásszint, szivárgási sebesség vagy koncentrációmezők vizsgálatát végezzük el.) *A lokálisan felvett approximációs függvényeket azután a szomszédos elemek közös határai mentén valamilyen hibaelv alapján illesztjük, így végül a teljes vizsgált tartományra állítunk elő egy megfelelő rendben folytonos approximációs mezőt*. A hibaelv alkalmazása - konkrét matematikai átalakításokon keresztül egy lineáris vagy -

nem lineáris peremfeladat esetén - egy növekményes formátumú egyenletrendszerhez vezet, amelynek megoldása a korábban említett eredményeket szolgáltatja.

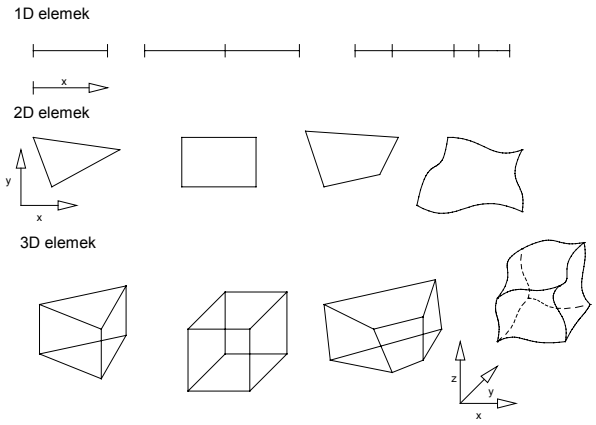


21. ábra
Egy szennyeződés modellezésénél használt végeselem-háló
(VOGT, 1993.)

Az említett alapelv a hidrodinamikai és transzportmodellezésnél a következőképpen valósul meg. Az elemek a végeselem-módszer esetén nem oldalaikon, hanem az elemek csomópontjaikon keresztül illeszkednek egymáshoz. Ennek megfelelően az elemek vízmérlege helyett a csomópontok vízmérlegét írjuk fel és nem az elemek átlagos nyomásszintjeit, hanem a csomóponti nyomásszinteket számítjuk. A térbeli folytonosság azáltal valósul meg, hogy egy adott csomópontban a potenciál értékének egyformának kell lennie függetlenül attól, hogy melyik - a csomóponthoz tartozó - elem felől közelítjük is meg. A kezdeti feltételek egy t_0 időpontbeli csomóponti potenciálértékek és a peremfeltételeket is a csomópontokban adjuk meg. Mivel valamennyi csomópontra felírható a vízmérleg, ezért a csomópontok számának megfelelő számú egyenletrendszer megoldását kell elvégeznünk, minek eredményeképpen valamennyi csomópontra meghatározzuk egy Δt idő elteltével kialakuló potenciálértéket.

4.2.2.2.1.2. A hálókiosztás elvei

A végeselem-háló egy-, két- és háromdimenziós elemekből épülhet fel, a megoldandó feladattól függően. Néhány gyakoribb elem-alakot a 22. ábra mutat be. Leggyakrabban az egydimenziós vonal és a kétdimenziós háromszög, illetve négyszög elemeket alkalmazzák. Térbeli feladatok megoldása esetén tetraéder, háromszög alapú oszlop vagy téglatest alakú elemek kialakítása a szokásos. *Az egyes elemek alakja, nagysága még azonos rendszeren belül is tetszőleges lehet, egyazon modellen belül többfajta elemet is alkalmazhatunk.* Természetesen az elemek számának növekedése az egyenletrendszert alkotó egyenletek és ennek megfelelően az ismeretlenek számának növekedésével jár együtt, ami könnyen meghaladhatja a számítógép erőforrásai által alkotott határt.



22. ábra
A végeselem módszernél alkalmazott gyakoribb elemtípusok
(ISTOK, 1989.)

Az elem- és csomópont-kijelölés néhány általános szabálya:

- A durvább hálóosztás pontatlanabb eredményekhez vezet, mint a finom, ezért törekedni kell arra, hogy a számítógép nyújtotta korlátokon belül, az alapadatrendszer sajátosságainak figyelembevételével egy megfelelően részletes hálót alakítsunk ki.
- A csomópontokat egyfelől a vízkivételek és betáplálások helyén, a modellezett tér határain és minden olyan pontban célszerű elhelyezni, ahová a későbbiek során számítási eredményeket kívánunk kapni.
- Azokon a területeken, ahol nagyobbak a koncentráció-, illetve áramlási sebesség (hidraulikus gradiens)-változások, célszerű finomabb osztást, míg a további területeken lazább hálót felvenni.
- A különböző anyagi tulajdonságokkal jellemzett területek határán úgy célszerű az elemek alakját megválasztani, hogy a határvonal az elemek oldalai mentén húzódjék. Az anyagi tulajdonságok egy-egy elemen belül állandóak, elemenként azonban különbözőek lehetnek.
- Az elemtípusok közül célszerű a legegyszerűbbet kiválasztani, azok közül, amelyek az adott probléma megoldásához megfelelnek.
- Az elemek nem lehetnek egymással átfedésben, a teljes modellezett teret ki kell tölteniük anélkül, hogy közöttük bármilyen űr maradna.
- Kerülni kell az erősen anizometrikus elemek alkalmazását, különösen a nem-permanens változások szimulációja esetén. Célszerű a finomabb osztásból a laza háló felé való fokozatos átmenetet kialakítani.
- Az adott probléma esetleges szimmetriáját jól megválasztott peremfeltételekkel célszerű kihasználni, így az elemek száma csökkenthető.

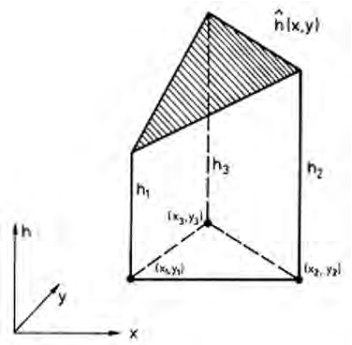
4.2.2.2.1.3. Végeselem módszer síkszivárgás vizsgálatára permanens esetben

A végeselem módszert célszerűen síkszivárgási feladatokra mutatjuk be. Ennek legfőbb oka, hogy a hidrodinamikai modellezésben használt 3D megoldások is általában 2D rétegek sorozatával dolgoznak, követve a rétegzett víztározók rendszerét. Terjedelmi korlátok miatt itt csak a permanens állapotra vonatkozó, könnyebben érthető megoldást mutatjuk be KINZELBACH (1986) és ISTOK (1989) nyomán.

A vízadó legyen izotróp és nyomás alatti vizet tároló. Először bontsuk az áramlási teret szabálytalan, a modellezett tér határait jól követő háromszög alapú hasábelemekre. A háromszög alapú elemek csomópontjait lokálisan 1,2,3 sorszámokkal látjuk el. Az alkalmazott háló csomópontokból (N db) és elemekből (M db) áll, azaz a csomópontok globális számozása 1, 2, 3, 4,…, N.

Vegyünk egy háromszög alapú elemet, melynek csomópontjai 1, 2, 3; koordinátái rendre (x_1,y_1), (x_2,y_2), (x_3,y_3); és a csomópontokban a nyomásszintek h_1, h_2, h_3 (23. ábra). Legyen a nyomásszint elemen belüli meghatározására alkalmas interpolációs függvény egy sík:

$$\hat{h}(x,y) = a + bx + cy\,. \qquad (4.74.)$$



23. ábra
A vizsgált elem az interpolációs függvénnyel
(KINZELBACH, 1986.)

Behelyettesítve a csomópontok koordinátáit:

$$\begin{aligned} h_1(x,y) &= a + bx_1 + cy_1\,, \\ h_2(x,y) &= a + bx_2 + cy_2\,, \\ h_3(x,y) &= a + bx_3 + cy_3\,. \end{aligned} \qquad (4.75.)$$

Ezek az egyenletek megoldhatóak a, b, c-re:

$$a=\frac{\begin{bmatrix} h_1 & x_1 & y_1 \\ h_2 & x_2 & y_2 \\ h_3 & x_3 & y_3 \end{bmatrix}}{D},\ b=\frac{\begin{bmatrix} 1 & h_1 & y_1 \\ 1 & h_2 & y_2 \\ 1 & h_3 & y_3 \end{bmatrix}}{D},\ c=\frac{\begin{bmatrix} 1 & x_1 & h_1 \\ 1 & x_2 & h_2 \\ 1 & x_3 & h_3 \end{bmatrix}}{D},\ D=\begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{bmatrix}=2F\ , \quad (4.76.)$$

ahol F az 1,2,3 csomópontok által határolt terület. Bevezetve az alábbi jelöléseket:

$$\begin{aligned} &A_1 = x_2y_3 - y_2x_3, \quad A_2 = x_3y_1 - y_3x_1, \quad A_3 = x_2y_1 - y_2x_1, \\ &B_1 = y_2 - y_3, \quad B_2 = y_3 - y_1, \quad B_3 = y_1 - y_2, \\ &C_1 = x_3 - x_2, \quad C_2 = x_1 - x_3, \quad C_3 = x_2 - x_1, \end{aligned} \quad (4.77.)$$

és behelyettesítve a (8.39.) egyenletbe:

$$\begin{aligned} &\hat{h}(x,y) = h(x,y,h_1,h_2,h_3,x_1,x_2,x_3,y_1,y_2,y_3) = \\ &= \frac{h_1\left(A_1 + B_1x + C_1y\right) + h_2\left(A_2 + B_2x + C_2y\right) + h_3\left(A_3 + B_3x + C_3y\right)}{D}, \end{aligned} \quad (4.78.)$$

ahol D a determináns. Alkalmazva Darcy törvényét síkszivárgási esetre, és feltételezve, hogy a k_S síkszivárgás szivárgási tényezője az elemen belül állandó:

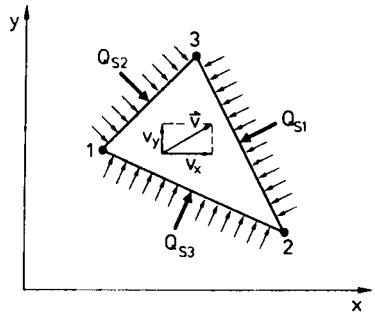
$$v_x = -k_s\frac{\partial \hat{h}}{\partial x} = -k_s\frac{h_1B_1 + h_2B_2 + h_3B_3}{D} \text{ és} \quad (4.79.)$$

$$v_y = -k_s\frac{\partial \hat{h}}{\partial y} = -k_s\frac{h_1C_1 + h_2C_2 + h_3C_3}{D}. \quad (4.80.)$$

Tehát a v_X és v_Y sebességvektor-komponensek az elemen belüli (x, y) helyzettől függetlenül állandóak. (Ez abból következik, hogy az interpolációs függvény sík). A (4.78.) egyenlet az adott elemen keresztül szivárgó víz mennyiségét határozta meg. Ez a vízmennyiség az áramlási sebességvektor irányától (az interpolációs sík dőlésirányától) függően lép be és ki a háromszög alapú hasábelem oldalain. Az oldalfalaknál fellépő hozamokat jelöljük így: Q_{s1},Q_{s2},Q_{s3} (24. ábra). Mivel az interpolációs sík dőlésiránya és szöge a szomszédos elemekben természetszerűleg nem lehet azonos, ezért a vízmérleg az elemek oldalai mellett sérül (az egyik elemből az adott oldalfalon keresztül kilépő vízmennyiség nem pontosan egyenlő a szomszédos elem érintkező falán belépő vízmennyiséggel). A kontinuitást - ha az egyes oldalfalak mentén nem lehet biztosítani – legalább az egyes elemek szintjén meg kell valósítani, ehhez pedig az oldalfalak mentén fellépő hozamokat a csomópontokhoz kell rendelnünk.

Vezessük be a W_i csomóponti áramlás fogalmát, úgy, hogy az egyes csomópontokhoz hozzárendeljük a szomszédos oldalakon átáramló hozamok felét. A kontinuitás törvénye miatt az elemre igaz kell, hogy legyen:

$$W_1 = \frac{Q_{s3}}{2} + \frac{Q_{s2}}{2} = -\frac{Q_{s1}}{2},\ W_2 = \frac{Q_{s3}}{2} + \frac{Q_{s1}}{2} = -\frac{Q_{s2}}{2},\ W_3 = \frac{Q_{s1}}{2} + \frac{Q_{s2}}{2} = -\frac{Q_{s3}}{2}. \quad (4.81.)$$



24. ábra
Csomóponti hozamok értelmezése
(KINZELBACH, 1986.)

A Q_{si} hozamok meghatározhatóak, mint a v sebességvektor az adott oldalra merőleges komponensének, az m vízadó telített vastagságának és az adott elemoldal hosszának szorzatai:

$$Q_{s1} = \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} y_2 - y_3 \\ x_3 - x_2 \end{bmatrix} \cdot m, \; Q_{s2} = \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} y_3 - y_1 \\ x_1 - x_3 \end{bmatrix} \cdot m,$$

$$Q_{s3} = \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} y_1 - y_2 \\ x_2 - x_1 \end{bmatrix} \cdot m. \qquad (4.82.)$$

Behelyettesítve a (4.81) egyenletbe a v_x és v_y szivárgási sebességeket ((4.79.) és (4.80.)), Q_{si} hozamokat ((4.82.)), valamint felhasználva, hogy $T = k_s m$:

$$W_i = \sum_{j=1}^{3} E_{i,j} \cdot h_j \text{, ahol } E_{i,j} = \frac{T\left(B_i B_j + C_i C_j\right)}{2D}, \text{ i=1,2,3 és j=1,2,3.} \qquad (4.83.)$$

A (4.83.) egyenlet azt jelenti, hogy a csomóponti hozamok a csomópontokban érvényes ismeretlen nyomásszintek lineáris függvényei. Eddig csak egyetlen elemmel foglalkoztunk, azaz a lokális approximációt alkalmaztuk, most kiterjesztjük az ismereteket a teljes modellezett térrészre. A lokális (elemi) jelölésrendszer kiterjesztését a globális rendszerre az incidencia-mátrix segítségével végezzük el. Az incidencia-mátrix mutatja meg a csomópont globális k sorszámát az elem e sorszáma és a csomópont i sorszáma függvényében (k=k(e, i)), ahol e=1, 2, …, M és i=1, 2, 3.

Az összes csomóponthoz rendelt adatot az incidencia-mátrixban tárolt k sorszámnak megfelelően átnevezzük (x_k, y_k, h_k és W_k) ahol k = k(e,i), ahol i = 1, 2, 3 és e = 1, 2, …, M:

$$x_i^e \Rightarrow x_k^g; \quad y_i^e \Rightarrow y_k^g; \quad h_i^e \Rightarrow h_k^g; \quad W_i^e \Rightarrow W_k^g, \qquad (4.84.)$$

ahol a felső index az elemi (lokális) vagy globális jelölésrendszert jelenti és i = 1, 2, 3, illetve k = 1, …, N.

A (4.77.) szerinti A, B és C vektort is átalakítjuk a csomópontok N darabszámának megfelelő vektorra, ahol az összes komponens - három kivételével - zérus. A (4.83.) szerinti, 3x3 elemből álló, lokális E mátrixot a globális NxN elemű globális E mátrixszá alakítjuk, amelynek 9 elem kivételével minden eleme zérus.

$$A_i^e \Rightarrow A_k^g; \quad B_i^e \Rightarrow B_k^g; \quad C_i^e \Rightarrow C_k^g; \quad E_{ij}^e \Rightarrow E_{kl}^g, \tag{4.85.}$$

ahol a felső index az elemi (lokális) vagy globális jelölésrendszert jelenti, és i és j = 1, 2, 3, illetve k és l = 1, 2, …, N.

A (4.83.) elemre vonatkozó egyenletet most írjuk fel a globális mátrixok segítségével:

$$W_k^e = \sum_{l=1}^{N} E_{kl}^e \cdot h_l \tag{4.86}$$

A W_k értékek zérust adnak az összes olyan k sorszámú csomópontra, amelyik nem tartozik az adott elemhez. Most írjuk fel a kontinuitást az összes csomópontra. A kontinuitás miatt az összes W_k csomóponti hozam és a csomópontnál kitermelt Q hozamok előjeles összege zérus, azaz

$$\sum_{e=1}^{M} W_k^e + Q_k = 0, \tag{4.87.}$$

ahol k=1, 2, …, N, és ahol Q_k az elemben lévő külső (piezometrikus nyomástól független) források és nyelők összes hozama. A (4.87.) összefüggés egy N darab egyenletből álló egyenlet-rendszer, ahol az N db ismeretlen az N db csomópontbeli h_k nyomásszint.

A (4.86.) egyenletet a (4.87.) egyenletbe illesztve az N csomópontú és M elemből álló hálóra kapjuk:

$$\sum_{e=1}^{M}\left[\sum_{l=1}^{N} E_{kl}^e \cdot h_l\right] + Q_k = 0, \text{ ahol k=(1, 2, ..., N)}, \tag{4.88.}$$

vagy

$$\sum_{l=1}^{N}\left[\sum_{e=1}^{M} E_{kl}^e\right] \cdot h_l + Q_k = 0, \text{ ahol k=(1, 2, ..., N)}, \tag{4.89.}$$

illetve általános alakban

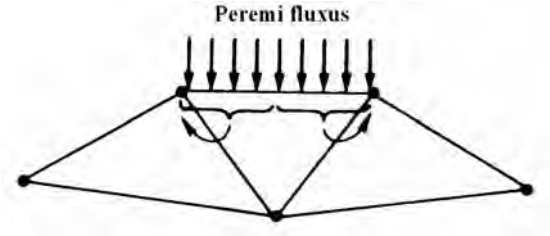
$$\sum_{l=1}^{N} a_{kl} \cdot h_l + Q_k = 0, \text{ k=(1, 2, ..., N), ahol } a_{kl} = \sum_{e=1}^{M} E_{kl}^e. \tag{4.90.}$$

Az egyenletet minden elemre felírva N darab N ismeretlenes egyenletből álló egyenletrendszert kapunk, amit a véges differencia módszer megoldásánál ismertetett, iteratív matematikai módszerrel megoldunk.

4.2.2.2.1.4. Peremfeltételek megadása

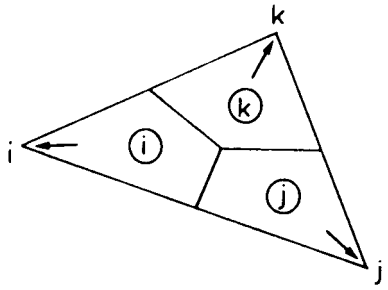
A peremfeltételek elsősorban Neumann- és Dirichlet-típusúak lehetnek. A vízzáró határ (Neumann-típus) szimulációjakor azokat a peremi helyzetű csomópontokat, ahol nincs áramlás, egyszerűen belső helyzetűnek kell tekinteni. Az áramlás hiányát

automatikusan figyelembe vesszük azzal, hogy a határ túlsó oldalán az elemek hiányoznak. Az adott, állandó hozamú perem esetén a Q_k értékbe javasolt a hozamot beszámítani (az áramlás az elem falán keresztül történik, a határon beáramló hozam a két szomszédos csomópontnál fele-fele arányban számítandó be) (25. ábra). Az állandó piezometrikus nyomásszintű határ (Dirichlet-típus) esetén a határon fekvő csomópontoknál a h_k = konstans szintet helyettesítjük be a (4.87.) egyenlet adott csomópontra való felírásakor.



25. ábra
Peremi hozamok csomópontokhoz rendelése
(KINZELBACH, 1986.)

Amennyiben a területen megoszló terhelésként jelentkező hozamokat (pl. maradó beszivárgás) is a rendszerbe illeszteni kívánunk, akkor ezeket a hozamokat is a csomópontokhoz kell rendelni (26. ábra).



26. ábra
Megoszló terhelések csomópontokhoz rendelése
(KINZELBACH, 1986.)

4.2.2.3. A numerikus megoldások jellemző hibái

A numerikus megoldások hibákkal terheltek. A numerikus megoldás alapgondolatából ered az a triviális hiba, hogy a numerikus megoldás matematikai szempontból közelítő: Amennyiben pl. iteratív módszert használunk, akkor a közelítés mértékét mi magunk határozzuk meg, azáltal, hogy megadjuk azt az értéket, melynél kisebb eltéréseket találva az utolsó és az azt megelőző iteráció eredménye között, akkor az iterációt eredményesnek tekintjük, azaz az utolsó iteráció során kapott eredményt a megoldásnak tekintjük. Ezt az értéket *konvergencia kritérium*nak szokták nevezni.

Ahhoz, hogy a számítás során az iteratív megoldás eredményes legyen, két feltételnek kell teljesülnie: egyrészt a megoldás hibájának a konvergencia kritériumnál kisebbnek kell lennie, másrészt az iterációk számának az általunk engedélyezett maximális iterációszámnál kisebbnek kell lennie.

A konvergencia kritérium mértékegysége mindig a vizsgált mennyiség mértékegysége, azaz a hidrodinamikai modellezés során hosszúság dimenziójú, minthogy a víz- vagy nyomásszinteket pl. mBf. egységben számítjuk. Mettől kisebb a konvergencia kritériumban meghatározott érték, a valóságot annál jobban követő megoldást kapunk.

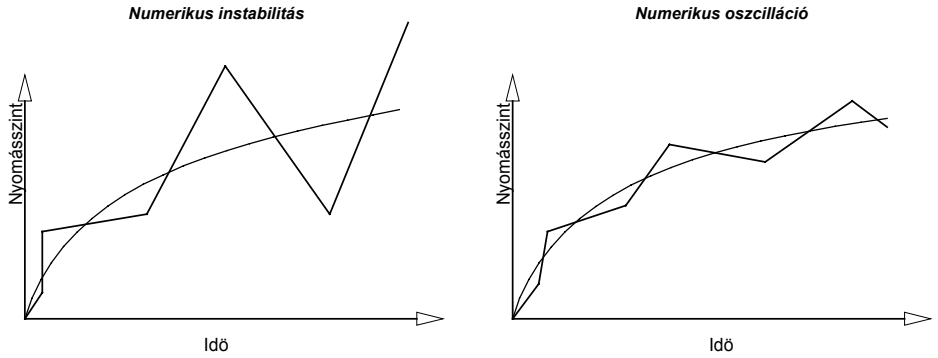
Bár a konvergencia kritériumot magunk választjuk meg, mégis szükséges a következőket figyelembe venni. A konvergencia kritérium által meghatározott maximális nyomásszint-hibák a kialakuló hidraulikus gradiensben is hibát okoz. A gradiensben okozott hiba – egyenletesen megoszló nyomásszint-hibát feltételezve – ott lesz a legnagyobb, ahol a legkisebb elemek vannak, mivel a gradiens $I = \frac{\Delta h}{\Delta x}$ *vagy* $I = \frac{\Delta h}{\Delta y}$ pl. véges differencia módszernél. A gradiensben elkövetett hibát a szivárgási keresztmetszettel szorozva kapjuk a vízmérlegben elkövetett hibát, ennek alapján, ahol nagyobb az elem Δx és Δy oldalhosszának és a vízadó telített vastagságának szorzata, ott kell a közelítésből fakadó hibáknak a legnagyobbaknak lenniük. Ezek a hibatényezők részben egymás ellen hatnak, ugyanakkor mindig vigyázni kell arra, hogy *a vízmérleg-hiba elméleti maximuma mindig elhanyagolhatóan kicsi legyen a rendszerből az egyes források és nyelők által kitermelt vagy eltávolított vízmennyiséghez képest*. Éppen ezért javasolt a konvergencia-kritériumot úgy megválasztani, hogy a legkedvezőtlenebb esetekben sem lehessen a vízmérleg-hiba nagyobb, mint az egyes elemekből kitermelt minimális vízmennyiség 1%-a. Ez a hiba az esetek legnagyobb részében még megengedhető, egyes speciális esetektől eltekintve.

Az iteratív megoldás során van lehetőség az iterációk maximális számának megadására is. Amennyiben a megoldás konvergens, csak lassan közelít a valós megoldáshoz, akkor az iterációk lehetséges számának növelésével konvergencia kritériumnak megfelelő megoldáshoz juthatunk. Azonban arra figyelemmel kell lenni, hogy *általában a reális adatrendszereknél végzett iteratív számítások gyorsan konvergálnak, míg azok a rendszerek, melyeken belül belső ellentmondások vannak, azok igen lassan*. Éppen ezért nem célszerű az iterációk maximális számát egy határon túl növelni, mert a kapható megoldás szakmailag helytelen lesz. Ezzel az eszközzel inkább a modellezés kezdeti szakaszán élünk, amikor tudjuk, hogy az adatrendszer még nem kellően kiforrott, ugyanakkor a kapott szakmailag megkérdőjelezhető megoldás alapján szeretnénk visszakövetkeztetni arra, hogy hol keresendő a hiba. Természetszerűleg az iterációk számának emelésével a kerekítési hiba nem növekszik, tehát ilyen szempontból a hosszú iterálás és a rövid iteráció után kapott eredmények elvileg egyenértékűek.

A továbbiakban a módszerből eredő hibákat tudomásul vesszük,, ezeket nem tekintjük többé hibáknak, azaz *a konvergens megoldást numerikus szempontból helyesnek*

tekintjük. A megoldás azonban nem feltétlenül konvergens, két numerikus hiba léphet fel: *a divergencia, azaz instabilitás és az oszcilláció*.

A megoldás instabilitásán azt értjük, hogy a közelítő megoldás a valódi megoldáshoz nem konvergál (27. ábra). Az instabilitás jelensége elsősorban explicit megoldási módok esetén jelentkezik, azonban az elemszám növekedésével, elsősorban háromdimenziós numerikus modellek és/vagy implicit megoldó rutinok használata esetén is előfordul. Az instabilitás egyik speciális esete *a numerikus oszcilláció, amikor a számítások eredményei nem képesek a hibahatáron belül közelíteni a valós megoldást*. A numerikus hibák csökkentésére vonatkozó gyakorlati lehetőségeket a gyakorlati hidrodinamikai és transzportmodellezés című fejezetben foglaljuk össze.



27. ábra
A numerikus instabilitás és a numerikus oszcilláció jelensége

4.2.2.4. Az analitikus elemek módszere (Analitic Element Method, AEM)

Az analitikus elemek módszerét STRACK fejlesztette ki a ’80-as évek elején. A kezdetben kevésbé népszerű megoldás mára egyre ismertebbé válik, és mind a tudományos, mind a kereskedelmi szoftverek terén terjed. Az analitikus elemek módszerét itt csak röviden ismertetjük részletes leírását STRACK és HAITJEMA (1981) és STRACK (1989) tartalmazza.

Az analitikus elemek módszerét eredetileg 2D problémák vizsgálatára fejlesztették ki, de később rétegzett rendszerek leírására is alkalmassá tették. Az analitikus módszerek alkalmazásánál feltételezzük, hogy a víz szivárgása uralkodóan vízszintes irányban történik a vertikális sebességkomponenseket, és a kőzet szivárgással szembeni ellenállását függőleges irányban ezért elhanyagolhatjuk (DUPUIT-FORCHEIMER közelítés). Amennyiben 3D megoldásról van szó, akkor ott ilyen 2D rendszerek sorozatára történik a számítás.

Az analitikus elemek módszerének alapgondolata analitikus összefüggések szuperpozíciója, azaz ezáltal a különböző termelőlétesítmények depressziós terének szuperpozíciója. Valamennyi alkalmazott analitikus függvény kielégíti a Poisson- vagy a Laplace-egyenletet. Egy-egy analitikus összefüggés egy-egy elemtípust jelképez. Ilyen analitikus elem-típusokat fejlesztettek ki az azonos homogén talajvíz-áramlásra, csa-

padék beszivárgásra, folyó, patakok, tavak szimulációjára. A rendszerbe speciális elemekkel akár résfalak, repedések szivárgók stb. is beilleszthetők.

Az alapgondolat értelmében *nincs szükség a vizsgált tér rácshálóval vagy egyéb módon történő elemekre bontására*, a diszkretizálásra. Ebben a rendszerben csak *a felszíni vizeket szimbolizáló elemek esetén történik a diszkretizálás, azaz szakaszokra bontás, azonban az összes ilyen szakasz, mely egy folyó vagy tó egy-egy részletét jelenti, zárt alakú analitikus összefüggéssel szerepel a rendszerben, ezeket hívjuk analitikus elemeknek*. Egy komplex, regionális felszín alatti szivárgási rendszer szimulációját így néhány száz analitikus elem hatásának összegzésére vezetjük vissza.

Az analitikus megoldások szuperpozícióját hagyományosan csak homogén, állandó transzmisszivitással jellemezhető vízadókra lehetett alkalmazni. A felszín alatti vízáramlási problémák speciális kezelése megfelelően a megválasztott víztermelési potenciálok segítségével lehetővé tette, hogy zárt és nyílt tükrű, valamint inhomogén vízadókban történő folyamatok szimulációját is. Az egyes jelenségek szimulációjára olyan analitikus elemeket választunk, amelyek a legjobban reprezentálják az adott jelenséget, pl. tavak határai vagy patakok vonalmenti forrásként vagy nyelőként, kis tavak mocsarak területi forrásként szerepelnek a rendszerben. A rendszer a forrásokat negatív nyelőkkel szimulálja. A nem teljes hidrodinamikai kommunikációval jellemezhető tavak vagy patakokat olyan vonalmenti vagy területi források vagy nyelők szimbolizálják, melyek fenékellenállással rendelkeznek. A vízadó vastagsági és hidrodinamikai (szivárgási tényező) diszkontinuitásai kettősrétegekkel szimulálhatók.

A módszer alkalmazása során néhány pontban illesztjük a modellt a valósághoz. Ezeket ellenőrző pontoknak hívjuk. Az ellenőrző pontok darabszámának meg kell egyeznie az összes ismeretlen számával a vizsgált területen, így válik a rendszer határozottá. Az ellenőrző pontok az analitikus elemek módszerének peremfeltételei.

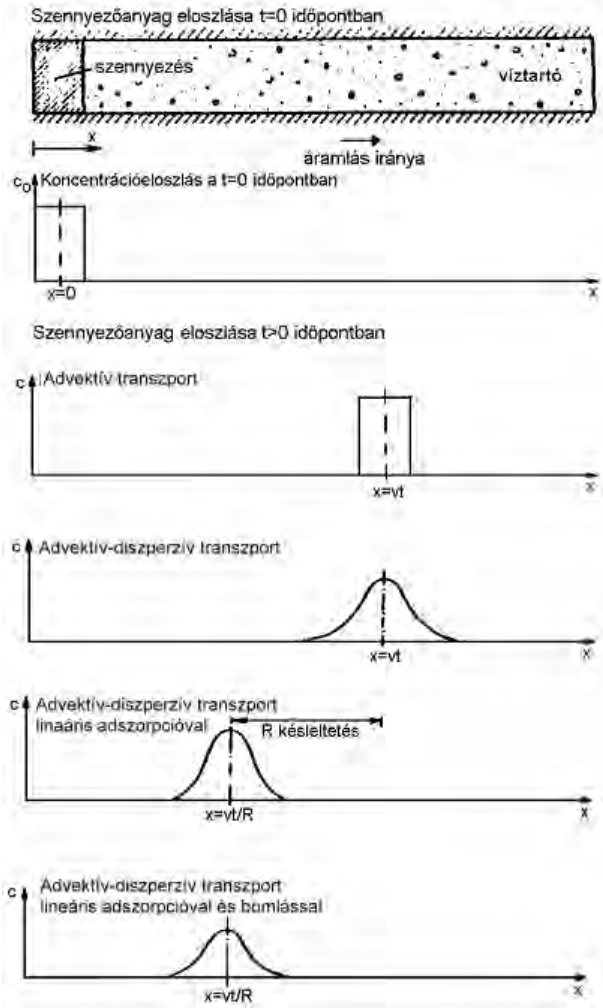
Az analitikus elemek módszere is csak közelítő végeredményt ad. Az eredmény azonban matematikai szempontból teljesen analitikus, az eredményt iteráció nélkül kapjuk, a szivárgási sebességet pedig a kapott nyomásszintek deriválásával számíthatjuk.

Az analitikus elemek módszerének a legnagyobb előnye az úgynevezett lépésenkénti modellezés lehetősége, ami annyit jelent, hogy először egy gyengébben feltárt területen kevesebb elemmel végezzük el a gyors számításokat, majd ahogyan egyre ismertebbé válik a terület, újabb és újabb elemeket illeszthetünk tetszőleges számban a rendszerbe. Nincs az ismeretek növekedése miatt a háló sűrítésére szükség, ugyanaz a rendszer szolgálhat akár eltérő problémák vizsgálatára.

5. A szennyezőanyagok terjedésének törvényszerűségei porózus közegben

5.1. A transzport-folyamatok és a transzportegyenlet

A vízben oldható szennyezőanyagok terjedését két alapvető folyamat határozza meg: egyfelől *az advekció (konvekció), amely a fizikailag vagy kémiailag oldott anyagok pórusokban való tömeges áramlását; másfelől a diszperzió, amely a szennyezőanyag térbeli szóródását jelenti.* (28. ábra)



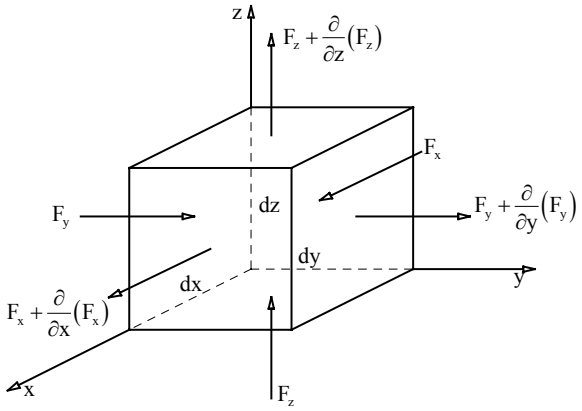
28. ábra
A transzportfolyamatok jellegzetes elemei
(KINZELBACH, 1986)

A szóródást kémiai illetve fizikai folyamatok okozhatják. Eredete részben a diffúzióra, amely a különböző koncentrációjú oldatok között a részecskéknek a koncentráció-különbség kiegyenlítődéséig tartó mozgása, részben a szivárgási sebesség lokális eltérései következtében kialakuló mechanikai diszperzióra vezethető vissza. A két alapvető folyamaton kívül további fizikai és kémiai folyamatok az oldat áramlásának késleltetéséhez, valamint a szennyezőanyag lebomlásához, degradációjához vezethetnek (TAMÁS et. al. 2002).

5.1.1. A kémiai anyagmérleg

Tekintsük a porózus közeg egy elemi kockáját x, y, z koordinátarendszerben úgy, hogy annak oldalai merőlegesek a koordináta tengelyekre. Legyenek a térbeli szennyezőanyag-áramot leíró fluxus-vektor komponensei F_x, F_y és F_z. A kémiai anyagmérleget figyelembe véve az elemi kockában tárolt anyagmennyiség időbeli megváltozásának egyenlőnek kell lennie az elemi kockába - időegység alatt - be- és kilépő fluxusok előjeles összegével. Az elemi kockában tárolt anyagmennyiség változása a belépő és kilépő fluxusok különbsége, azaz (29. ábra):

$$\frac{dM}{dt} = \frac{\partial}{\partial x}(F_x)dydz + \frac{\partial}{\partial y}(F_y)dxdz + \frac{\partial}{\partial z}(F_z)dxdy \qquad (5.1.)$$



29. ábra
Az elemi térrész szennyezőanyag-mérlege

5.1.2. A transzportfolyamat elemei

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

A valós anyagmérleget tovább módosíthatják a reverzibilis és irreverzibilis kémiai folyamatok következtében mobilizálódó vagy lekötődő anyagmennyiségek, amelyeket napjaink transzport-modelljei általában figyelmen kívül hagynak, mivel ezeknek a jelenségeknek a számításokkal való követése bonyolult és a hidraulikai esemé-

nyekkel közvetlen kapcsolatban sincsenek. A kémiai folyamatok pontos követésére a nemzetközi szakirodalomban csupán néhány próbálkozás található, ezek elsősorban egydimenziós transzportmodellek, melyek homogén áramlási teret tételeznek fel.

5.1.2.1. Az advektív (konvektív) anyagáramok

Az oldott anyagok vízzel való együttes tömeges áramlását advekciónak , illetve a hőtanból kissé helytelenül átvéve konvekciónak nevezzük. (konvekció: hőmérsékleti különbségek hatására létrejövő mozgási folyamat; advekció: a potenciálos (és a hőt kizáró) erőtér által létrejött mozgási folyamat (MÁRKOS, 1987)). Az advektív szennyezőanyag-áram a közegbeli v átlagos áramlási sebesség és a C koncentráció szorzata, azaz:

$$F_{x,konv.} = \frac{dM_{x1}}{dydzdt} = v_x C, \quad F_{y,konv.} = \frac{dM_{y1}}{dxdzdt} = v_y C, \quad F_{z,konv..} = \frac{dM_{z1}}{dxdydt} = v_z C, \quad (5.2.)$$

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

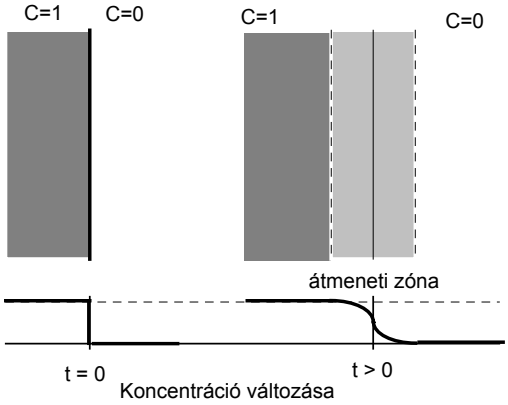
5.1.2.2. A diffúzió

A térbeli kémiai potenciál-különbségek hatására létrejövő tömegáramot, melyet a Fick I. törvénye ír le, diffúziónak nevezzük. A koncentráció-különbségek hatására létrejövő diffúziót közönséges diffúziónak (30. ábra), *míg az elektromos potenciál- vagy hőmérséklet-különbségek okozta anyagáramokat kényszerdiffúziónak nevezzük* (FILEP, 1988).

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

$$F_{x,diff.} = \frac{dM_{x2}}{dydzdt} = -D_{eff}\frac{\partial C}{\partial x}, \quad F_{y,diff} = \frac{dM_{y2}}{dxdzdt} = -D_{eff}\frac{\partial C}{\partial y}, \quad F_{z,diff} = \frac{dM_{z2}}{dxdydt} = -D_{eff}\frac{\partial C}{\partial z}, \quad (5.3.)$$

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



30. ábra
A közönséges diffúzió folyamata
(BEAR-VERRUIJT, 1987)

A vízben mért és a porózus közegbeli diffúzió-állandó közötti kapcsolatra számos empirikus összefüggést határoztak meg, melyeket az 5.1.táblázat mutat be.

5.1. táblázat

Az effektív diffúzió-állandó meghatározása néhány szerző szerint SHACKELFORD és DANIEL (1991) nyomán	
Képlet	Szerző
$D_{eff} = D_0 / \tau$	GILLHAM et al.(1984), BARONE et. al.(1990)
$D_{eff} = D_0 \cdot \alpha / \tau$	LI és GREGORY (1974)
$D_{eff} = D_0 \Theta / \tau$	BERNER (1971), DREVER (1982)
$D_{eff} = D_0 \Theta \alpha \gamma / \tau$	KEMPER et al.(1964), OLSEN és KEMPER (1968), NYE (1979)
$D_{eff} = D_0 \gamma / \tau$	PORTER et al.(1960)
$D_{eff} = D_0 \Theta \alpha / \tau$	van SCHAIK és KEMPER (1966)
$D_{eff} = D_0 \cdot \frac{1}{\tau(1+K_d)}$	FILEP (1988) FRIED és COMBARNOUS (1971) alapján
$D_{eff} = D_0 \cdot \frac{\Theta}{\tau^2} = D_0 \cdot \frac{1}{F}$	A tárolómérnöki gyakorlatban alkalmazott formula, ahol F a formációs ellenállási tényező

ahol:
D_0 a vizes oldatban mért diffúzió-állandó
θ a víztartalom térfogat %-ban, a fázisos összetétel v jelzőszáma
τ a tortuozitás (labirintus-faktor, tekervényesség)
γ a negatív adszorpciós szorzótényező (≤ 1)
α a viszkozitási faktor (≤ 1)
K_d a megoszlási együttható

Mint az látható, az effektív diffúzió-állandó egyenesen arányos a vizes oldatban mért diffúzió-álladóval és fordítottan a tortuozitással. A tortuozitás értéke porózus közegben általában 1,25 és 5 között változik a szemcseméret-eloszás és a szemcsék érintkezésének módja függvényében. Tömény oldatok, valamint viszkózus anyagok esetén az adszorpció mértékét meghatározó negatív adszorpciós tényező, valamint a viszkozitási faktor tovább csökkenti az effektív diffúzió-állandó értékét. A diffúzió állandónak a bemutatott táblázat szerinti számítása a felsorolt paraméterek meghatározási bizonytalanságai miatt nehézkes, ezért az effektív diffúzió állandót laboratóriumi kísérletek segítségével szokás meghatározni.

A D_0 értékét néhány ion híg vizes oldatára vonatkozóan, 25 °C hőmérsékleten, az 5.2. táblázat foglalja össze. Tekintettel arra, hogy a vizes oldatra vonatkozó diffúzió állandók kémiai kézikönyvekből kikereshetők, már egy komponensre meghatározva az effektív diffúzió állandót, az összes többi komponensre jó közelítéssel megkaphatjuk az effektív diffúzió állandót:

$$D_{eff}^{sp2} \cong \frac{D_{eff}^{sp1} \cdot D_0^{sp2}}{D_0^{sp1}}. \qquad (5.4.)$$

5.2. táblázat

Néhány ion vizes oldatban mért diffúzió-állandója 25 °C-on QUIGLEY és szerzőtársai (1987) LERMAN (1979) nyomán			
Kation	**D_0 (x 10^{-10} m^2/s)**	**Anion**	**D_0 (x 10^{-10} m^2/s)**
H	93,1	OH	52,7
Li	10,3	Cl	20,3
Na	13,3	HS	17,3
K	19,6	SO_4	10,7
NH_4	19,8	NO_2	19,1
Mg	7,05	NO_3	19,0
Ca	7,93	HCO_3	11,8
Mn	6,88	CO_3	9,55
Fe	7,19	PO_4	6,12
Cu	7,33	CrO_4	11,2
Zn	7,15		
Cd	7,17		
Pb	9,45		

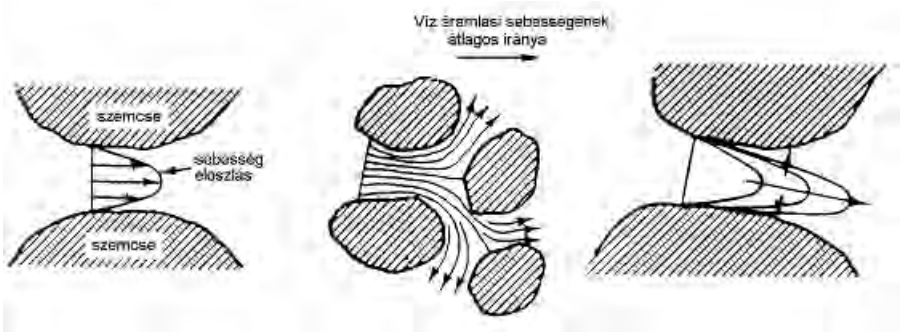
A diffúzió-állandó szigorú értelemben véve nem tekinthető állandónak, mivel értéke kis mértékben függ a koncentrációtól (SHAW, 1986) és erősen függ a hőmérséklettől is. Egyes laboratóriumi vizsgálatok szerint értéke 5°C-on akár felére is csökkenhet a 25 °C-on mért értékhez képest (ISTOK, 1989). FILEP (1988) szerint az ionok effektív diffúziós együtthatóját befolyásolja továbbá a közeg nedvességtartalma, illetve a közeg szerkezete, pórusméret-eloszlása (illetve az ezektől függő labirintus-hatás).

5.1.2.3. A hidrodinamikai (mechanikai) diszperzió

A hidrodinamikai diszperzió - egyes szerzők szerint mechanikai diszperzió - *jelenségét az áramlási sebesség nagyságának és irányának lokális mikro-változásai okozzák a porózus közegen belül* (31. ábra).

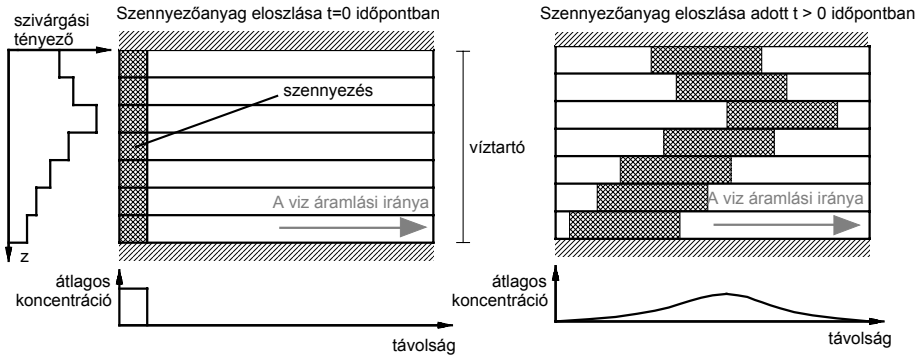
A hidrodinamikai diszperziót okozó legfontosabb hatások:

- *a szivárgási sebesség nagyságának változása a pórusokon belül*, mivel a szemcséket körülvevő kötött vízburok esetén a szivárgási sebesség zérus. és távolodva a szemcsétől a sebesség növekszik,
- *a szivárgási sebesség irányainak változása*, mivel a szivárgó folyadékban a szemcsék kikerülése miatt pontról pontra változik a szivárgási sebességvektor iránya,
- *a pórusok méretváltozásai*, mert az eltérő nagyságú (átmérőjű) pórusokban két különböző potenciállal jellemezhető pont között eltérő szivárgási sebességek alakulnak ki.



31. ábra
A hidrodinamikai (mechanikai) diszperziót előidéző jelenségek
(BEAR-VERRUIJT, 1987)

A hidrodinamikai diszperzió egy speciális esete az úgynevezett *makrodiszperzió* (32. ábra)*, amikor az egymástól eltérő vízföldtani tulajdonságokkal (szivárgási tényező, transzmissziviitás, szabad hézagtérfogat stb.) jellemezhető földtani képződményekben kialakuló egymástól eltérő áramlási sebességek okozzák a szennyezőanyag szóródását, diszperzióját*. Gyakorlati tapasztalatok szerint a makrodiszperzió abban az esetben válik dominánssá az egyéb mechanikai diszperziós folyamatok felett, amikor a modellezett területrész horizontális kiterjedése meghaladja a 10÷50 métert.



32. ábra
Szennyezőanyag makrodiszperziójának kialakulása
(KINZELBACH, 1986)

Mind a hidrodinamikai (mechanikai), mind a makrodiszperzió következtében kialakuló szennyezőanyag-hozam – a jelenséget kiváltó okokból következően - *arányos a pórusokra jellemző átlagos szivárgási sebességgel,* tehát nagyobb pórusbeli szivárgási átlagsebesség mellett nagyobb lesz a szennyezőanyag szóródása is az említett transzport-folyamatok következtében. Ugyanez nem igaz ugyanakkor *a diffúzió miatti anyagtranszport*ra, mert az *teljesen hidraulikus gradiens, azaz szivárgási sebesség független, nagysága kizárólag a koncentráció-gradiens és az effektív diffúzió-állandó függvénye*.

Tekintettel arra, hogy a hidrodinamikai diszperzió (beleértve a makrodiszperziót is), illetve a diffúzió okozta koncentráció-eloszlás jellegében azonos, ezért *a hidrodinamikai diszperzió következtében kialakuló anyagmozgást is* – az analógiát felhasználva - *Fick I.törvénye segítségével írhatjuk fel.*

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

$$F_{y,Hidrodin.diszp.} = \frac{dM_{y3}}{dxdzdt} = -D_{yx}\frac{\partial}{\partial x}(\Theta C) - D_{yy}\frac{\partial}{\partial y}(\Theta C) - D_{yz}\frac{\partial}{\partial z}(\Theta C), \quad (5.5.)$$

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

ahol D_{xx}, D_{xy},..., D_{zz} a hidrodinamikai diszperzió-állandó. Tekintettel arra, hogy a (5.5.) szerinti diszperzív hozamok arányosak a pórusokban kialakuló átlagos szivárgási sebességgel, ezért a D_{xx}, D_{xy},..., D_{zz} hidrodinamikai diszperzió-állandóknak is arányosnak kell lenniük a pórusokban kialakuló átlagos szivárgási sebességgel. Az említett átlagos pórusbeli szivárgási sebességet a Darcy-törvényből meghatározott v_X, v_Y és v_Z sebességek felhasználásával számíthatjuk:

$$\bar{v}_x = \frac{v_x}{\Theta}, \qquad \bar{v}_y = \frac{v_y}{\Theta}, \qquad \bar{v}_z = \frac{v_z}{\Theta}, \qquad (5.6.)$$

mivel a Darcy által feltételezett teljes V térfogat helyett csak a $V_p = \Theta \cdot V$ pórustérfogaton keresztül történik a folyadék mozgása.

A szivárgási sebesség és a hidrodinamikai diszperzió-állandó közötti arányszámot diszperzivitásnak nevezzük. Tekintettel arra, hogy a diszperzió-állandó mértékegysége a Fick-törvény analógiájára [L^2/T], a szivárgási sebességé [L/T], ezért a diszperzivitás hosszúság [L] dimenziójú. Mivel a szennyezőanyag hidrodinamikai és makrodiszperzió miatti szóródása eltér a szivárgás irányában és arra merőleges irányokban, ezért szükséges a longitudinális és a transzverzális diszperzivitás fogalmának bevezetése.

A diszperzió-állandó számításának módját az α_L longitudinális és α_T transzverzális diszperzivitás felhasználásával SCHEIDEGGER (1957) adta meg:

Egydimenziós esetben :

$$D_{xx} = D_x = \alpha_L \bar{v}_x . \qquad (5.7.)$$

Kétdimenziós esetben:

$$D_{xx} = \frac{\alpha_T \bar{v}_y^2 + \alpha_L \bar{v}_x^2}{\sqrt{\bar{v}_x^2 + \bar{v}_y^2}}, D_{yy} = \frac{\alpha_T \bar{v}_x^2 + \alpha_L \bar{v}_y^2}{\sqrt{\bar{v}_x^2 + \bar{v}_y^2}}, D_{xy} = D_{yx} = \frac{(\alpha_L - \alpha_T)\bar{v}_x \bar{v}_y}{\sqrt{\bar{v}_x^2 + \bar{v}_y^2}} . (5.8.)$$

Háromdimenziós esetben:

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

$$D_{zz} = \frac{\alpha_T(\overline{v}_x^2 + \overline{v}_y^2) + \alpha_L \overline{v}_z^2}{\sqrt{\overline{v}_x^2 + \overline{v}_y^2 + \overline{v}_z^2}} \qquad D_{xy} = D_{yx} = \frac{(\alpha_L - \alpha_T)\overline{v}_x \overline{v}_y}{\sqrt{\overline{v}_x^2 + \overline{v}_y^2 + \overline{v}_z^2}}. \qquad (5.9.)$$

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

Amennyiben egy vízadóban homogén az áramlási sebességtér, azaz a víz szivárgása x irányú, az (5.5.) egyenletek az alábbi formára egyszerűsödnek:

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

$$F_{z,Hidrodin.diszp.} = \frac{dM_{z3}}{dxdydt} = -D_z \frac{\partial}{\partial z}(\Theta C), \qquad (5.10.)$$

ahol $D_x = \alpha_L \overline{v}_x$, $D_y = \alpha_T \overline{v}_x$, $D_z = \alpha_T \overline{v}_x$.

A szennyezőanyag-transzport diffúzió, illetve hidrodinamikai diszperzió miatti komponenseinek számítása Fick I.törvényén alapulnak, ezért célszerű az (5.3.) és (5.5.) egyenletekben szereplő effektív diffúzió-állandót és hidrodinamikai diszperzió-állandót összevonni a szennyezőanyag szóródását meghatározó D* diszperzió-állandóba:

$$D_x^* = D_{eff} + D_x, D_y^* = D_{eff} + D_y \text{ és } D_z^* = D_{eff} + D_z. \qquad (5.11.)$$

5.1.2.4. Az adszorpció

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

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

$$\Theta \cdot dV \frac{\partial C}{\partial t} = -\rho_b \cdot dV \frac{\partial \overline{C}}{\partial t}, \qquad (5.12.)$$

ahol C a pórusfolyadék koncentrációja [M/L^3], $\overline{C}$ a szennyezőanyag koncentrációja a talajban [M/M$_{\text{száraz talaj}}$], ρ_b a porózus közeg testsűrűsége [M/L^3] és Θ a térfogatszázalékban kifejezett víztartalom [-](amely telített közegben egyenlő a hézagtérfogattal) és V a teljes vizsgált térfogat.

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

$$\overline{C} = K_d C, \qquad (5.13.)$$

ahol K_d az egyensúlyi folyamat megoszlási együtthatója.

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

$$\frac{\partial M}{\partial t dV} = \frac{\partial(\Theta C)}{\partial t} = -\rho_b K_d \frac{\partial C}{\partial t}. \qquad (5.14.)$$

Az (5.14.) egyenletben a negatív előjel azt jelzi, hogy miközben a pórusfolyadék koncentrációja emelkedik, addig a szorpciós folyamatok miatt szennyezőanyag távozik el – reverzibilisen – a rendszerből.

Az (5.13.) alapján látható, hogy a C pórusfolyadék koncentráció és $\overline{C}$ talajbeli szennyezőanyag koncentráció között összefüggés van. Az összefüggést egy függvény írja le, ami a szennyezőanyag koncentrációján kívül még a hőmérséklettől is jelentősen függ. Annak érdekében, hogy a hőmérséklet-függést kizárjuk a pórusfolyadék és az adszorptívum koncentrációja közötti összefüggést állandó hőmérsékleten veszik fel, ezért az említett függvényt *szorpciós izotermá*nak nevezik.

Ha feltételezzük, hogy az adszorbeált anyag mennyisége és a pórusfolyadék egyensúlyi koncentrációja egyenesen arányos egymással, azaz az adszorpció lineáris (*Henry-féle szorpciós izoterma*), akkor a K_d *megoszlási együttható* (amennyiben eltekintünk a hőmérséklet-változástól) *állandó*nak tekinthető.

A gyakorlatban előforduló esetek nagy részében (például nehézfémeknek az agyagásványokon való megkötődése esetén, vagy ha az oldott anyag koncentrációja nagy), ez a feltétel nem teljesül, azaz a pórusfolyadék egyensúlyi koncentrációja nem egyenesen arányos a megkötött anyagmennyiséggel, ezekben az esetekben a megkötődő anyagok mennyiségét nem-lineáris adszorpciós izotermák segítségével jellemezhetjük.

A vizsgált komponensnek a pórusfolyadékban, illetve a megkötő felületen való megoszlási viszonyát kvázi-egyensúlyi helyzetben, állandó hőmérsékleten egy előre meghatározott koncentrációintervallumban mérjük. A kapott eredmények adják a *szorpciós izoterma tapasztalati pontjai*t. Ezen pontokra adott matematikai formában felírható görbéket illesztünk, amelyek közül a gyakorlatban leggyakrabban a *Freundlich* és a *Langmuir izotermá*kat alkalmazzuk.

A *Freundlich izoterma* (33.a ábra) esetén az emelkedő koncentrációval exponenciálisan növekszik a megkötődő anyagmennyiség, azaz:

$$\overline{C} = A + K \cdot C^N, \qquad (5.15.)$$

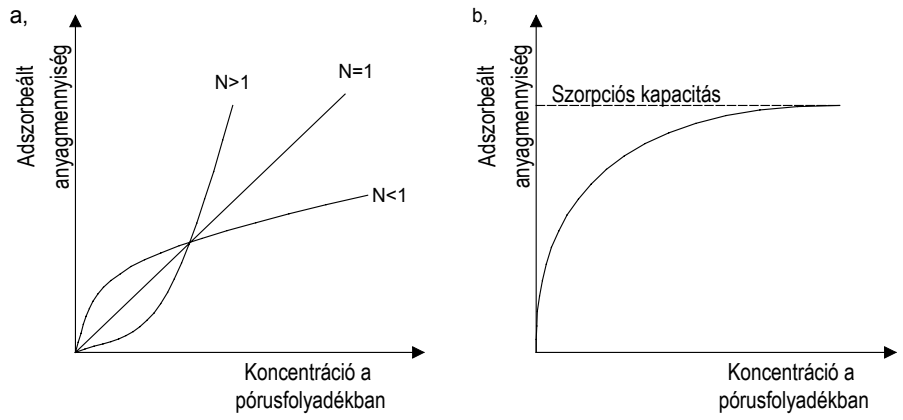
ahol K a koncentrációtól függően változó megoszlási együttható, és A és N Freundlich-állandók.

A *Langmuir izoterma* (33.b ábra) esetében arra vagyunk tekintettel, hogy a megkötő felület véges és ezen meghatározott mennyiségű szorpcióra alkalmas belépési pont található. Éppen ezért a megkötődő anyagmennyiség egy $\overline{C}_{max}$ telítési határértékhez

közelít. Ebben az esetben a megkötött anyagmennyiség hiperbolikusan közelít ehhez a telítési határértékhez a koncentráció emelkedésével:

$$\overline{C} = \overline{C}_{\max} \cdot \frac{KC}{1+KC}, \qquad (5.16.)$$

ahol K állandó.



33. ábra
A Langmuir (a) és a Freundlich (b) izoterma alakja

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

A Langmuir-izoterma inkább „üres” szorpciós helyek feltöltődése esetén alkalmazható vagy ha elhanyagoljuk a deszorbeált anyag koncentrációváltozását. Ekkor adott számú felületi megkötésre alkalmas hely létezik a rendszerben, amelyek a koncentráció növekedésével exponenciálisan fogyni kezdenek, amit jól követ a Langmuir-izoterma határértékhez közelítő jellege. A valóságban mindkét felvázolt folyamat a rendszerekben jelen van, ezért a két folyamat aránya határozza meg azt, hogy vajon melyik izoterma írja le jobban egy adott rendszer viselkedését (CZINKOTA, 1994).

A nem lineáris adszorpció esetén a számítások az (5.13.) egyenlet szerint történnek, ugyanakkor a K_d megoszlási együttható helyett az adszorpciós izotermák alapján az aktuális koncentrációértéknek megfelelően számított K_d' értéket kell időről időre változóan behelyettesíteni, amely megfelel az izoterma adott koncentráció értéknél vett deriváltjával.

Alkalmazhatjuk a korábban leírtakat egy kétfázisú rendszerre, ahol az anyagmennyiséget kívülről változtatjuk. A megoszlási együttható definíciószerűen

$$K_d = \frac{dC_{adszorbeált}}{dC_{oldott}} = \frac{dC_a}{dC_f}, \qquad (5.17.)$$

ezért az adszorbens koncentrációjának megváltozása elvileg

$$dC_a = K_d \cdot dC_f . \qquad (5.18.)$$

Tekintve egy V térrészt, amelyben nV a pórusok térfogata, így a megkötött és a pórusokban található anyagmennyiségek egyensúlya

$$V \cdot dC_a = -Vn \cdot K_d \cdot dC_f , \qquad (5.19.)$$

amennyiben az adszorbens koncentrációját a teljes térfogatra vetítjük. Feltételezve, hogy dM az a kémiai anyagmennyiség, amely egy adott idő alatt a rendszerbe jut és amelynek egy része megkötődik, egy másik része pedig folyadékfázisban marad, ezért

$$dM = V \cdot dC_a + nV \cdot dC_f . \qquad (5.20.)$$

Ebből a bevitt kémiai anyagmennyiség és a folyadékfázisra, illetve a teljes térfogatra vetített koncentrációváltozás kapcsolata:

$$dM = nVK_d^* \cdot dC_f + nV \cdot dC_f , \text{ azaz} \qquad (5.21.)$$

$$dM = nV \cdot dC_f \left(1 + K_d^*\right) \text{ és} \qquad (5.22.)$$

$$dM = V \cdot dC_a + nV \cdot \frac{dC_a}{nK_d^*} , \text{ azaz} \qquad (5.23.)$$

$$dM = V \cdot dC_a \left(1 + \frac{1}{K_d^*}\right). \qquad (5.24.)$$

Mivel általában a megoszlási együtthatót mól/kg talaj vagy mg/kg talaj adszorbeált anyagmennyiségek mellett mg/dm^3 vagy mg/m^3 pórusfolyadék koncentrációk mellett adják meg, ugyanakkor a vizsgált rendszerben nem feltétlenül 1 kg adszorbens van jelen literenként vagy köbméterenként, ezért a megoszlási együtthatókat az adott rendszerre átszámítani szükséges. Ennek alapján

$$K_d^* = K_d \frac{\rho_n}{n} \qquad (5.25.)$$

dimenziónélküli szám.

Ezeknek az egyenleteknek a felhasználása a számítások során azért előnyös, mert azt biztosítják, hogy az adszorbeált anyagmennyiség, és ezért a adszorbeált anyag koncentrációja az adszorbensben az izoterma vízszinteshez közelítő szakaszán (Langmuir-izoterma) tovább már nem nő, ugyanakkor az is biztosított, hogy maximálisan akkora kémiai anyagmennyiség adszorbeálódhat, amennyit a folyadékfázis tartalmazott. Ez a később bemutatott numerikus számítások stabilizálásánál válik fontossá.

5.1.2.5. A bomlás

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

$$\frac{dM}{dVdt} = \frac{\partial(\Theta C)}{\partial t} = -\lambda(\Theta C + \rho_b K_d C), \qquad (5.26.)$$

ahol λ a bomlási állandó.

Az (5.26.) egyenlet első tagja a folyadékfázisból, második tagja a megkötött fázisból való bomlást írja le. Tekintve, hogy az (5.26.) összefüggés, mind a pórustérben lévő, mind a felületen megkötött szennyezőanyag esetében λ intenzitású bomlást tételez fel, ez az egyenlet elsősorban a radioaktív bomlásra vonatkozóan írható fel. Biodegradáció esetén a bomlás üteme a folyadék, illetve a szilárd fázisban jelentősen eltér:

$$\frac{dM}{dVdt} = \frac{\partial(\Theta C)}{\partial t} = -\lambda_1 \Theta C - \lambda_2 \rho_b K_d C\,. \qquad (5.27.)$$

Ebben az esetben a megkötött szennyezőanyag bomlására vonatkozóan általában nem rendelkezünk ismeretekkel, csak azt feltételezhetjük, hogy intenzitása nagyságrenddel kisebb, mint folyadékfázisban. Ha $\lambda_2 << \lambda_1$, akkor a szilárd fázisban bekövetkezett bomlást a biztonság javára történő elhanyagolással figyelmen kívül hagyhatjuk:

$$\frac{dM}{dVdt} = \frac{\partial(\Theta C)}{\partial t} = -\lambda_1 \Theta C\,. \qquad (5.28.)$$

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

5.1.3. A porózus közegben mozgó konzervatív szennyezőanyagokra érvényes transzportegyenlet

A transzport-egyenletnek több formáját használják a gyakorlatban. Amennyiben valamennyi szennyeződés-terjedési folyamatot vizsgálni kívánjuk, akkor az általános transzport-egyenlet megoldására van szükség:

$$\frac{dM}{dVdt} = D_{xx}^{*}\frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial x^2} + D_{xy}^{*}\frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial x\partial y} + D_{xz}^{*}\frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial x\partial z} + D_{yx}^{*}\frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial y\partial x} + D_{yy}^{*}\frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial y^2} +$$
$$+ D_{yz}^{*}\frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial y\partial z} + D_{zx}^{*}\frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial z\partial x} + D_{yz}^{*}\frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial z\partial y} + D_{zz}^{*}\frac{\partial^2(\Theta C)}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial x}(v_x C) - \quad . \quad (5.29.)$$
$$-\frac{\partial}{\partial y}(v_y C) - \frac{\partial}{\partial z}(v_z C) - \frac{\partial}{\partial t}(\rho_b K_d C) - \lambda(\Theta C + \rho_b K_d C)$$

Amennyiben a közeg telített:

$$\frac{dM}{ndVdt} = D_{xx}^{*}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{xy}^{*}\frac{\partial^2 C}{\partial x\partial y} + D_{xz}^{*}\frac{\partial^2 C}{\partial x\partial z} + D_{yx}^{*}\frac{\partial^2 C}{\partial y\partial x} + D_{yy}^{*}\frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_{yz}^{*}\frac{\partial^2 C}{\partial y\partial z} +$$
$$+ D_{zx}^{*}\frac{\partial^2 C}{\partial z\partial x} + D_{zy}^{*}\frac{\partial^2 C}{\partial z\partial y} + D_{zz}^{*}\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{v_x C}{n}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{v_y C}{n}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{v_z C}{n}\right) - \quad . \quad (5.30.)$$
$$-\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\rho_b K_d C}{n}\right) - \lambda\left(C + \frac{\rho_b K_d C}{n}\right)$$

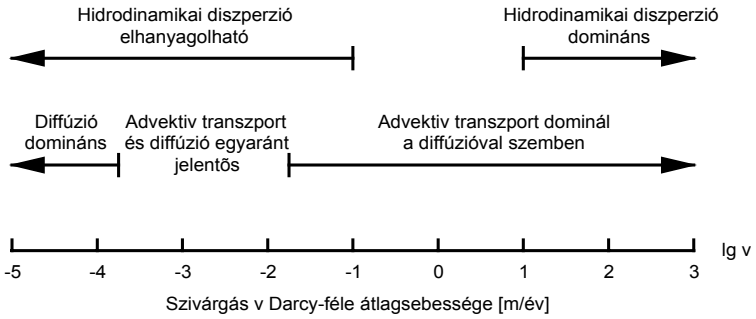
Behelyettesítve az R késleltetési tényezőt:

$$R\frac{dM}{ndVdt} = D_{xx}^{*}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{xy}^{*}\frac{\partial^2 C}{\partial x\partial y} + D_{xz}^{*}\frac{\partial^2 C}{\partial x\partial z} + D_{yx}^{*}\frac{\partial^2 C}{\partial y\partial x} + D_{yy}^{*}\frac{\partial^2 C}{\partial y^2} +$$
$$+ D_{yz}^{*}\frac{\partial^2 C}{\partial y\partial z} + D_{zx}^{*}\frac{\partial^2 C}{\partial z\partial x} + D_{zy}^{*}\frac{\partial^2 C}{\partial z\partial y} + D_{zz}^{*}\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{v_x C}{n}\right) - , \quad (5.31.)$$
$$-\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{v_y C}{n}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{v_z C}{n}\right) - \lambda RC$$

Egyes esetekben a szorpciós és bomlási folyamatok elhanyagolhatók, ilyen például egy áramló talajvízben, egy kavics-homokos kavics vízadóba telepített kút vagy kútcsoport közelében történő számítás. A homok és a kavics felületén megkötődő anyagmennyiségeket elhanyagolhatjuk és a gyorsan lejátszódó folyamatok miatt a bomlás számításától is eltekinthetünk. Ezt a helyzetet az advektív-diszperzív transzport-egyenlet írja le, amely az (5.29.-5.31) egyenletek megfelelő tagjainak elhagyásával kapható meg. Amennyiben a szivárgás iránya azonos az egyik koordináta tengellyel, akkor a transzport egyenlet további tagjai válnak zérussá, így az egyenlet tovább egyszerűsödik.

A szennyezőanyagok szóródásáról, diszperziójáról megemlítjük, hogy a szennyezőanyag diszperziója mindenképpen bekövetkezik, azonban a diszperziót okozó domináns folyamat eltérő lehet. Amennyiben a szivárgás sebessége kicsi, akkor a diffúzió a domináns folyamat, mivel a hidrodinamikai diszperzió-állandó, ekkor sebességarányosan kicsi. Amennyiben a szivárgás sebessége jelentős (áramló talajvíz esete), akkor az advektív transzport mellett a hidrodinamikai diszperzió okozza a szennyezőanyag szóródását, melyhez képest a diffúzió okozta anyagáramok elhanyagolhatóvá válnak (34. ábra).

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



34. ábra
Az advektív transzport, a diffúzió és a hidrodinamikai diszperzió okozta anyagáramok összevetése a szivárgási sebesség (szivárgási tényező) függvényében (ROWE, 1987)

5.2. A transzportegyenlet megoldási módjai

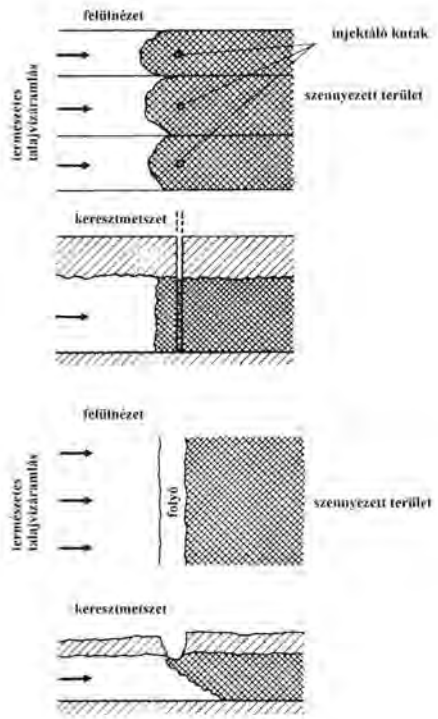
A fejezetben megismert transzportegyenletnek a szivárgás alapegyenletéhez hasonlóan számos megoldási módja ismeretes. Ezek közül a legismertebb analitikus megoldásokat, a numerikus megoldások közül a véges differencia és végeselem módszeren alapulókat és a részecskeszemléletű megoldásokat mutatjuk be.

5.2.1. Analitikus megoldások

Egyszerű esetekre a transzportegyenlet analitikusan is megoldható. Ezek a megoldások adják egy-egy probléma felmerülésekor a legfontosabb első becsléseket és egyben az analitikus megoldásokkal való összevetéssel szokás egy újonnan kifejlesztett számítási algoritmusokat is ellenőrizni is. Mivel a korábban felírt transzport-egyenletnek - az analitikus megoldásokon túlmenően - csak közelítő megoldásai ismertesek, ezért tartjuk szükségesnek az alapegyenletek analitikus úton - különböző kezdeti és peremfeltételek mellett - történő megoldásának részletes tárgyalását. Az analitikus megoldások eredményeként kapott, egyszerű formulák lehetőséget biztosítanak egyszerű függvényvizsgálaton alapuló hibaanalízis végrehajtására is, amelynek segítségével a transzport-folyamatokat leíró paramétereknek a számított koncentráció nagyságára vonatkozó hatása becsülhető.

5.2.1.1. Egydimenziós megoldások

Az egydimenziós analitikus megoldások a gyakorlatban elsősorban állandó áramlási sebesség mellett, a sebességvektor irányára merőlegesen elhelyezett kutak esetén, vagy pl. egy folyóból történő elszivárgás számítására alkalmazhatók (35. ábra)



35. ábra
A transzport-egyenlet egydimenziós analitikus megoldásainak alkalmazási területei (SAUTY, 1980)

Tekintsük az **(5.31.)** egyenlet alábbi egydimenziós formáját, ahol a víztartó vastagsága m, infinitezimálisan kicsiny szélessége w, a koncentráció-gradiens y és z irányban zérus:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\alpha_L \bar{v}_x}{R}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{\bar{v}_x}{R}\frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C. \qquad (5.32.)$$

Legyen a pillanatnyi szennyezés tömege M az x=0 helyen t=0 időpontban. Ezt a kezdeti feltételt a Dirac-delta függvénnyel lehet leírni:

$$C_\delta(x,0) = \frac{M}{n_0 m w R}\delta(x), \qquad (5.33.)$$

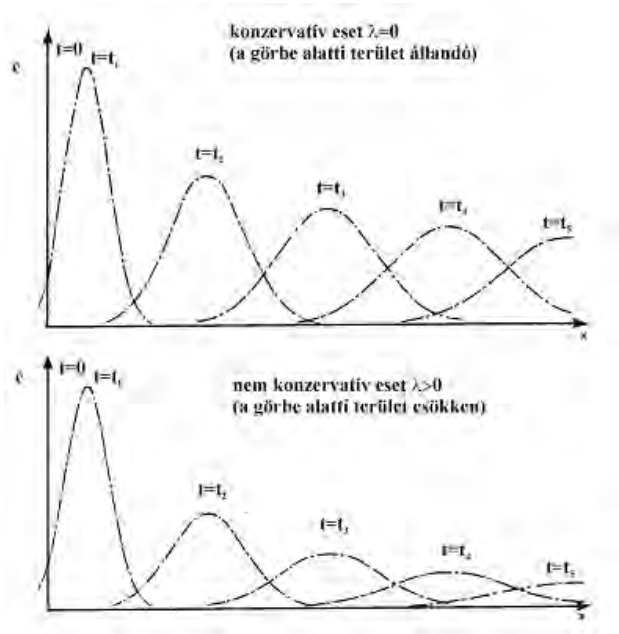
ahol a Dirac-delta függvény:

$$\delta(x) = 0, \quad \textbf{ha} \quad \mathbf{x \neq 0} \quad \textbf{és} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\mathbf{x})\mathbf{dx} = \mathbf{1}\ , \quad \textbf{ha} \quad \mathbf{x = 0.} \tag{5.34.}$$

Másfelől legyen $C(\pm\infty, t) = 0$. Ebben az esetben a megoldás a jól ismert Gauss-görbe:

$$C(x,t) = \frac{M}{2wmn_0 R\sqrt{\dfrac{\pi\alpha_L \bar{v}_x t}{R}}} \exp\left(-\frac{\left(x - \dfrac{\bar{v}_x t}{R}\right)^2}{\dfrac{4\alpha_L \bar{v}_x t}{R}}\right) \exp(-\lambda t). \tag{5.35.}$$

Ez a haranggörbe $\bar{v}_x / R$ sebességgel mozog az időben az x tengely pozitív irányában, a szórása $\sqrt{2\alpha_L \bar{v}_x t / R}$. A függvény amplitúdója az időben csökken (36. ábra).



36. ábra
Pillanatnyi szennyeződés terjedésének időbeli lefolyása bomlás nélkül és bomlással

Ismerve a koncentráció időbeli alakulását egy pillanatnyi szennyezésre, bármilyen időbeli lefutású szennyezés esetére függvények konvolúciójával a koncentráció-idő függvény meghatározható, mivel a transzportegyenlet lineáris és a peremfeltétel homogén.

Tekintve egy változó aktivitású forrást az x=0 helyen és az időben $\dot{M}(t) = \dfrac{dM}{dt}$ formában változó tömegáramot, a megoldás:

$$C(x,t)=\int_0^t \lim_{\Delta\tau\to 0}\frac{C_\delta(x,t-\tau)}{\Delta\tau}d\tau=$$

$$=\int_0^t \frac{\dot{M}(\tau)}{2wmn_0R\sqrt{\frac{\pi\alpha_L\bar{v}_x(t-\tau)}{R}}}\exp\left(-\frac{\left(x-\frac{\bar{v}_x(t-\tau)}{R}\right)^2}{\frac{4\alpha_L\bar{v}_x(t-\tau)}{R}}\right)\exp(-\lambda(t-\tau))d\tau. \qquad (5.36.)$$

Amennyiben a szennyezőanyag terhelés megoszló és az értéke egységnyi hosszra vetítve μ(x,t), a koncentrációt a t időpontban így számíthatjuk:

$$C(x,t)=$$

$$=\int_{\xi=-\infty}^{\infty}\int_{\tau=0}^{t} \frac{\mu(\xi,t)}{2wmn_0R\sqrt{\frac{\pi\alpha_L\bar{v}_x(t-\tau)}{R}}}\exp\left(-\frac{\left(x-\xi-\frac{\bar{v}_x(t-\tau)}{R}\right)^2}{\frac{4\alpha_L\bar{v}_x(t-\tau)}{R}}\right)\exp(-\lambda(t-\tau))d\tau d\xi. \qquad (5.37.)$$

Ez az egyenlet az egyszerű (idealizált) lefolyású szennyezési esetekre analitikusan megoldható. Amennyiben a forrás az x=0 pontban található, $\dot{M}=\text{állandó}$, valamint a szennyezés kezdeti időpontja t=0, ekkor a megoldás:

$$C(x,t)=\frac{C_0}{2}\exp\left(\frac{x}{2\alpha_L}\right)\left(\exp\left(\frac{-\gamma x}{2\alpha_L}\right)erfc\left(\frac{\frac{x-\bar{v}_xt\gamma}{R}}{2\sqrt{\frac{\alpha_L\bar{v}_xt}{R}}}\right)-\exp\left(\frac{\gamma x}{2\alpha_L}\right)erfc\left(\frac{\frac{x+\bar{v}_xt\gamma}{R}}{2\sqrt{\frac{\alpha_L\bar{v}_xt}{R}}}\right)\right), \qquad (5.38.)$$

ahol $C_0=\frac{\dot{M}}{wmn_0\bar{v}_x}$, $\gamma=\sqrt{1+\frac{4\lambda\alpha_L R}{\bar{v}_x}}$, és ahol $erf(x)=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x \exp(-\xi^2)d\xi$, illetve $erfc(\xi)=1-erf(\xi)$ a standard hibafüggvény és annak komplementere.

Egydimenziós transzport-folyamatokkal írhatók le a laboratóriumi oszlopkísérletek is. Ebben az esetben az egyenletet kissé eltérő peremfeltételek mellett oldjuk meg:

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

A megoldást OGATA (1970), OGATA és BANKS (1961), valamint GUPTA és PANDEY (1980) adta meg egymástól alig eltérő formában:

$$C(x,t)=\frac{C_0}{2}\exp\left(\frac{x}{2\alpha_L}\right)\left(\exp\left(\frac{-\gamma x}{2\alpha_L}\right)erfc\left(\frac{\frac{x-\bar{v}_xt\gamma}{R}}{2\sqrt{\frac{\alpha_L\bar{v}_xt}{R}}}\right)+\exp\left(\frac{\gamma x}{2\alpha_L}\right)erfc\left(\frac{\frac{x+\bar{v}_xt\gamma}{R}}{2\sqrt{\frac{\alpha_L\bar{v}_xt}{R}}}\right)\right), \qquad (5.39.)$$

ahol C_0 az influens koncentráció és $\gamma = \sqrt{1 + \frac{4\lambda\alpha_L R}{\bar{v}_x}}$. Nagy Peclet- számok esetén, amikor $Pe = \frac{x}{\alpha_L} = \frac{x}{D_x \cdot \bar{v}_x} > 10$ mindkét bemutatott eset jól közelíthető az alábbi formulával:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2}\exp\left(\frac{x}{2\alpha_L}(1-\gamma)\right) erfc\left(\frac{\frac{x - \bar{v}_x t\gamma}{R}}{2\sqrt{\frac{\alpha_L \bar{v}_x t}{R}}}\right). \qquad (5.40.)$$

Amennyiben a nem bomló szennyezőanyag az áramlási közeg felületén nem adszorbeálódik (R=1 és λ=0), az (5.40.) összefüggés tovább egyszerűsödik:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} erfc\left(\frac{x - \bar{v}_x t}{2\sqrt{\alpha_L \bar{v}_x t}}\right). \qquad (5.41.)$$

Az (5.41.) egyenlet az alapja a diszperzió-állandó laboratóriumi meghatározásának. Az egyenletből levezethető, hogy amennyiben a relatív koncentráció C/C_0=0.5, azaz ahol az áttörési görbének inflexiós pontja van, ott a koncentráció-gradiensre vonatkozóan igaz, hogy

$$\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_{x=\bar{v}_x t} = \frac{C_0}{2\sqrt{\pi\alpha_L x}}. \qquad (5.42.)$$

A kísérlet során a koncentrációt egy adott pontban az idő függvényében mérjük és meghatározzuk a koncentráció-profil meredekségét. Tekintettel arra, hogy a transzport-folyamat egydimenziós, ezért minden t időponthoz egy $x = \bar{v}_x \cdot t$ hely tartozik és ennek alapján két közeli t_i időpont felhasználásával a $\Delta C/\Delta x$ koncentráció-gradiens is meghatározható. Amikor a C mért koncentráció éppen $C_0/2$, akkor az (5.42.) egyenlet alapján a longitudinális diszperzivitás számíthatóvá válik.

Az OGATA féle oszlopkísérlet megoldásából indult ki SHACKELFORD (1990), amikor a szigetelőrétegen való átjutáshoz szükséges idők számítására alkalmas megoldást fejlesztett ki. A megoldás alapja az (5.43.) egyenlet, amelyik az (5.39.) egyenletből származtatható:

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2}\left[erfc\left(\frac{1 - T_R}{2\sqrt{T_R / P_L}}\right) + \exp(P_L) \cdot erfc\left(\frac{1 + T_R}{2\sqrt{T_R / P_L}}\right)\right], \qquad (5.43.)$$

ahol $T_R = Co_R = \frac{\bar{v}_x \cdot t}{R \cdot x}$ Courant-szám és a $P_L = Pe_L = \frac{\bar{v}_x \cdot x}{D_x^*}$ Peclet-szám. Amennyiben nagyon kicsi a szivárgás sebessége, akkor $D_x^* = D_{eff} + \bar{v}_x \cdot \alpha_L$, ha azonban a diszperzív transzportfolyamatok közül a hidrodinamikai diszperzió dominál a diffú-

zióhoz képest, akkor $D_{eff} << \bar{v}_x \cdot \alpha_L$, ezért $D_x^* \cong \bar{v}_x \cdot \alpha_L$ diszperzió-állandó használható.

A megoldás során a kérdés, hogy konstans C_0 koncentrációjú influens oldat esetén egy adott x távolságban mekkora t idő elteltével válik a koncentráció értéke C értékűvé. A feladat tehát inverz: nem a koncentrációt keressük a hely és az idő függvényében C=C(x,t), hanem a t időpontot egy adott x helyen a bemenő és a kialakuló koncentráció függvényében $t=t(C,C_0)$.

A keresett t időpontot csak a T_R Courant-szám ismeretében kaphatjuk meg, ez ugyanakkor zárt alakban az (5.43.) egyenletből nem kapható meg. A számításokhoz egy nomogramot használunk fel, amelyik az adott Peclet-számok esetére a Courant-szám és a C/C_0 relatív koncentráció közötti összefüggést ábrázolja (

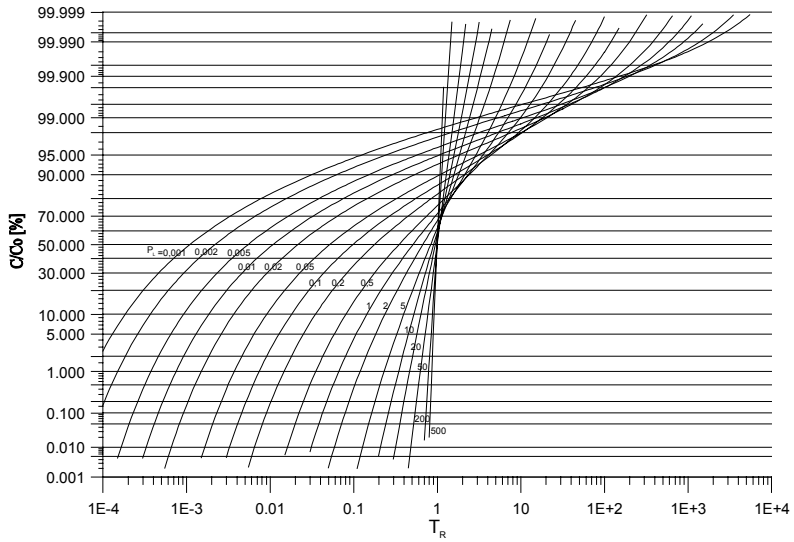
37. **ábra**).

A megoldás során az adott x távolságra meghatározzuk a Peclet-számot, majd ennek ismeretében és az elérendő koncentrációhoz tartozó C/C_0 relatív koncentráció függvényében a

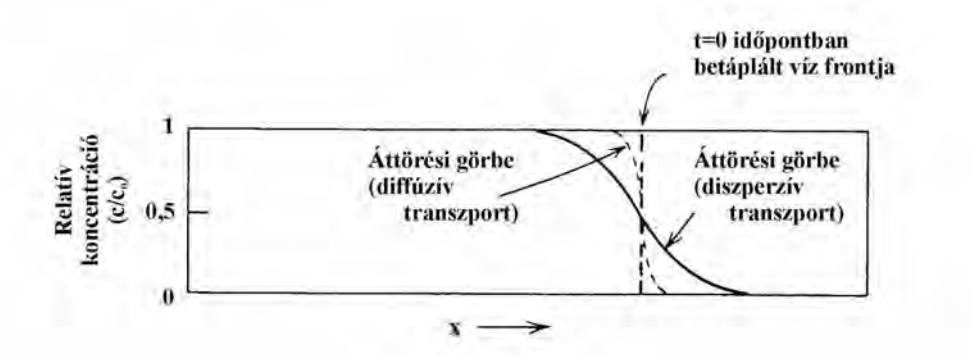
37. **ábra** segítségével meghatározzuk a Courant számot, amiből a t idő az (5.43.) egyenlet alapján számítható.

Egy másik ismert megoldás, ami az (5.39.) egyenletből is levezethető, a pusztán diffúzió esete. Ekkor a szivárgás pórusbeli $\bar{v}_x$ sebessége zérus, így sem advektív transzport sem hidrodinamikai diszperzió nem léphet fel. Ebben az esetben a megoldás:

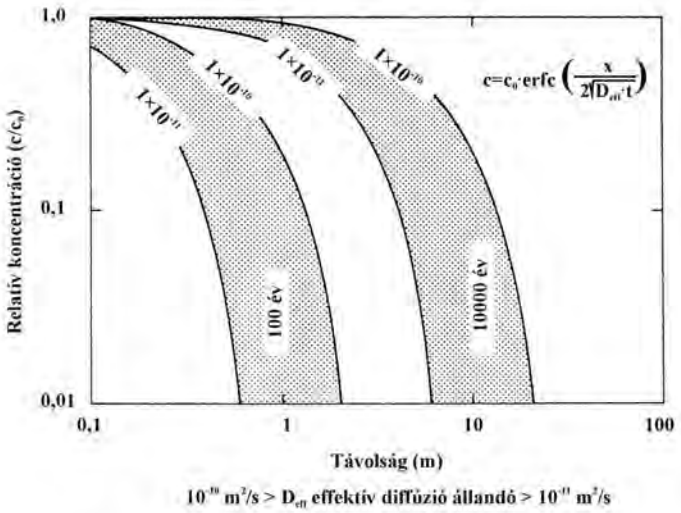
$$C = C_0 \, erfc \frac{x}{2\sqrt{\frac{D_x^* t}{R}}} = C_0 \, erfc \frac{x}{2\sqrt{\frac{D_{eff} t}{R}}}. \qquad (5.44.)$$



37. ábra
Összefüggés a Courant-szám és a C/C_0 relatív koncentráció között
(SHACKELFORD, 1990)



38. ábra
Az advektív, advektív-diffuzív és az advektív-dizperzív transzport áttörési görbéinek összehasonlítása
(FREEZE – CHERRY, 1979)



39. ábra
A diffúzív transzport áttörési görbéi 10^{-10} és 10^{-11} m^2/s
effektív diffúzió-állandó esetén
(FREEZE – CHERRY, 1979)

5.2.1.2. Kétdimenziós megoldások

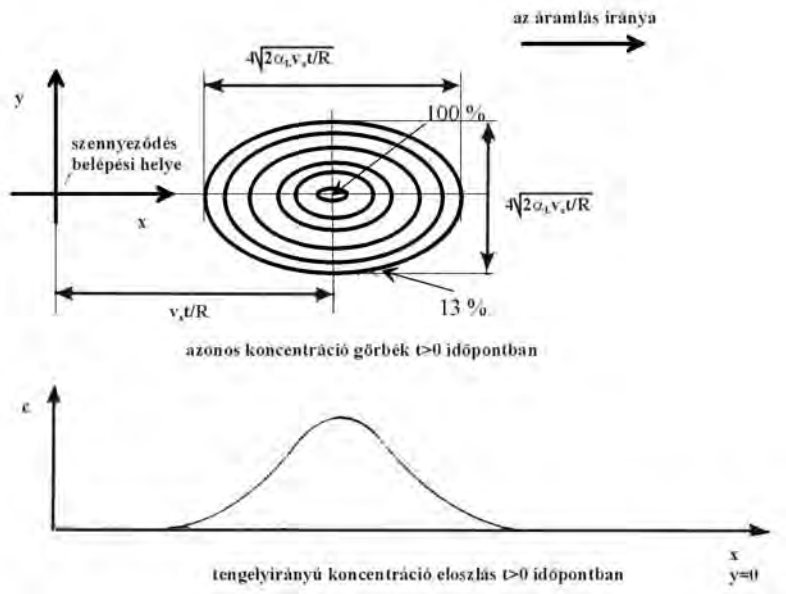
Legyen az áramlás iránya párhuzamos az x tengellyel. Ebben az idealizált esetben az (5.31.) egyenlet a következő formában írható fel:

$$\frac{\partial C}{\partial t}=\frac{\alpha_L \bar{v}_x}{R}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+\frac{\alpha_T \bar{v}_x}{R}\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}-\frac{\bar{v}_x}{R}\frac{\partial C}{\partial x}-\lambda C\,. \qquad (5.45.)$$

Legyen a pillanatnyi M tömegű szennyezés ismét az x=0 és y=0 helyen t=0 időpontban. A kezdeti feltétel:

$C(x,y,0)=\frac{M}{n_0 mR}\delta(x)\delta(y)$, ahol δ(x) és δ(y) - a korábbiakhoz hasonlóan - a Dirac-delta függvény, másfelől legyen $C(\pm\infty,\pm\infty,t)=0$. Ebben az esetben a megoldás (CSANÁDY, 1973):

$$C_\delta(x,y,t)=\frac{M}{4\pi m n_0 \bar{v}_x t\sqrt{\alpha_L \alpha_T}}\exp\left(-\frac{\left(x-\frac{\bar{v}_x t}{R}\right)^2}{\frac{4\alpha_L \bar{v}_x t}{R}}-\frac{y^2}{\frac{4\alpha_T \bar{v}_x t}{R}}\right)\exp(-\lambda t)\,. \qquad (5.46.)$$



40. ábra
Pillanatnyi szennyezőforrás okozta koncentráció-eloszlás

Ez az egyenlet az alapja a nyomjelzéses vizsgálatokat követő számításoknak két megfigyelő kút esetén.
A korábbiakhoz hasonlóan, ismerve a koncentráció időbeli alakulását egy pillanatnyi szennyezésre, bármilyen időbeli lefutású szennyezés esetére integrál-számítással a koncentráció-idő függvény meghatározható. Tekintve egy változó aktivitású forrást

az x=0 és y=0 helyen és az időben változó tömegáramot $\dot{M}(t)=\frac{dM}{dt}$ formában, a megoldás:

$$C(x,y,t)=\int_0^t \lim_{\Delta t\to 0}\frac{C(x,y,t-\tau)}{\Delta t}d\tau=$$

$$=\frac{\dot{M}(t)}{4\pi m n_0\sqrt{\alpha_L\alpha_T}}\int_0^t \frac{1}{t-\tau}\exp\left(-\frac{\left(x-\frac{\bar{v}_x(t-\tau)}{R}\right)^2}{\frac{4\alpha_L\bar{v}_x(t-\tau)}{R}}-\frac{y^2}{\frac{4\alpha_T\bar{v}_x(t-\tau)}{R}}\right)\exp(-\lambda(t-\tau))d\tau= \tag{5.47.}$$

$$=\frac{\dot{M}(t)}{4\pi m n_0\sqrt{\alpha_L\alpha_T}}\int_0^{\frac{4\alpha_L\bar{v}_x t}{Rr^2}}\frac{1}{\zeta}\exp\left(\frac{1}{\zeta}-\frac{\zeta}{4}\left(\frac{r}{2\alpha_L}\right)^2\left(1+\frac{4\lambda\alpha_L R}{v_x}\right)\right)d\zeta,$$

ahol $r^2=x^2+\frac{\alpha_L}{\alpha_T}y^2$. Az integrál megoldása a Hantush-függvényhez vezet, amelyet csak numerikusan lehet megoldani, de jó analitikus közelítő megoldása is ismert:

$$C(x,y,t)=\frac{\overline{C}_0}{4\sqrt{\pi\alpha_T}}\exp\left(\frac{x-r\gamma}{2\alpha_L}\right)\frac{1}{\sqrt{r\gamma}}erfc\left(\frac{r-\frac{\bar{v}_x t\gamma}{R}}{2\sqrt{\frac{\alpha_L\bar{v}_x t}{R}}}\right), \tag{5.48.}$$

ahol $\overline{C}_0=\frac{\dot{M}}{n_0 m\bar{v}_x}$ és $\gamma=\sqrt{1+\frac{4\alpha_L\lambda R}{\bar{v}_x}}$.

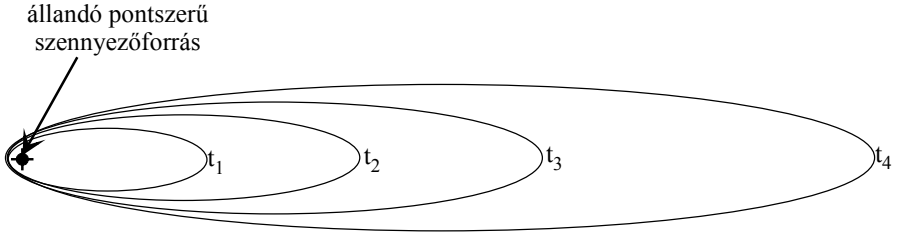
A közelítő megoldás pontossága $\frac{r}{2\alpha_L}>1$, akkor kb.10%, de ha , akkor 1%. Az (5.48.) egyenlettel számítható koncentráció eloszlás alakját a 41. ábra mutatja be.

5.2.2. Numerikus megoldások

5.2.2.1. Véges differencia módszer

A véges differencia módszer alkalmazása során a hidrodinamikai alkalmazásnál látottakhoz hasonlóan, *a modellezett teret tetszőleges számú, egymással érintkező téglatest alakú elemekre bontjuk*, egyenletes vagy változó osztású rácsháló segítségével. Mivel a hidrodinamikai modellezésnél kapott eredmények a transzportmodell bemeneti adatai, ezért *célszerű mind a hidrodinamikai, mind a transzportmodellezéshez azonos rácshálót használni*. Ezután a transzport-egyenletnek a differenciaegyenletté alakított formája alapján a *meghatározzuk az egyes hasábelemek és az azokkal közvetlenül érintkező elemek közötti advektív és diszperzív szennyezőanyag fluxusokat, az adszorbeált és az esetlegesen kémiai vagy radioaktív bomlás útján degradálódott szennyezőanyag mennyiségeket. Figyelembe véve a szennyezőanyag-nyelők és forrá-*

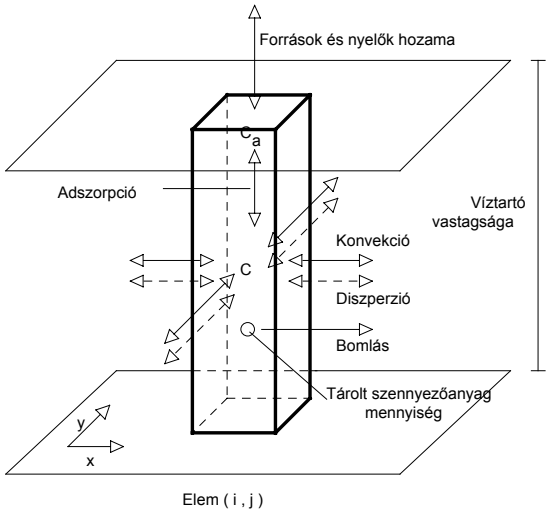
sok hatását, valamint alkalmazva a kezdeti és peremfeltételeket, felírjuk az egyes elemek szennyezőanyag-mérlegét egy a kezdeti t_0 időpontra és az azt követő Δt időpontra. Ezt követően az egyes elemek anyagmérlege alapján felállítjuk a modellezett tér szennyezőanyag forgalmát - az adott időlépcsőben - leíró lineáris egyenletrendszert, amit a korábban vázlatosan bemutatott matematikai eljárásokkal megoldunk. Eredményként az egyes elemekre vonatkozó koncentráció-értékeket kapunk. Nem permanens esetben az utóbbi lépéseket tetszőleges számú időlépcsőre megismételjük.



41. ábra
Állandó forrás okozta szennyezőanyag-eloszlás időbeli változása

5.2.2.1.1. A szennyezőanyag-mérleg elemei

Az egyszerűség kedvéért tekintsünk egy síkmodellt, amelyben a rácsháló osztása x és y irányban is egyenletes, Δx, illetve Δy. Legyenek a rácsháló elemeinek koordinátái x irányban 1,2,..., i-1,i,i+1,...n, míg y irányban 1,2,...,j-1,j,j+1,...n. így egy általános helyzetű elemre a koncentráció értéke $C_{i,j}$, az elem magassága $m_{i,j}$ és így tovább (42. ábra).



42. ábra
Szennyezőanyag-mérleg elemei egy kiválasztott elemi hasáb környezetében

Ha a pórusokban az áramlási sebesség komponensei ($\bar{v}_x, \bar{v}_y$), akkor az oldott szennyezőanyagokat tartalmazó víztömeg áramlása következtében az egyes elemekbe beilletve kilépő advektív szennyezőanyag hozamokat az alábbi egyenlet írja le:

$$\begin{aligned} J_k = \{ & \bar{v}_{x,i-1,j} \cdot \left[\alpha \cdot C_{i-1,j} + (1-\alpha) \cdot C_{i,j}\right] \Delta y \cdot \left(m_{i-1,j} + m_{i,j}\right) - \\ & - \bar{v}_{x,i,j} \cdot \left[\beta \cdot C_{i,j} + (1-\beta) \cdot C_{i+1,j}\right] \Delta y \cdot \left(m_{i,j} + m_{i+1,j}\right) + \\ & + \bar{v}_{y,i,j-1} \cdot \left[\gamma \cdot C_{i,j-1} + (1-\gamma) \cdot C_{i,j}\right] \Delta x \cdot \left(m_{i,j-1} + m_{i,j}\right) - \\ & - \bar{v}_{y,i,j} \cdot \left[\delta \cdot C_{i,j} + (1-\delta) \cdot C_{i,j+1}\right] \Delta x \cdot \left(m_{i,j} + m_{i,j+1}\right) \} / 2n_0 \end{aligned} , \qquad (5.49.)$$

ahol $C_{i,j}$ a koncentráció az i,j hasábban és n_0 a szabad hézagtérfogat.

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

- központi differenciák alkalmazása esetén: $\alpha = \beta = \gamma = \delta = 0{,}5$. (5.50.)
- előrelépéses differenciák esetén:
  $\alpha = \left[1 + \mathbf{sgn}\left(v_{x,i-1,j}\right)\right]/2$, $\beta = \left[1 + \mathbf{sgn}\left(v_{x,i,j}\right)\right]/2$,
  $\gamma = \left[1 + \mathbf{sgn}\left(v_{y,i,j-1}\right)\right]/2$ és $\delta = \left[1 + \mathbf{sgn}\left(v_{y,i,j}\right)\right]/2$. (5.51.)
- hátralépéses differenciák esetén:
  $\alpha = \left[1 - \mathbf{sgn}\left(v_{x,i-1,j}\right)\right]/2$, $\beta = \left[1 - \mathbf{sgn}\left(v_{x,i,j}\right)\right]/2$,
  $\gamma = \left[1 - \mathbf{sgn}\left(v_{y,i,j-1}\right)\right]/2$, $\delta = \left[1 - \mathbf{sgn}\left(v_{y,i,j}\right)\right]/2$. (5.52.)

A három differenciaképzési eljárás közül, amennyiben az advektív transzport domináns az előrelépéses, amennyiben a diszperzív transzport a jellemző, a központi differenciákat felhasználó algoritmust javasolja KINZELBACH (1986) használni.

A szennyezőanyag hidrodinamikai diszperziója, illetve a molekuláris diffúzió következtében a kiválasztott hasábelem és a környezetében lévő elemek között áramló szennyezőanyag fluxus párhuzamos és diagonális diszperzív fluxusokból tevődik össze (43. ábra). Amennyiben az áramlás iránya megegyezik valamelyik (pl. x) tengellyel, akkor a diszperzív szennyezőanyag áramlásnak csak az elem falára merőleges illetve azzal párhuzamos (tehát a másik két oldalára merőleges) komponense van (párhuzamos fluxusok):

$$\begin{aligned} J_d^{(1)} = & \left(D_{eff} + D_{xx,i-1,j}\right) \cdot \left(C_{i-1,j} - C_{i,j}\right) \left(\frac{\Delta y}{\Delta x}\right) \cdot \left(m_{i-1,j} + m_{i,j}\right) \frac{n_0}{2} - \\ & - \left(D_{eff} + D_{xx,i,j}\right) \cdot \left(C_{i,j} - C_{i+1,j}\right) \left(\frac{\Delta y}{\Delta x}\right) \cdot \left(m_{i,j} + m_{i+1,j}\right) \frac{n_0}{2} + \\ & + \left(D_{eff} + D_{yy,i,j-1}\right) \cdot \left(C_{i,j-1} - C_{i,j}\right) \left(\frac{\Delta y}{\Delta x}\right) \left(m_{i,j-1} + m_{i,j}\right) \frac{n_0}{2} - \\ & - \left(D_{eff} + D_{yy,i,j}\right) \left(C_{i,j} - C_{i,j+1}\right) \left(\frac{\Delta y}{\Delta x}\right) \left(m_{i,j} + m_{i,j+1}\right) \frac{n_0}{2} \end{aligned} . \qquad (5.53.)$$

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

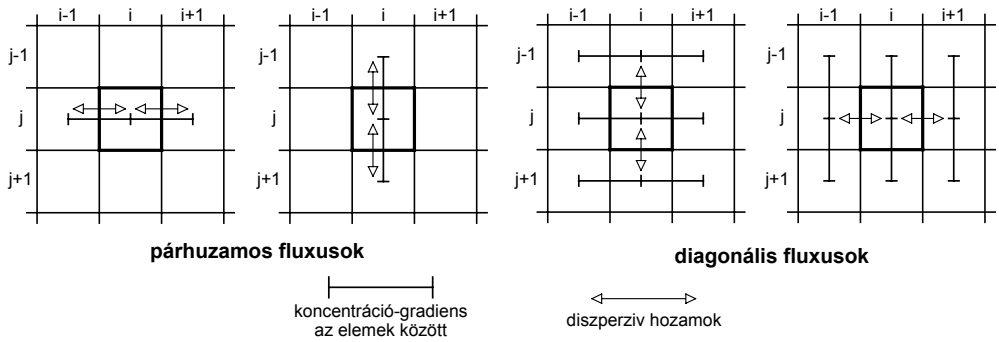
- Diagonális diszperzív hozam x irányból:

$$J_d^{(2x)} = \left(D_{eff} + D_{xy,i,j}\right)\left(C_{i,j+1} - C_{i,j-1} + C_{i+1,j+1} - C_{i+1,j-1}\right)\cdot\left(m_{i,j} + m_{i+1,j}\right)\frac{n_0}{8} - \\ -\left(D_{eff} + D_{xy,i-1,j}\right)\left(C_{i-1,j+1} - C_{i-1,j-1} + C_{i,j+1} - C_{i,j-1}\right)\cdot\left(m_{i-1,j} + m_{i,j}\right)\frac{n_0}{8} \qquad (5.54.)$$

- Diagonális diszperzív hozam y irányból:

$$J_d^{(2y)} = \left(D_{eff} + D_{yx,i,j}\right)\left(C_{i+1,j} - C_{i-1,j} + C_{i+1,j+1} - C_{i-1,j+1}\right)\cdot\left(m_{i,j} + m_{i,j+1}\right)\frac{n_0}{8} - \\ -\left(D_{eff} + D_{yx,i,j-1}\right)\left(C_{i+1,j-1} - C_{i-1,j-1} + C_{i+1,j} - C_{i-1,j}\right)\cdot\left(m_{i,j-1} + m_{i,j}\right)\frac{n_0}{8} \qquad (5.55.)$$

ahol D_{xx}, D_{yy}, D_{xy} és D_{yx} a diszperzió-állandó tenzor elemei, amelyeket az (5.9.) összefüggések segítségével számíthatunk.



43. ábra
A párhuzamos és diagonális diszperzív hozamok értelmezése

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

Az egyes elemek szennyezőanyag mérlegét az elemen belüli *szennyezőanyag források és nyelők* (pl. termelő kutak) hozamai módosíthatják, amelyeknek két alapvető típusa van: *a koncentrált és a területi források*.

A vízkitermeléshez illetve vízbetápláláshoz kötött koncentrált források és nyelők fluxusa

$$J_q^{(1)} = q_{i,j} \cdot \Delta x \Delta y \cdot C_{kut,i.j}\,, \qquad (5.56.)$$

ahol $C_{kut,i,j}$ a kúttal kitermelt vagy a kútba injektált víz koncentrációja, $q_{i,j}$ a betáplálás/kivétel hozama az elem egységnyi felületére vetítve. A területen megoszló - ú.n. belső - szennyezőanyag források (pl. depóniák) esetében a fluxus

$$J_q^{(2)} = S_{belsö,i,j} \cdot \Delta x \Delta y \,, \qquad (5.57.)$$

ahol $S_{belső,i,j}$ [mg/s/m^2] a belső forrás (depónia) aktivitásának az értéke a hasábelem egységnyi területére vonatkoztatva.

A szennyezőanyagok egy része biológiai, kémiai vagy radioaktív úton lebomlik. A degradáció során a rendszerből távozó anyagmennyiség fluxusa

$$J_{\mathbf{deg}r} = -\lambda \cdot n_0 \cdot \Delta x \Delta y \cdot m_{i,j} \cdot C_{i.j} \,, \qquad (5.58.)$$

ahol λ a bomlási együttható, $C_{i,j}$ a koncentráció az elemben az időlépcső kezdetén.

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

A korábban felsorolt szennyezőanyag-hozamok hatására az adott időlépcső alatt a vizsgált elemben a koncentráció, tehát a tárolt szennyezőanyagok

$$M_t = n_0 \cdot \Delta x \Delta y \cdot m_{i,j} \left[C_{i,j}(t + \Delta t) - C_{i,j}(t) \right] \qquad (5.59.)$$

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

$$\frac{J_k + J_d + J_q^{(1)} + J_q^{(2)} + J_{\mathbf{deg}r}}{R} \cdot \Delta t = M_t \,. \qquad (5.60.)$$

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

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

5.2.2.1.2. A kezdeti és peremfeltételek megadása

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

Ahhoz, hogy az első időlépcső során a szennyezőanyag hozamok meghatározhatók legyenek, kezdeti feltételként a t_0 időponthoz tartozó koncentráció-értékeket hasz-

náljuk fel. Ezek után már minden $t_i=t_{i-1}+\Delta t$ időlépcsőre felírható az egyenletrendszer, ahol i az időlépcső sorszáma.

A modellezett térrész határain a szennyezőanyag-mérleg hiányzó elemeinek pótlásra, vagy ezen összetevők számításának lehetővé tételére Dirichlet-típusú vagy Neumann-típusú peremfeltételeket alkalmazhatunk. *Dirichlet-típusú peremfeltétel* esetén az adott szélső hasábelemben (függetlenül az elem szennyezőanyag-mérlegének alakulásától) a koncentrációt időlépcsőről időlépcsőre állandónak vagy egy szabály szerint változónak tekintjük. Leggyakrabban a szennyezőforrástól megfelelően távol lévő határelemekben alkalmazzuk, oly módon, hogy az állandó koncentráció értékét zérusnak, vagy a háttérterhelésnek megfelelő értékűnek választjuk. *Neumann-típusú határ* esetén a beáramló szennyezőanyag-fluxus értékét tekintjük állandónak, azaz a peremi helyzetű elembe a modellezett téren kívülről beáramló szennyezőanyag advektív és diszperzív fluxusait, egy adott, meghatározott értékű fluxussal helyettesítjük. Speciális esete, amikor a beáramló szennyezőanyag-hozam zérus.

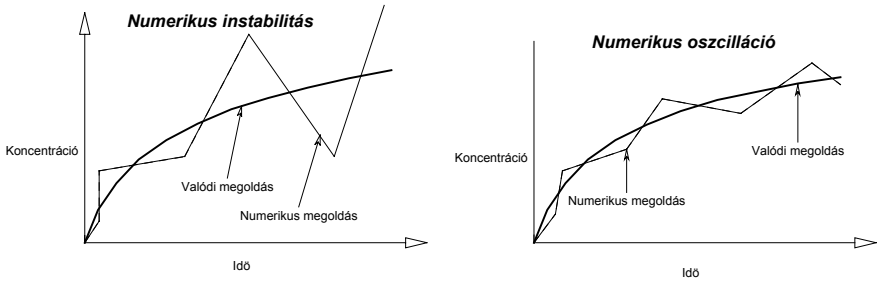
5.2.2.2. A transzport egyenlet numerikus megoldásainak hibái

Ugyanúgy, mint a szivárgás alapegyenletének megoldásakor, a transzport-egyenlet numerikus megoldásakor is felléphetnek hibák. A megoldás közelítő voltát a továbbiakban sem tekintjük a megoldás hibájának.

5.2.2.2.1. A megoldás instabilitása

Mivel az időbeli folyamatok követésére mind a végeselem, mind a véges differencia módszer véges differenciákat használ, éppúgy, mint ahogy azt a szivárgási alapegyenlet megoldásánál láttuk, ezért a numerikus hibák is azonosak.

A *megoldás instabilitásán* azt értjük, hogy a közelítő megoldás a valódi megoldáshoz nem konvergál (44. ábra). Az instabilitás jelensége elsősorban explicit megoldási módok esetén jelentkezik, azonban az elemszám növekedésével, elsősorban háromdimenziós numerikus modellek és/vagy implicit megoldó rutinok használata esetén is előfordul. Az instabilitás egyik speciális esete a *numerikus oszcilláció*, amikor a számítások eredményei nem képesek a hibahatáron belül közelíteni a valós megoldást. A stabilitás biztosítása érdekében a Courant, a Neumann és a forrás-nyelő stabilitási kritériumoknak kell teljesülniük.



44. ábra
A numerikus instabilitás és a numerikus oszcilláció jelensége
a transzportmodellezésnél

A *Courant kritérium* azt fejezi ki, hogy advektív úton az adott Δt időlépcső alatt nem léphet ki több szennyezőanyag az elemből, mint amennyi az időlépcső kezdetén az elemben tárolt anyagmennyiség. Ennek a feltételnek a modellezett tér minden elemére, minden időlépcső során teljesülnie kell. A Courant kritériumot az (5.61.) egyenlet írja le, azonban előrelépéses differenciák alkalmazása esetén a $Co_x + Co_y \leq 1$ feltételnek is teljesülnie kell, ahol Co az úgynevezett *Courant-szám*, v_x és v_y a Darcy-féle áramlási sebességvektor komponensei, Δx és Δy a vizsgált elem hossza, illetve szélessége.

$$Co_x = \left|\frac{\Delta t \cdot v_x}{\Delta x}\right| \leq 1,\ Co_y = \left|\frac{\Delta t \cdot v_y}{\Delta y}\right| \leq 1. \qquad (5.61.)$$

Háromdimenziós modellek esetén a Courant kritérium a

$$Co = \left|\frac{\Delta t \cdot v(x,y,z)}{\Delta l}\right| \leq 1 \qquad (5.62.)$$

formában írható fel, ahol Δl az adott elemen belüli áramvonalak sebességirányban mért maximális hossza (KÖNIG, 1993).

A *Neumann kritérium* azt biztosítja, hogy kizárólag az advektív-diszperzív szennyezőanyag-hozamok hatására a koncentráció-gradiens iránya ne változhasson meg. Matematikai formában:

$$\frac{D^*_{xx}\Delta t}{(\Delta x)^2} + \frac{D^*_{yy}\Delta t}{(\Delta y)^2} \leq 0{,}5, \qquad (5.63.)$$

ahol D^*_{xx} és D^*_{yy} a diszperzió-állandó mátrixának főátlójában található elemei (REDDEL és SUNADA, 1970).

A forrás- és nyelő-elemek stabilitási kritériuma biztosítja, hogy a nyelők hatására bekövetkező szennyezőanyag-mennyiség csökkenése ne legyen nagyobb, mint az időlépcső elején az adott elemben tárolt szennyezőanyag-mennyiség, azaz

$$\Delta t \leq \frac{n_0 m_{i,j}}{q_{i,j}}, \qquad (5.64.)$$

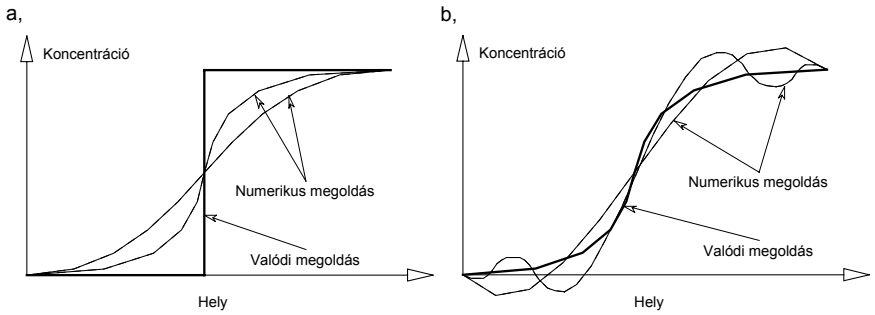
ahol $q_{i,j}$ a pontszerű nyelők és források összegzett hozama az elem egységnyi felületére vetítve, $m_{i,j}$ az elem (átlagos) magassága, n_0 a szabad hézagtérfogat.

5.2.2.2.2. A numerikus diszperzió

Numerikus diszperzió alatt a szennyezőanyag pusztán advektív transzportja során kialakuló éles frontjának - az iteratív számítási ciklusok sorozatának végrehajtása közben fellépő pontatlanságok hatására bekövetkező - elmosódását értjük (45. ábra:a).

A jelenség kialakulásának oka, hogy a szennyezési front számított haladási sebessége kissé eltér az advektív áramlási sebességtől. Mivel a numerikus módszerek alkalmazásakor az anyagmérleg mindig pontosan teljesül, ezért a sebességbeli eltérés a rend-

szerben egy relatív koncentráció-csökkenéssel kompenzálódik, így az oldat és a kiszoruló víz közötti éles határvonal elmosódik és egy átmeneti zóna alakul ki (HALÁSZ, 1987). Minthogy a hibajelenség eredménye a szennyezőanyag szóródása, ezért numerikus diszperziónak nevezik. Az említett hiba bizonyíthatóan fellép advektív-diszperzív transzportszámításoknál is, amelynek eredményeként látszólagosan megnövekednek a diszperzió-állandó tenzorának elemei. Magát a hibát a differenciálhányadosok differenciahányadossal való közelítésének pontatlansága okozza, ami a második deriváltak (diszperzív hozamok) esetén sokkal nagyobb jelentőségű.



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

5.2.2.2.3. Az "Undershoot-Overshoot" jelenség

Az *"Undershoot-Overshoot" jelenség* hasonlít a numerikus oszcillációhoz, ekkor a két különböző koncentrációjú hely között a koncentráció érték nem fokozatosan, hanem az alacsony és a magas koncentrációértékekhez oszcillálva közelít (45. ábra:b). A jelenség elsősorban a központi differenciák alkalmazásakor fordul elő, így az előrelépéses differenciákra való áttéréssel megkerülhető. Ez utóbbi esetben azonban a numerikus diszperzió erősebb, mert az ilyen módon képzett differenciahányados nagyobb hibával közelíti a differenciálhányadost, mint a központi differenciák esetén.

A numerikus diszperzió és az "Undershoot-Overshoot" jelenség elkerülhető, ha a korábban tárgyalt Courant-kritérium a modellezett tér teljes egészére, mindkét (mindhárom) koordináta-tengely irányában teljesül, és ha a hálóra értelmezett Peclet szám kisebb, mint 2 (FRIND, 1982):

$$Pe_x = \frac{\bar{v}_x \Delta x}{D^*_{xx}} \leq 2 \quad \text{és} \quad Pe_y = \frac{\bar{v}_y \Delta y}{D^*_{yy}} \leq 2\,, \qquad (5.65.)$$

ahol Pe a Peclet-szám.

Sajnos a kritériumok teljesülése csak magas elemszám esetében biztosítható, azonban ennek korlátot szab a rendelkezésre álló memória. KINZELBACH (1986) arra hívja fel a figyelmet, hogy az említett numerikus hibák még a fenti feltételek teljesülése esetén is bekövetkezhetnek, ha $\frac{\alpha_L}{\alpha_T} > \approx 10$, ahol α_L és α_T a longitudinális és transzverzális diszperzivitás.

5.2.3. Részecskeszemléletű szimulációs eljárások

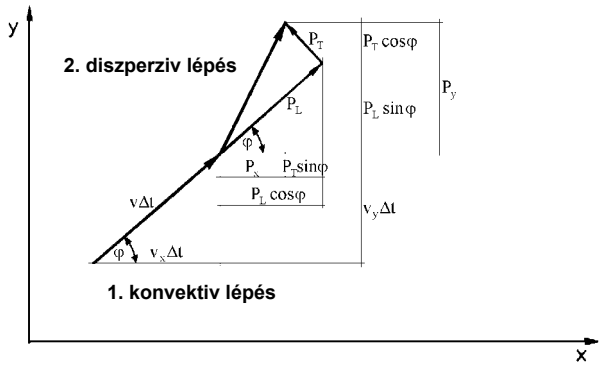
A részecskeszemléletű megoldások a transzport-egyenlet olyan megoldásai vagy annak analogonjai, melyek valamilyen módon *kizárják a numerikus hibák fellépését*. A részecskeszemléletű megoldások közös jellemzője, hogy *a rendszerben található szennyező anyagokat egységekbe fogják össze* és az egységek mozgását vizsgálják. Egy-egy ilyen egységhez, amit részecskének hívunk, mind helyben, mind térben változó szennyezőanyag tömeget, mennyiséget rendelhetünk, ami a megoldás rugalmasságát biztosítja. A részecskeszemléletű megoldások közül a két legelterjedtebbet, a karakterisztika módszerét és a véletlen bolyongást mutatjuk be.

5.2.3.1. Karakterisztika módszere

A karakterisztika módszere azon alapul, hogy a transzport egyenletet nem helyhez, hanem a mozgó vízrészecskékhez kötött koordinátarendszerrel írja le, így a transzport egyenletet ordinális differenciálegyenletté alakul. Másképpen megfogalmazva a módszer a koncentrációk változását nem álló helyzetből, hanem az áramló folyadékkal mintegy együtt mozogva szemléli. Tekintettel a transzportegyenlet ordinális differenciálegyenletté fajulására a karakterisztika módszere (többnyire együttesen a véges differencia módszerrel alkalmazva) kiküszöböli numerikus hibák nagy részét. Kiindulási alapként szükséges az áramlási sebességtér jellemzőit, azaz a sebességvektor irányának és nagyságának térbeli és időbeli változását ismerni, ezt többnyire véges differencia módszerrel határozzuk meg. Ezt követően olyan pontokat (részecskéket) helyezünk el az áramlási térben, amelyek az áramló vízzel együtt mozognak az áramvonal (karakterisztikus vonal) mentén és amelyeknek a helyzetét egy fix rácshálóhoz, praktikusan egy véges differencia hálóhoz viszonyítjuk A módszer folyamán az egyes részecskék megadott, de az egyes időlépcsők során változó nagyságú szennyezőanyag-tömegeket jelképeznek. A karakterisztika módszerét számos szoftver alkalmazza. Előnye, hogy könnyen összekapcsolható bármely véges differencia elven működő hidrodinamikai számítási rendszerrel. A nehézséget csupán az eltérő utakon és különböző sebességgel mozgó részecskékhez kötött koordináta rendszerek nyilvántartása okozza. Ezért fordul elő, hogy a részecskék számát limitálni szükséges, ebben az esetben főleg permanens forrás és hosszú időtartamra történő számítás esetén a módszer pontossága lecsökkenhet. (KONIKOW és BREDEHOEFT, 1978)

5.2.3.2. A véletlen bolyongás módszere

A véletlen bolyongás módszerének alapötlete az, hogy a szennyezőanyag porózus közegbeli szóródása, diszperziója, legyen az a hidrodinamikai diszperzió, vagy a diffúzió hatására bekövetkező szóródás, véletlen jellegű (sztochasztikus) folyamat. Ezért bontsuk a teljes szennyezőanyag tömeget kisebb és megfelelően nagy számú egységre, és ezzel a nagyszámú részecskével egyenként szimuláljuk az áramlási sebességvektor iránya és nagysága által egyértelműen meghatározott advektív áramlásból eredő elmozdulásokat, majd erre szuperponáljuk a sztochasztikus diszperzív transzport-jelenségeket (46. ábra).



46. ábra
A részecske mozgása advektív és diszperzív lépések szuperpozíciójaként értelmezve (KINZELBACH, 1986)

A módszer előnyeit PRICKETT és szerzőtársai (1981) a következőkben foglalták össze, hogy:

- Nincs az egyenletnek megoldandó diszperziós tagja, az ezt helyettesítő rész mindössze mintegy 10 programsor, ezért a számításokhoz szükséges gépidő kicsi.
- Csak egyetlen koordinátarendszert és az advektív áramlások számításához felhasznált véges differencia hálórendszert kell alkalmazni.
- A koncentrációk eloszlását csak azokban az időpillanatokban kell számítani, amikor azok érdekesek.
- A részecskéket csak a szennyezett területen lehet felvenni, a szennyezéstől távol eső területeken kisebb ismeretesség és ennek következtében pontatlanabb adatrendszer is megengedhető.
- A megoldások egymásra szuperponálhatók, így bármennyi részecskével végezhető el a szimuláció anélkül, hogy memóriaproblémák lépnének fel.
- A tradicionális numerikus hibák (Undershoot-Overshoot jelenség, numerikus diszperzió) nem lépnek fel.

A módszer hátrányai:

- Durva tér- és időbeli felosztás esetén nagyobb koncentráció-változások fordulhatnak elő, mint a kezdeti koncentráció érték, tehát "negatív koncentráció-értékek" számítását a módszer elve nem zárja ki.
- A koncentráció-eloszlás képe alacsony számú részecske felhasználásakor nem esztétikus és nem is reális
- A módszer megkívánhatja speciális esetekben igen nagy számú részecskék használatát. (A részecskék száma a gyakorlatban általában nem haladja meg a 10 000 darabot.)
- A koncentrációk számításához felhasznált háló osztását optimálni kell. A túl sűrű osztás esetén az egyes elemekbe jutó részecskék száma alacsony lesz, ezért durva

eredményeket kapunk. Ritka hálóosztás esetén az egyes elemekbe jutó részecskeszám megfelelően nagy lehet, azonban az összes elemek száma annyira lecsökkenhet, hogy emiatt a kapott eredmények túlságosan nagy területre adnak átlagértékeket és esztétikailag sem megfelelők. KINZELBACH (1986) a hasábelemenkénti minimum 20 db részecskét tartja optimálisnak.

- PRICKETT és szerzőtársai (1981) azt állapították meg, hogy a megfelelő szennyezőanyag-felhő kialakulása érdekében az időlépcsőt úgy kell módosítani, hogy az advektív lépés hossza sosem haladja meg a legkisebb rácsméret ötödét. Ezzel egyben biztosítja azt is, hogy a részecske ne legyen képes átugrani bármely nyelő felett anélkül, hogy azt észlelte volna. Hibalehetőség rejlik az áramlási sebesség hirtelen megváltozásakor. Ekkor előfordulhat, hogy a nagy áramlási sebességgel jellemezhető térrészből a részecske mélyen beugrik a stagnáló tartományba, ahol szinte csapdázódik. Ezt a problémát csak az időlépcső radikális csökkentésével lehet megoldani.

A módszer alkalmazásakor a kezdeti koncentráció-eloszlásnak megfelelő eloszlású azonos szennyezőanyag tömeget jelentő részecskét helyezünk el a vizsgált térrészbe, majd az eltelt időnek és a szennyezőforrás aktuális intenzitásának megfelelően újabb részecskéket juttatunk a rendszerbe. A vizsgált térrészben található szemcsékre elvégezzük az advektív és a sztochasztikus diszperzív számítási lépést, figyelembe véve a késleltetést, illetve a szennyezőanyag bomlását. A bomlás figyelembe vételére szokás a részecske által szimbolizált szennyezőanyag mennyiségének vagy a rendszerben található részecskék darabszámának véletlen-eloszlású csökkentését használni. Az időlépcsők végén egy-egy térrészben (elemben) található részecskék száma, az általuk szimbolizált szennyezőanyag mennyiség és a pórusok térfogata alapján számítjuk a koncentrációkat.

6. A modellszámítások adatrendszere

Minden modell más és más, ezért a szükséges adatok is kis mértékben eltérhetnek egymástól. Jelen fejezetben röviden összefoglaljuk a szivárgási alapegyenlet és a transzport-egyenlet megoldásánál szükséges adatrendszer kialakításának, ellenőrzésének és hibáinak legfontosabb elméleti vonatkozásait.

6.1. A hidrodinamikai és transzportmodellek adatigénye

6.1.1. A hidrodinamikai modell adatigénye

A hidrodinamikai modellszámítás során a cél a szivárgási sebességek meghatározása, ezért a modellezett térben a hidraulikus potenciál, azaz a nyomásszint értékek meghatározására törekszünk, aminek ismeretében a szivárgás sebessége - feltételezve, hogy a szivárgási tényező értéke ismert - a Darcy-törvény segítségével meghatározható. A számítások során a terület vízmérlegét szükséges meghatározni, aminek *az elemeinek számításához az alábbi paraméterek ismeretére van szükség:*

- a vízadó és vízzáró képződmények geometriája;
- az áramlási közeg hidraulikus vezetőképességét leíró közegjellemzők: szivárgási tényező vagy transzmisszivitás;
- a közegben a víz tárolódását befolyásoló, a tárolt vízmennyiség megváltozása és a nyílt tükrű rendszer esetén a vízszintváltozás, zárt tükrű rendszer esetén a nyomásváltozás közötti összefüggést meghatározó paraméterek: hézagtényező vagy hézagtérfogat, szabad hézagtérfogat, fajlagos hozam, tárolási tényező és fajlagos tárolási tényező;
- a rendszerben található források és nyelők, mint például az injektáló kutak vagy vízkivételek helye, hozama és a kúthozamok időbeli változásai;
- a függőleges vízforgalom meghatározásához szükséges jellemzők: a felszín alatti vizeket tápláló beszivárgás intenzitásának mértéke, amit maradó beszivárgásnak is neveznek, a szomszédos víztartókkal való kommunikáció során történő hozzáfolyás vagy elfolyás hozama, vagy azok meghatározásához az említett vízadók nyomásszintje, annak időbeli változása, valamint a rétegeket elválasztó féligáteresztő réteg, vagy rétegösszlet függőleges irányú szivárgási tényezője,
- a felszín alatti vízek vízszintjét befolyásoló felszíni vízfolyások és tavak mértékadó vízszintjei, mederfenékszintje, a kolmatált zóna vastagsága és vízáteresztő képessége.

A fenti jellemzőknek az adott modell határain belüli térbeli és időbeli változásait az alapadat-rendszernek tartalmaznia kell. Tekintettel arra, hogy a modell nem izolált, ezért annak határain anyagforgalom lehetséges, melynek mértékét az alábbi módokon lehet felvenni (*a számítás peremfeltételei*):

- a modell határán be- és kilépő hozamok és azok időbeli változása (*Neumann-típusú határ*);
- a modell határán a nyomásszintek és azok időbeli változása (*Dirichlet-típusú határ*).
- a környező nyomásszintektől függően változó hozammal jellemzett határ jellemzői (általános peremfeltétel (GHB))

Mivel a számítások során nyomás- vagy vízszintváltozásokat kapunk, ezért az első közelítés számításához a nyomásszintek térbeli eloszlásának egy kezdeti időpontban való ismeretére is szükség van (*kezdeti feltétel*).

6.1.2. A transzportmodell-számítás adatigénye

A szennyezőanyag-terjedési számítások célja az időben változó koncentráció-eloszlás meghatározása a modellezett térben az ismert áramlási sebességtérben a szennyezőanyagra és az áramlási térre jellemző terjedési tulajdonságok felhasználásával.

A szennyezőanyag-terjedés számításához a teljes modellezett térre vonatkozóan az alábbi alapadatok ismeretére van szükség:

- a vizsgált szennyezőanyag(ok) szempontjából eltérő terjedési tulajdonságokkal jellemezhető testek (geológiai képződmények) geometriája;
- a szivárgás átlagos lineáris sebessége (Darcy-féle sebességek) és iránya a porózus közegben,
- a szennyezőanyag szóródását diszperzióját meghatározó áramlási közeg-jellemzők: mértékadó szemcseátmérő, effektív diffúzió-állandó, hidrodinamikai diszperzió-állandó vagy longitudinális és transzverzális diszperzivitás, szabad hézagtérfogat (az átlagos pórusbeli áramlási sebesség meghatározásához), a közeg száraz állapotban mért testsűrűsége;
- az áramló közeg (szennyezőanyag) jellemzői: a folyadék sűrűsége, a diffúzió-állandó vizes közegben mért értéke, a szennyezőanyag vízben való oldhatósága, a szennyezőanyagra vonatkozó megoszlási együttható vagy szorpciós izotermák, a szennyezőanyag bomlási együtthatója vagy a felezési idő;
- telítetlen közegbeli szivárgás esetén a telítettség térbeli változásai;
- szennyezőanyag-források és -nyelők adatai: a szennyezés pillanatnyi vagy tartós jellegének meghatározása, a vizsgált képződménybe jutó szennyezőanyag hozama (az adott forrás aktivitásának mértéke), pontszerű források vagy nyelők esetén a kitermelt vagy injektált szennyezett víz koncentrációja és hozama, tartós szennyezések esetén a forrás aktív működési periódusának vagy periódusainak megállapítása.
- peremfeltételek adatai: Dirichlet-peremfeltétel esetén akoncentráció állandó, ami megfelel a háttérterhelés értékének vagy zérusnak mennyiben a határ a szennyezés által nem érintett területet jelenti, egyébként lehet egy időben adott módon változó koncentráció érték. Neumann típusú határ esetén a határokon megadott hozamokhoz a szennyezőanyag-koncentrációját is meg kell adni.
- *Kezdeti feltétel*ként egy tetszőleges kezdeti időpontban mért koncentráció-eloszlás használható fel.

6.2. A modellszámítások adatigényének kielégítése

A modellszámítás egyik sarokpontja *a megfelelő minőségű és megbízhatóságú adatrendszer* kialakítása. A számítás során az adatgyűjtés során egy földtani, vízföldtani *alapadat-rendszert* alakítunk ki, amelynek felhasználásával készíthető el a *modell-adatrendszer*. *Az alapadat-rendszert fúrási rétegsorok, földtani szelvények terepi*

vagy laboratóriumi mérési eredmények, térképek, légi és űrfelvételek, illetve azok dokumentációi alkotják. Az alapadat-rendszer alapján elkészített *modell-adatrendszer már az egyes modell-elemekre az alapadatok alapján valamilyen logikai, matematikai, statisztikai úton származtatott értékeket tartalmazza*. Az alap- és a modelladat-rendszer közötti legfontosabb különbség abban áll, hogy *a modelladat-rendszer már hipotetikus elemeket, a földtani, vízföldtani kép alapján meghatározott koncepción alapuló következtetéseket is tartalmaz*, ami a modellezés végeredményét jelentősen befolyásolja. Amennyiben a kapott eredmények nem reprezentatívak vagy éppen helytelenek, akkor az alapadat-rendszer újraértelmezéséig kell visszamenni, majd annak alapján új koncepciót kell kidolgozni, aminek segítségével új modell-adat-rendszert lehet kialakítani.

6.2.1. A rendelkezésre álló adatok megbízhatósága, az alapadat-rendszer értékelésének szempontjai

A hidrodinamikai és transzportmodellezés során a teljes modellezett térrésben kijelölt valamennyi elemre meg kell határozni a víz szivárgását és a szennyezőanyagok terjedését meghatározó közegjellemzőket, illetve szennyezőanyag-specifikus tulajdonságokat. Az adatrendszer meghatározáshoz a területen korábban végzett földtani, vízföldtani kutatások adatai állnak rendelkezésre, amelyeket a felhasználás előtt célszerű az alábbi szempontok figyelembevételével értékelni:

Az adat származása, megbízhatósága. Az adat származásának és megbízhatóságának vizsgálata alatt a végzett mérések pontos dokumentációjának fellelhetőségét és az azok alapján a mért érték pontosságára levonható következtetések összességét értjük. Az adatrendszer kialakítása során előnyben kell részesíteni azokat a vizsgálati eredményeket, melyek dokumentációjában az eredeti mérési adatsor is szerepel, illetve az annak felhasználásával kapott eredmény. Ilyen esetekben sor kerülhet a mért adatok szükség szerinti újraértékelésre, ellenőrzésére. Fontos adat a mérés pontosságára utaló megjegyzés, esetleg a mérés körülményeinek, a használt eszközöknek a részletes leírása.

A méréstechnika fejlődése. A vizsgálatokhoz felhasznált műszerek mind pontosságukban, mind az általuk kínált szolgáltatások minőségében jelentősen fejlődtek az elmúlt évtizedekben. Egyes mérési eljárások abszolút pontossága jelentősen javult új elveken működő műszerek kifejlesztése miatt. Számottevő a fejlődés a mérési gyakoriság terén, mivel a digitális adatgyűjtők elterjedése lehetővé teszi akár 5-10 másodpercenként egy adott mérés elvégzését, amire korábban a kézi mérések során nem volt mód.

A mérések kiértékelésének fejlődése. A kapott pontosabb és sokszor sokkal nagyobb számú mérési eredmények kiértékelése terén áttörést jelent a számítógépes adatfeldolgozás megjelenése. A mért értékek közül a kiugró – és ezért feltehetően téves – adatok kiszűrhetők, nagy számításigényű inverz számítások végezhetők el. Ugyanazt az adatsort emberi többletmunka nélkül sokféle kiértékelési módszerrel vizsgálhatunk, ami mind-mind a kapott eredmények nagyobb pontosságához, megbízhatóságához vezetnek.

A mérési eljárás pontossága, közvetett vagy közvetlen jellege. A meghatározott paraméterek pontosságát erősen befolyásolja az alkalmazott eljárás közvetett vagy közvetlen jellege. Közvetett eljárásnak tekintjük, amikor egy képződménynek valamilyen tetszőleges fizikai vagy kémiai tulajdonságát mérjük, majd annak alapján egy másik megismerendő tulajdonságára következtetünk. Például ilyen módon közvetett módszerek geofizikai mérések, ahol pl. fajlagos ellenállási adatok alapján anyagi minőségre (pl. agyag, iszap, homok, kavics), esetleg szivárgási tényezőre következtetünk. Közvetlen ezzel szemben például a szivárgási tényező meghatározása akár próbaszivattyúzással, akár laboratóriumban permeabiméteres kísérlettel. A közvetlen méréseket jobban megbízhatónak tartjuk és ilyen szempontok alapján a felszíni (pl. szeizmikus vagy elektromos módszerek) vagy fúrólyuk (karottázs) geofizikai vizsgálatok eredményeit, azok közvetett jellege miatt, elsősorban a területi eltérések és tendenciák kimutatására, mintsem a mérési értékek közvetlen felhasználására célszerű felhasználni, szemben például a zavartalan magminták laboratóriumi vizsgálati eredményeivel.

A paraméter meghatározhatóságának pontossága. A modellekben használt paraméterek meghatározhatósága egymástól jelentősen eltér. Jellegzetes például a szivárgási tényező meghatározásának bizonytalansága, ahol a különféle (terepi, laboratóriumi és számításos) meghatározási módszerekkel kapott eredmények gyakran akár nagyságrendileg is különbözhetnek egymástól. Ezzel szemben például a víz- vagy nyomásszintek, hőmérsékleti értékek, elektromos vezetőképesség, vagy pH értékek meghatározásánál a mérési értékek hibája - a transzportmodellezés szempontjából - gyakorlatilag elhanyagolható. Amennyiben nagy meghatározási bizonytalanságú paraméterek adatrendszerét alakítjuk ki törekedni kell arra, hogy azonos módon meghatározott adatokból vonjunk le következtetéseket.

A mérési érték által jellemzett terület nagysága. Az értékelés során lényeges kritérium a mért érték által jellemzett térrész nagyságának értékelése. A térrész korlátozódhat:

- az adott *(mag)mintára*, ilyen eset például a szivárgási tényező meghatározása permeabiméterrel, vagy szemeloszlásból;
- az adott fúrási pont által jellemzett *függélyre*, pl. a rétegvastagság, a nyugalmi nyomás szintje stb.;
- az adott *mintavételi hely (fúrás, kút) közvetlen közelére*, pl. kutak próbaszivattyúzásából származó hidraulikai információk;
- *egy vizsgált szelvényre*, pl. geoelektromos mérési szelvény, kutatóárok stb.
- *a vizsgált terület egy nagyobb*, általában *pontosan nem* is *lehatárolható részére*, mint pl. rövid ideig tartó nyomjelzéses vizsgálat az szivárgás irányának és sebességének meghatározására, vagy elektromos geofizikai szelvényezés eredményei;
- *a vizsgált területen belüli több négyzetkilométer nagyságú régiójára*, ilyen pl. a nyomjelzéses vizsgálatok eredményei karsztos beszivárgási területek és források összefüggéseinek vizsgálatára, vagy a regionális nagymélységű geofizikai vizsgálatok, medencealjzat-kutatás szolgáltatta eredmények.

Az, hogy milyen térrészre korlátozott mérések eredményeit használjuk fel, ez az adatrendszer felépítési koncepciójától, illetve a modellezési feladattól is függ. Kevés adat esetén, néhány geofizikai szelvény által szolgáltatott kisebb pontosságú, de ho-

mogén eloszlású és minőségű adatrendszer pontosabb modellezési eredményhez vezethet, mint az adott területen található egyetlen fúrásban végzett néhány vizsgálat eredményeinek kiterjesztése a modellezett térre.

A mérési értékek térbeli eloszlása. A reprezentatív adatrendszer kialakítása megköveteli, hogy a rendelkezésre álló mérési eredmények térbeli eloszlása arányos legyen az adott térségnek a számítási eredményekre gyakorolt hatásának mértékével. Pl. egy vízbázis hidrodinamikai vizsgálata során a megfelelő eloszlású mérési hálózat azt jelenti, hogy a kút vagy kútcsoport közelében több, távolodva egyre kevesebb mérési pont található. A mérési pontok helyének optimális eloszlását *a kutatáskor követendő elvek* jelölik ki, melyek a *fokozatosság, az egyenletes megismerés, a teljesség, a gazdaságosság és az optimális kockázat vállalásának elve*. A mértékadó modell-adatrendszer kialakításakor azon adatok, mérések, vizsgálatok felhasználására kell törekedni, amelyek az említett elveknek a leginkább megfelelnek.

A mérési értékek időbelisége. Mind a hidrodinamikai, mind a transzportmodellezés során alkalmazunk olyan paramétereket, melyek időben pl. a nyomásszintek, a koncentrációk, a telítettség stb. függvényében változhatnak. Ugyancsak használunk olyan elemeket a rendszerekben, melyek véletlenszerűen, vagy bizonyos törvényszerűségek szerint változnak, pl. folyók vízszintjei, kutak hozama, a meteorológiai viszonyoktól függő talajvízbe történő beszivárgás, stb. Ezen paraméterek esetében különösen fontos egy hosszabb periódus vizsgálata, annak érdekében, hogy a paraméter időbeli változásának törvényszerűségeit, vagy statisztikai jellemzőit megismerhessük, amihez minél hosszabb adatsorok ismeretére van szükség. Ugyanilyen fontos néhány speciális helyzet idősorának ismerete, pl. egy folyó esetében egy hirtelen áradás hatására bekövetkező talajvízszint-változások ismerete vagy egy hirtelen bekövetkezett szennyeződés esetén kialakult koncentrációk adatsora az eltelt idő függvényében. Ezen időben változó folyamatok nyújtanak lehetőséget arra, hogy a közeg tulajdonságait mind jobban megismerhessük, ezáltal a modell reprezentativitását növeljük.

A felsorolt szempontok alapján értékelt adatokból egy olyan *ellentmondásmentes alapadat-rendszer* kialakítására kell törekedni, ami a legmegbízhatóbb adatokon alapul, megfelel a kutatási elveknek, valamennyi rendelkezésre álló földtani, vízföldtani, geofizikai és környezettani ismerettel összhangban áll. A tapasztalat azt mutatja, hogy még a legjobban feltárt területek vizsgálata esetén is rákényszerülünk kevésbé megbízható mérési eredmények, becsült értékek alkalmazására. Tekintettel arra, hogy a számítási eredmények reprezentativitása nem haladhatja meg az alapadat-rendszer reprezentativitását, ezért az alapadat-rendszer felépítése során a legnagyobb körültekintéssel kell eljárni. *Az adatrendszer esetleges ellentmondásainak kiszűrésére, a kevésbé jellemző, esetleg hibás adatok korrekciójára a modellek kalibrációja során nyílik lehetőség*.

6.2.2. A modell-adatrendszer kialakítása

A modell-adatrendszer kialakítása során az alapadat-rendszer elemeinek felhasználásával egy modellezési stratégiát állítunk fel. A stratégiát szokás modellezési koncepciónak is nevezni. A modellezési koncepció alapvetően határozza meg a számítási

eredményeket, ugyanakkor szabályokba foglalni a teendőket nem lehet. A modellezési koncepció kialakításánál döntő a modellező személy tapasztalata, jártassága a felszín alatti vizek áramlástanában, az alkalmazott kémiában, a számítástechnikában, az alkalmazott matematikában (numerikus módszerek alkalmazása területén) és még számos további részterületen. A modellezési stratégia kialakításának részletei a gyakorlati hidrodinamikai és transzportmodellezés témakörébe tartozik, ezért ezt a későbbiekben tárgyaljuk és itt csak a modelladat-rendszer kialakításának elméleti vonatkozásaival, metodikájával foglalkozunk.

A modell-koncepcióval szemben általános elvárás, hogy a számítások során a valóságot a lehető legjobban leírja. *A modellezési stratégiának részét képezi*

- a vizsgálandó *térdimenziók számának meghatározása*,
- az alkalmazandó *matematikai módszer kiválasztása* (analitikus, fél-analitikus, numerikus),
- analitikus módszer alkalmazása során az *egyszerűsítő feltevések vizsgálata*, azaz az analitikus megoldás adatigényének meghatározása,
- numerikus módszer alkalmazása során *a modell térbeli szakaszolásának kialakítása*, az elemek méretének, alakjának, tájolásának eldöntése, a modellezendő rétegek számának meghatározása,
- az egyes elemekhez - az alapadat-rendszer adatainak felhasználásával - *reprezentatív értékek hozzárendelési módjának* megfogalmazása,
- a fellépő *numerikus hibák kezelési stratégiája*,
- a modell *kalibrálására alkalmas adatok és szcenáriók számbavétele és előállítása*.

Analitikus számítás esetén minden - a nyomásszint vagy koncentráció-eloszlást befolyásoló - tényezőt egy-egy adattal, ritkábban egy lineáris összefüggéssel kell jellemezni, amely az alkalmazott képlet egy-egy állandóját jelenti. Ilyen esetben a következő lehetőségek közül választhatunk:

– kiválasztjuk a vizsgált területhez legközelebb eső mérési értéket és azt használjuk fel. Erre leginkább adathiányos területeken kerül sor, vagy olyan esetben amikor az adott paraméter egy nagyobb területre jellemző átlagos érték (pl. egy kútcsoport termelési vizsgálatából származó szivárgási tényező) áll rendelkezésre;
– a vizsgálat által érintett területen belül (általában a létesítmény hatóterületén belül) fellelt értékeknek matematikai átlagát képezzük:

$$\overline{p} = \frac{\sum_{i=1}^{n_p} p_i}{n_p}, \qquad (6.1.)$$

ahol p a vizsgált paraméter, np az adatok száma és $\overline{p}$ az átlagérték.

– vagy súlyozott átlagát képezzük;

$$\overline{p} = \frac{\sum_{i=1}^{n_p} w_i p_i}{\sum_{i=1}^{n_p} w_i}$$, ahol w_i az adott értékre vonatkozó súly-érték. (6.2.)

- a vizsgált területen belül fellelt mérési eredmények statisztikai értékelése alapján a legjellemzőbb értéket pl. egy adott gyakorisági szintet meghaladó vagy egy adott tartóssághoz tartozó értéket veszünk fel. Ez a megoldás csak megfelelően nagyszámú adat esetén lehetséges.

Bármelyik módszerrel is történjék a konstansok meghatározása mindig marad egy bizonytalanság a számításban, azaz a minimális kockázatvállalás elve ritkán érvényesül. Indokolt, ezért – különös tekintettel arra, hogy ezek a számítások igen gyorsan elvégezhetők – az egyes számításokat nemcsak a legvalószínűbb értékekkel, hanem a reálisan előforduló minimális és maximális értékekkel is elvégezni, mert ezzel a gyakorlatilag lehetséges eredmények intervallumát is meg tudjuk határozni. Az egyes számítási eredmények összevetésével még a számítások egyes paraméterekre való érzékenységét is megvizsgálhatjuk.

Numerikus számítás esetén a felvett modell minden egyes elemére vonatkozóan meg kell adni a transzportegyenletben szereplő paramétereket. Ilyen esetben a két lehetőségünk van: a *zónák kialakítása* vagy az egyes elemekhez értékek hozzárendelése, amit *diszkretizálás*nak nevezünk.

A teljes modellezett térrészt egy adott tulajdonság szempontjából egyforma elemeket tartalmazó csoportokra bontjuk, melyeken belül az adott paraméter értékét az analitikus módszernél felsorolt lehetőségek közül választva határozzuk meg. Ezt az eljárást *zónák kialakításá*nak nevezzük. Ennek a megoldásnak egy speciális esete, amikor az adott paraméterre egy darab zónát alkalmazunk, ekkor az adott paraméter szempontjából nem használjuk ki a numerikus számítások adta térbeli változékonyság modellezésének lehetőségét, azaz a paramétert állandónak tekintjük.

Az adott helyeken ismert paraméterekre (mérési eredmények, származtatott adatok) - egy statisztikai vagy matematikai alapokon nyugvó interpolációs eljárás segítségével - folytonos felületet (térgörbét) illesztünk. Ennek a felületnek az adott modellelem helyén felvett értékét tekintjük a keresett paraméternek. A leírt folyamatot *diszkretizálás*nak nevezzük.

6.2.2.1. A zónák kialakítása

A pontszerű mérési, észlelési értékek térbeli kiterjesztésére talán a legkézenfekvőbb módszer az állandó paraméterekkel jellemezhető térrészek, zónák kialakítása. A zónákat magyar szakirodalomban előforduló mérnökgeológiai test, illetve vízföldtani egység kifejezések egy speciális értelmezésének is tekinthetjük, azonban a térrészek elnevezésénél az angol és német nyelvű irodalomban meghonosodott elnevezést vettük át.

A zónák kialakítása során két problémát kell megoldani:

– az egyes zónák térbeli helyzetét (méretét és alakját) kell meghatározni, azaz a teret fel kell osztani egy-egy paraméterrel jellemezhető térrészekre;
- meg kell becsülni a kijelölt zónákra jellemző értékeket.

A zónák elhelyezkedésének meghatározása általában földtani, vízföldtani alapokon nyugszik, egy zóna jelenthet egy jellemzően homogén képződményt, vetőkkel határolt területeket, eltemetett folyómedreket stb. Fontos következtetéseket lehet levonni a *földtani környezet kialakulásának ismerete* alapján, például az egyes képződményeken belül további térrészek különíthetők el, esetleg a képződmény adott paraméter szempontjából történő változásának trendje lehet ismert, mint pl. egy víztartó képződmény elagyagosodása. A szemcseméret-eloszlás tendencia jellegű változásának ismeretében, a szivárgási tényező térbeli eloszlását néhány támpontot szolgáltató mérési adat segítségével - a modellezés szempontjából nagy területre - meg lehet becsülni.

Az egyes zónákra jellemző értékek meghatározása történhet bármely korábban felsorolt módszerrel, valamint a későbbiekben - a modell-kalibráció egyik lehetséges módszereként - bemutatott inverz számítási eljárásokkal.

A zónaalkotás legnagyobb hibája, hogy a zónák határán egy, de általában több paraméter ugrásszerűen változik, meg, mert például a szivárgási tényező változása, együtt jár a szabad hézagtérfogat és fajlagos hozam változásával, aminek következtében a szomszédos elemek közötti víz- vagy szennyezőanyag-forgalom hatására ugrásszerű nyomásszint vagy koncentráció-változások következnek be. Ez a stabilitási hibákra érzékeny, általában kevés tárolt vízmennyiséggel jellemezhető modelleknél instabilitáshoz, illetve oszcillációhoz vezethet.

6.2.2.2. A diszkretizálás

Amennyiben ismert a vizsgált terület több pontján egy adott paraméter értéke, akkor ezekre a pontokra matematikai eljárások felhasználásával folytonos térfüggvényeket lehet fektetni, amelyek a módszertől és az adatok térbeli eloszlásától függő mértékben közelítik a keresett paraméter térbeli eloszlását. Ugyancsak lehetséges a meglévő pontokból interpoláció segítségével az adott elemre vagy csomópontra közelítő érték meghatározása.

A modellezés során használt interpolációs eljárások sajátossága, hogy –tekintettel arra, hogy valamennyi modellelemre szükséges az ismert értékeken alapuló értékbecslés elvégzése, ezért – az interpolációs módszernek alkalmasnak kell lennie szükség esetén extrapolációra is, amennyiben a kiindulási adatok mind a diszkretizálással érintett, modellezendő területen belül helyezkednek el. Nem engedhető tehát az meg, hogy a módszer ne számítson értékeket bármely pontra, még akkor sem, ha az extrapolációval kapott értékek megbízhatósága erősen megkérdőjelezhető.

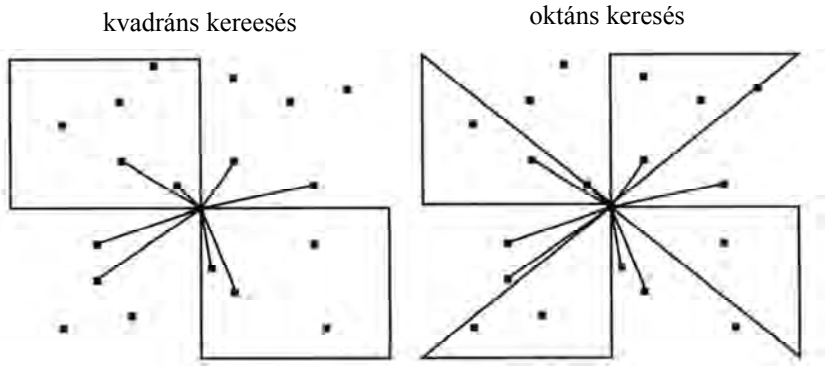
Az eljárás alkalmazása során előre meghatározott diszkrét pontokban (a végeselem háló csomópontjai, a véges differencia háló rácspontjai vagy az elemek középpontjai) az ismert helyekhez (fúrások, kutatólétesítmények helyei) rendelt ismert paraméterértékekből interpolációval határozzuk meg a keresett paraméter értékét. Az inter-

poláció során feltételezzük, hogy a kiválasztott pontban a keresett paraméter értéke a legközelebb eső adatokból származtatható, azaz nem véletlen jellegű.

Valamennyi interpolációs eljárás esetén szükséges n darab pontban, melynek koordinátái (x_1,y_1), (x_2,y_2),… (x_n,y_n), az interpolálandó mennyiség értékeit $(z_1, z_2, \ldots, z_n)$ ismerni. Az interpolációhoz általában a legközelebbi pontokat veszik figyelembe, melyeknek egy kettős kritériumrendszernek kell megfelelniük: egyrészt a vizsgált ponttól mért abszolút távolságot, másrészt a vizsgált ponthoz viszonyított elhelyezkedést veszik figyelembe. Ez utóbbit térnegyedekre vagy térnyolcadokra való osztással, amit kvadráns vagy oktáns keresésnek hívunk (47. ábra). Ezután az interpolációhoz az egyes térnegyedekbe vagy térnyolcadokba eső legközelebbi n pontot vizsgálják. Amennyiben a vizsgált ponthoz viszonyított helyzete nem veszik figyelembe, azt egyszerű keresésnek nevezik.

Az interpoláció kezdetén meghatározzuk az interpoláció során felhasználandó adatok minimális számát, valamint azt a távolságot, melyen belül a paraméterek nagysága közötti kapcsolat feltételezhető. Kiindulva abból a feltételezésből, hogy az egymáshoz közeli helyeken a vizsgált paraméterek hasonlítanak egymáshoz, a két pont közötti távolság növekedésével kell lennie egy olyan pontnak, amikortól kezdve a két érték függetlenné válik, ezt hatástávolságnak nevezik. Ezután a rácsháló valamennyi pontjára a legközelebbi, hatástávolságon belüli adatok felhasználásával, - a következőkben felsorolt módszerek valamelyikével - a keresett értéket meghatározzuk.

A leggyakrabban alkalmazott interpolációs módszerek a minimális görbület módszere, a lineáris interpoláció, a Renka-kódszer, a Shepard-módszer, a távolsággal fordítottan arányos súlyozott korrigált átlagszámítás, a radiális bázisfüggvény módszere, a krigelés. A módszerek részletes ismertetését az alkalmazott matematikai, geostatisztikai szakkönyvek (STEINER, 1990.; de MARSILY, 1986) és a kapcsolódó szoftverek felhasználói kézikönyvei (KECKLER, 1995., PANNATIER , 1996) részletesen tartalmazzák.



47. ábra
A kvadráns és az oktáns keresés elve
(in ed: CLAUSER, 2003)

6.2.3. Az adatrendszer méretének optimuma

A modell adatrendszerének abszolút nagysága az elemek és csomópontok számától függ, ugyanakkor egy adatrendszer kezelhetőségét, átláthatóságát nagyon megkönnyíti, ha trendek, tendenciák, földtani és vízföldtani megfontolások alapján a különböző paraméterek darabszámát lecsökkentjük. PECK és szerzőtársai (1988) elméleti vizsgálata rámutatott, hogy pl. egy 1200 elemből álló síkmodell (30 × 40 elem) esetén a számítások összesen egy kb. 38 000 egymástól különböző, bemeneti adatot kívánnának meg, aminek a számát a gyakorlatban 4 és 5 000 közé lehet csökkenteni geológiai, vízföldtani háttérinformációk és a jellegzetes tendenciák ismeretének birtokában.

Az egymástól eltérő adatok számának csökkentésével ugyanakkor problémák is felmerülnek. Minden numerikus modell stabilitását csökkenti, amennyiben az egyes elemek között bármelyik paraméter tekintetében jelentős nagyságbeli változások vannak. Éppen ezért nem célszerű a bemeneti adatok számát nagymértékben csökkenteni, mert akkor az a nagymértékű diszkontinuitások miatt akár a modell instabilitásához is vezethet. A mai technikai szint mellett előnyösebb a nagyobb területen állandónak tekintett paraméterek helyett, a bemutatott geostatisztikai módszerek alkalmazásával a természetes folyamatokat jobban követő fokozatos átmenetekkel követni az egyes paraméterek változásait.

Az egymástól eltérő adatok számának meghatározásánál, azaz a megengedhető egyszerűsítések eldöntésénél egy optimalizálási folyamatot kell elvégezni, melyek azok a területek a modellben, és milyen paraméterek tekintetében, ahol zónák kialakítása az átláthatóságot növeli, ugyanakkor várhatóan instabilitást sem okoz, és milyen paraméterek esetében célszerűbb inkább az interpolációkkal számított térfüggvények használata. Általános érvényű megoldás ebben a tekintetben nincsen, ugyanakkor a zónák vagy a diszkretizálás használatakor a következő tényezőket lehet – a teljesség igénye nélkül - figyelembe venni:

- a mérési értékek (ismert pontok) száma és eloszlása,
- a paraméter változékonysága abszolút értelemben és a modellezett területre vonatkozóan,
- a paraméter térbeli változékonyságára vonatkozó tendenciák ismerete,
- a paraméter és egy másik, jobban ismert paraméter korrelálhatósága,
- a paraméter meghatározhatóságának biztonsága,
- a paraméter hatásának mértéke a víz- vagy szennyezőanyag-mérlegre és ezáltal a végeredményekre.

6.3. A modell-adatrendszer hibáinak okai és jellegzetességei

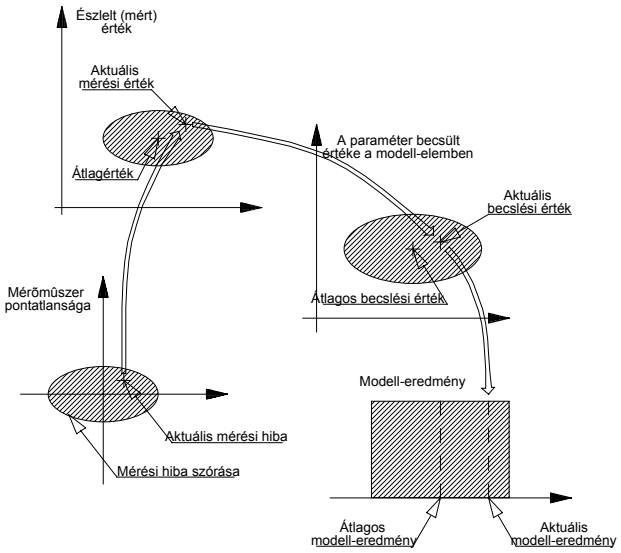
Mivel a modell-adatrendszer lokális mérési értékek sokaságán alapul számos hibát rejthet. A továbbiakban - a teljesség igénye nélkül - áttekintjük a lehetséges hibák okait, valamint azok néhány általános, jellegzetes tulajdonságát.

A modell-adatrendszerek hibáinak három jellegzetes oka (PECK et al., 1988.):

– a felvett paraméterek önmaguk hibásak, vagy nem reprezentatívak;

– a származtatott értékek a számításhoz felhasznált mérési értékek hibáit továbbviszik (a hibák átöröklődése);
– a modell általánosítása, egyszerűsítése során kialakított zonális jellemzők - a zónán belüli helyes mérési eredmények ellenére - nem reprezentativak.

A hibák átöröklődése. SACHER (1983.) vizsgálataiban a hibák átöröklődési folyamatát, mint egy, a mérőműszer pontatlanságából eredő, majd a mérés és a jellemző paraméter becslésekor továbbnövekvő hibát jellemezte, ami végül az átlagos - várható - modell-eredménytől eltérő végeredmény létrejöttéhez vezet (48. ábra). Ez a *hibaöröklődési lánc* - közvetett információk esetén - tovább bővül a nyert információ interpretációjának pontatlanságaira visszavezethető hibákkal.

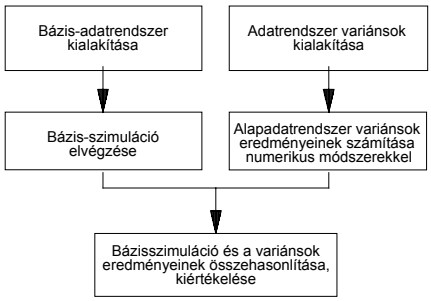


48. ábra
A hibák átöröklődésének sémája MEHRA, 1978 és MCLAUGHLIN, 1978 nyomán (SACHER, 1983)

A mérési hibák hatása. A mérési hibák hatását ún. *paraméter-érzékenységi vizsgálattal* (input sensitivity analysis) lehet követni, amelyet numerikus módszerek alkalmazása esetén a bemutatott séma szerint végezhetünk el (49. ábra). Először előállítunk egy bázis-adatrendszert és az adott számítási módszerrel elvégezzük a bázis-szimulációt. Ezután a bázis adatrendszert a tapasztalt mérési eredmények tartományában fokozatosan módosítva újabb számításokat végzünk. A kapott eredmények és a bázis-szimuláció eredményének összehasonlítása alapján megállapítható a vizsgált modell adott paraméterrel szembeni érzékenysége (HEIDERMANN, 1986.).

A paraméterhibák jellegzetességei. A paraméterhibákat a mérési pontatlanságok, valamint a mért értékek alapján adathiányos területekre származtatott értékek pontatlanságai okozzák. Ezeket a hibákat mérési vagy észlelési, valamint regionalizálási (kiterjesztési) hibáknak is nevezik (WINTER, 1981). A paraméterhibák jellegzetes

formáit tekintsük át abban az egyszerű esetben, amikor a modellezett térben kevés mérési érték áll rendelkezésre (SMITH, 1981.):



49. ábra
Egy alapadat-érzékenységi vizsgálat menete
HEIDERMANN (1986)

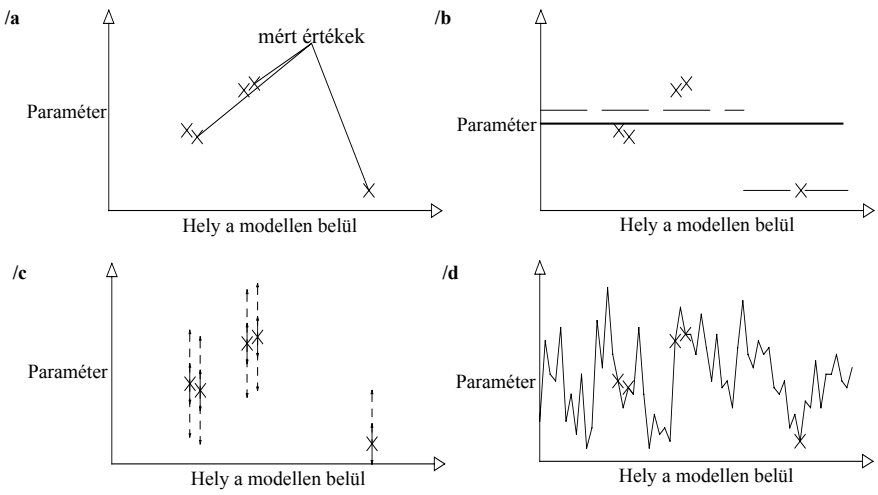
Legyen egy tetszőleges modell-paraméter változása, egy kiválasztott szelvény mentén öt pontban mért értékekkel adott (50. ábra:a). Ilyen esetben a modellezés során először az döntendő el, hogy tekinthető-e a képződmény az adott jellemző mennyiség szempontjából homogénnek, esetleg további zónákra bontva, az egyes régiókra jellemző mennyiséget lehetséges-e állandónak tekinteni. A 50. ábra:b folytonos vonala jelzi az első esetet, amikor a mért értékek átlagát tekintettük jellemzőnek a teljes modellezett zónára. A szaggatott vonalak arra az esetre vonatkoznak, amikor a szelvény menti értékek alapján két egymástól eltérő zónára bontottuk a vizsgált területet, de azokon belül a vizsgált jellemző állandónak tekinthető.

Azt, hogy a két modellfeltevés közül melyik a helyesebb, azt a mérések pontosságának ismeretében lehet eldönteni. A 50. ábra:c a függőleges nyilai a mérési eredmények pontosságát jelzik. A folytonos nyilakkal jelölt nagyobb pontosságú mérések esetén jogos a több zónára bontás, míg a szaggatott nyilakkal ábrázolt alacsonyabb pontosságú mérések esetén az eltérést maguk a mérési hibák is okozhatják.

A 50. ábra:d a mérési pontok sűrítésének esetét mutatja be. Látható a mérési-észlelési hálózat megfelelő megválasztásának fontossága az adott paraméter változékonyságának függvényében. Az ábrázolt esetben az öt észlelési pont szolgáltatta adatrendszer nem reprezentálja megfelelően a paraméter szelvény menti változását. A nem megfelelően megválasztott, térben és időben értelmezett mérési-észlelési gyakoriság a transzport-modellezés során elkövetett adathibák egy jelentős forrása (PECK et al., 1988.).

6.4. Az alapadat-rendszer ellenőrzése

Mint ahogy az a modelladat-rendszer hibái okainak felsorolásánál látszik a hibák triviális oka az alapadatok saját hibája és a reprezentativitás hiánya. Amennyiben az alapadat önmagában hibás, az sokszor már az adatfeldolgozás és értékelés során feltűnik, de legkésőbb a modell első futtatásainak eredményei alapján felderíthető.



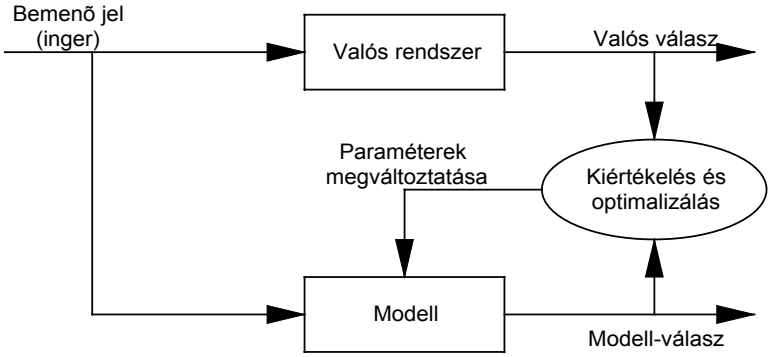
50. ábra
A paraméterhibák kialakulása (SMITH nyomán)
(PECK et al., 1988)

Sokkal nehezebb a nem kellő reprezentativitás kiszűrése, aminek legismertebb módszere a krigeléssel való kereszt-ellenőrzés, melynek angol neve: cross-validation, a szakirodalomban meghonosodott. A módszer alapgondolata, hogy amennyiben az adatrendszer reprezentatív és ellentmondásmentes, akkor egy ismert ponton mért vagy észlelt érték a többi adatból származtatható. Ezért az n észlelési pontot tartalmazó rendszerben egymás után egy-egy pontot kiválasztva a további n-1 észlelt érték felhasználásával becslést végzünk a kitüntetett pontra. Az észlelt érték és a becsült érték alapján a pontokra külön-külön varianciát számolunk, majd térképen ábrázoljuk. Azokon a területeken, ahol az észlelési pontok száma alacsony, vagy a mért értékek inhomogén minőségűek, a variancia-értékek kiugróan magasak lesznek, így ezeken a területeken esetleges további észlelésre vagy adatgyűjtésre lehet szükség. Természetesen magas variancia-értékeket okozhat az adott paraméter hirtelen, esetleg kiszámíthatatlanul szeszélyes megváltozása, ilyenkor a cross-validation módszerrel egyes területek kizárhatók a statisztikai vizsgálatból.

Az ellenőrzés másik lehetséges módja különböző vizsgálatok alapján kapott értékek grafikus ábrázolása. Amennyiben például szivárgási tényező-értékekkel rendelkezünk permeabiméteres kísérletekből és laboratóriumban meghatározott szabad hézagtérfogat vagy próbaszivattyúzásból kapott fajlagos depresszió értékekkel rendelkezünk ezeket egymás függvényében ábrázolva a kiugró értékeket ki lehet szűrni. Figyelni kell azonban arra, hogy ezen esetekben az érték eltérését egy, a vizsgálat során nem figyelembe vett tényező (pl. a kútkiképzés minősége) is okozhatja.

7. A modellek kalibrációja

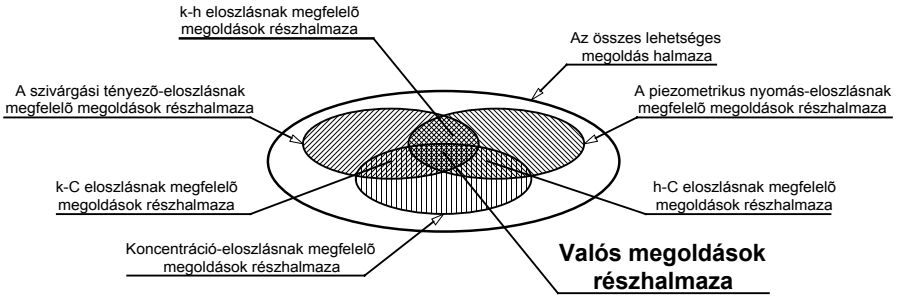
A modellek kalibrációja az a folyamat, amellyel azt érjük el, hogy a modell és a valóságos rendszer azonos külső hatásokra, ingerekre egymáshoz legjobban közelítő válaszokat szolgáltasson (51. ábra). *A szennyezőanyag-terjedési modell kalibrálása tehát egy sokparaméteres optimalizálási feladat*, melynek során törekszünk a modellparaméterek és peremfeltételek egy olyan együttesének kialakítására, melyben az adott transzport-jelenség a legnagyobb valószínűséggel fog megfelelni a valóságban lezajló folyamatoknak (HEIDERMANN, 1986.).



51. ábra
A paraméterbecslés sémája
HEIDERMANN (1986)

A kalibráció fogalmát másképpen is meg lehet közelíteni (van ROOY és ROSBJERG, 1988): Tekintsük az összes paraméter-variáns halmazát. Ennek egy részhalmaza azon variánsokat tartalmazza, amelyeket nem zár ki az adatgyűjtés során kialakított piezometrikus szintek eloszlása. Ugyanígy létezik egy olyan részhalmaz is, amely megfelel a tapasztalt szivárgási tényező, illetve transzmisszivitás stb. eloszlásának. Természetesen az a részhalmaz is meghatározható, amelyet a tapasztalt koncentráció-eloszlás alátámaszt, és hasonlóképpen minden ismert paraméter-eloszlás által megengedett paraméter-variánsok részhalmaza is meghatározható. Mindezek után a paramétereknek keresett, "valósághű" variációja a meghatározott részhalmazok metszetében található. Minél több paraméterre történik meg a lehatárolás, annál szűkebb körben kell a lehetséges optimumot keresni (52. ábra).

A modellek kalibrációjának alapvetően két típusa van az inverz számításokon alapuló vagy más néven autokalibráció és a hagyományos úton való számítással végzett *trial-and-error kalibráció.* Jelenleg egyre nagyobb lehetőség van a modell-adatrendszerek és nagy egyéb célra készített adatbázisok, főképpen térinformatikai rendszerek összekapcsolására, ami szintén felhasználható a modell-adatrendszer kalibrációja során.



52. ábra
A lehetséges megoldások halmazának szűkítése a kalibrációnál
(van ROOY és ROSBJERG, 1988)

7.1. Az inverz számítási eljárásokkal végzett kalibráció

A szivárgáshidraulikai modellezés során a piezometrikus szinteket számítjuk a hely, valamint az idő függvényében adott szivárgási tényező, transzmisszivitás, tárolási tényező stb. értékek mellett. A transzportmodellezés - hasonlóképpen - nem más, mint a koncentrációértékek számítása a hely és idő függvényében adott, szennyező-anyag-specifikus terjedési jellemzők, szivárgási sebesség-mező, bomlási és adszorpciós jellemzők esetén. Ebben az esetben tehát a nyomásszint-, illetve a koncentráció-eloszlás tekinthető a függő változónak, azaz ismeretlennek, amit a többi paraméter függvényében határozunk meg.

Az inverz kalibráció alapgondolata nem más, mint hidraulikai vagy transzport egyenletekbe ismert, időben állandó, vagy változó nyomásszinteknek, illetve koncentráció-eloszlásoknak, valamint azok idő és hely szerinti deriváltjainak a behelyettesítése, és ezáltal egy máskor ismertnek tekintett paraméter (pl. szivárgási tényező, transzmisszivitás, tárolási tényező, longitudinális vagy transzverzális diszperzivitás stb.) visszaszámítása. Másképpen közelítve meg az inverz eljárásokat, például keressük például azt vagy azokat a paraméter-eloszlásokat, amelyek esetén a valóságban észlelt koncentráció-eloszlás vagy szivárgási sebességtér kialakulhat.

Az inverz számítási eljárás nemcsak a modellek kalibrációjára, hanem paraméter-becslésre is felhasználható. A kutatás kezdeti fázisában történő modellezés esetén sokszor nem áll rendelkezésre megfelelő számban a szivárgási tényezőre vonatkozó adat. Ebben az esetben például az ismert talajvízszint-értékekből és azok időbeli változásából a szivárgási tényező területi eloszlása - a nyomásadatok pontosságának és reprezentativitásának függvényében becsülhető. Szokás az inverz kalibrációt - az iterációs keresési algoritmus felhasználása miatt azonnal kapott végeredmény miatt-automatikus kalibrációnak, vagy egyszerűbben autokalibrációnak is nevezni.

Az inverz számítások szükségesek, mert a gyakorlatban ritkán áll rendelkezésre olyan teljes alapadat-rendszer, amely az elvégzendő számítások adatigényét teljes mértékben kielégíti, ugyanakkor a hiányzó adatok in situ, illetve laboratóriumi mérésekkel történő pótlása időigényes és költséges. Ezen túlmenően léteznek olyan para-

méterek is, mint pl. a tárolási tényező, a diszperzivitás, melyeknek közvetlen meghatározása körülményes és pontatlan, ezért ezen paraméterek meghatározásához az inverz számítási módszer nagy segítséget nyújthat.

Az autokalibráció hibája, hogy az eredmények igen érzékenyek a potenciál-értékek (nyomásszintek és koncentrációk) hibáira. Mindez annak a következménye, hogy a hidrodinamikai modellben a transzmisszivitás, a tárolási tényező, stb. a nyomásnak az idő és a hely szerinti deriváltjai alapján számítható, így kis alapadat-hibák extrém nagy hibákhoz vezethetnek a számított paraméterekben, különösen azokon a területeken, ahol a hidraulikus gradiens kicsi (NEUMANN-YANKOWITZ, 1980.; McELWEE, 1982.).

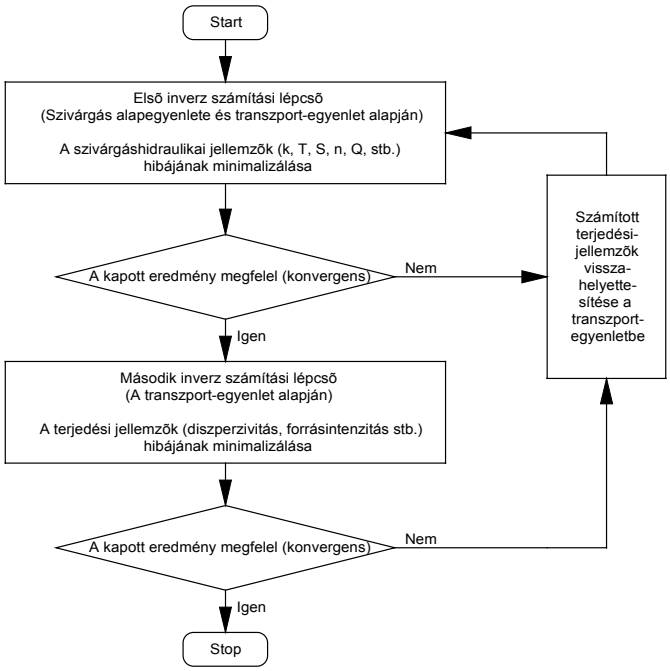
Tekintettel arra, hogy a diszperzivitás, a diszperzió-állandó, az effektív diffúzióállandó a koncentráció második deriváltja, ezen paraméterek tekintetében az inverz kalibráció már-már majdnem véghezvihetetlen, mert maga az inverz számítási algoritmus is instabillá válik. Éppen ezért a gyakorlatban ezt a módszert a diszperzivitás-értékek meghatározására nem használják. Elvi megfontolások alapján a közvetlen közelítés gyakorlati alkalmazása a késleltetés meghatározására szorítkozhat, ehhez azonban szükséges legalább két időpontban a teljes területre a koncentráció eloszlás ismerete, amely a gyakorlatban csak ritkán áll rendelkezésre.

A hiba kiküszöbölésére elsősorban a terület minél kisebb számú zónákra történő osztását javasolják, aminek megalapozottságát számos alkalmazás bizonyítja (EMSELLEMde MARSILY, 1971.; YEH et al., 1983).

Az autokalibráció másik hibája, hogy a reálistól jelentősen eltérő eredményeket szolgáltat, amelyekkel ugyan az adott nyomás-, vagy koncentráció-eloszlás valóban megkapható, ugyanakkor az értékek irreálisak. Érzékeltetendő a problémát tekintsünk egy kutat, melyben adott hozam mellett adott depresszió alakul ki. Ez depres??szió kisebb szivárgási tényező mellett nagyobb szabad hézagtérfogatot feltételezve is kialakulhat, ami a valósággal nem összeegyeztethető, hiszen nagyobb szivárgási tényező esetén nagyobb a szabad hézagtérfogat is, ugyanakkor az inverz számításnál a két eset elvileg egyenértékű eredmény.

Az inverz számítási megoldások és programok (PEST és klónjai, UCODE stb.) az elmúlt időszakban sokat fejlődtek, ugyanakkor megbízhatóságuk, még sokáig nem fogja lehetővé tenni ellenőrzés nélküli alkalmazásukat. Minden „sikeres” inverz számítás után szükséges a kapott eredményeket a meglévő földtani és vízföldtani eredményekkel összevetni, és szükség esetén a számításokat eltérő induló paraméterekkel újrakezdeni.

Az inverz számítás az alkalmazástól függően lehet egylépcsős vagy többlépcsős kalibráció, illetve lehet szimultán kalibráció is. *Egylépcsős*nek tekintjük a *kalibráció*t ha csak a szivárgás alapegyenlete, vagy csak a transzportegyenlet alapján történik a vizsgált paraméter inverz úton történő meghatározása. *Kétlépcsős kalibráció* esetén pl. egy transzmisszivitás-eloszlást mind a nyomásszintek, mind a koncentráció-eloszlások alapján számítjuk (53. ábra). A *szimultán kalibráció* azt jelenti, hogy a transzport-egyenlet alapján a modell-adatrendszert mind a vízföldtani, mind a szennyezőanyag-terjedési jellemzők tekintetében egyszerre kalibráljuk.



53. ábra
Az összetett kétlépcsős kalibráció sémája
(KEIDSER et al., 1990.)

Bár az inverz számítások alkalmazása a gyakorlati modell-számítások során kezd elterjedni, ezek az alkalmazások mégis elsősorban a szivárgáshidraulikai paraméterek meghatározására, kalibrálására vonatkoznak. A transzport-paraméterek inverz úton való meghatározása egyenlőre csak a tudományos kísérletekben kapott szerepet, aminek fontosabb okai (PECK et.al., 1988.):

– az advektív-diszperzív transzportegyenlet megoldásának numerikus nehézségei;
– az advektív -diszperziv transzportegyenlet alkalmazásának elméleti korlátai.

A felsoroltakhoz hozzátehető, hogy a hazai gyakorlatban csak ritkán találkozunk olyan nagyságú és pontosságú adatrendszerrel, amely az inverz számítások hatékony alkalmazását lehetővé tennék.

7.2. A trial-and-error módszer (közvetett közelítés)

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

A "trial-and-error" módszer az autokalibráció egyik legnagyobb hibáját küszöböli ki: Ez a megoldás ugyanis *nem követeli meg a nyomás- vagy koncentrációértékek és azok deriváltjainak ismeretét* a teljes modellezett térben, ami az autokalibráció pontatlanságának legfőbb forrása. Az eljárás további előnye, hogy semmilyen különösebb speciális matematikai eszköztárat nem igényel.

A trial-and-error módszer hátrányai:

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

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

Az algoritmusok terén JACQUARD és JAIN (1965) nemlineáris optimalizálási technikát dolgozott ki a szimulált és észlelt nyomások különbségei négyzetének minimalizálására, melyet később az olajiparban az áteresztőképesség területi megoszlásának számítására többen sikeresen alkalmaztak. COATS és szerzőtársai (1970), valamint SLATER és DURRER (1971) a lineáris optimalizálási technikát továbbfejlesztették, azonban ez a megoldás csak az esetek szűk körében volt alkalmazható a nemlineáris jelleg gyakori dominanciája miatt. YEH (1975) új megoldás, az általa iteratív négyzetes programozásnak nevezett algoritmus bevezetését javasolta, melynek alkalmazását hipotetikus víztartókra be is mutatta.

A gyakorlatban általában a trial-and-error kalibrációt alkalmazzuk elsősorban egyszerű kivitelezhetősége és kis számítógépkapacitás-igénye miatt. A trial-and-error kalibráció alkalmazása során előforduló váratlan modell-reakció rámutathat az adatrendszer hibáira, például egy - a Sajóládi Vízmű környezetében végzett - szimuláció esetén éppen a modell kalibrálása mutatott rá a Hernád folyón Bőcsnél található, korábban figyelmen kívül hagyott duzzasztás számottevő hatására (SZABÓ-KOVÁCS, 1991).

Tapasztalataink szerint, a trial-and-error módszer hatékonysága kisebb rétegzett tárolók esetében. Ilyen esetekben egyes korrekciók hatása nemcsak az adott rétegben, hanem a környezőkben is változásokat indukál, melynek következményei nehezen követhetők, emiatt volt sikertelen a Gyöngyös-Atkári Vízmű védőidomának meghatározásához kialakított első 9 réteges numerikus modell (SZABÓ-KOVÁCS, 1994) kalibrációja. Ugyanezen a területen évekkel később felépített 29 réteges modell trial-and-error kalibrációja ugyanakkor sikeresnek bizonyult egy többéves adatgyűjtő és feldolgozó munkát, a környező terület földtani ismereteit átfogó újraértékelést és további feltárást követően (GEOSERVICE, 1998-2000). A Gyöngyös-Atkári Vízmű új

védőidom számításai egyben arra is rámutattak, hogy egy jól megismert, de bonyolultabb rendszer kalibrációja kisebb problémát jelent, mint egy kevésbé ismert terület nagyobb összevonásokkal és több egyszerűsítéssel elkészített modelljéé (GÁMA-GEO, 2000).

7.3. Az autokalibráció és a trial-and-error módszer összevetése

A két megoldás összevetésekor megállapítható, hogy mindkét módszer alkalmazása megalapozott, mindkettőnek megvannak az előnyei és hátrányai. Az autokalibráció terjedése összefügg azzal a ténnyel, hogy alkalmazása kevesebb elméleti ismeretet igényel. A számottevő matematikai eszköztár a kalibráló szoftverekbe építve, amolyan fekete dobozként működik és a felhasználó hosszabb-rövidebb idő után az „eredményekhez" jut. Amennyiben a kapott végeredmény valóságközeli, akkor ezzel a feladat megoldottnak tekinthető, ugyanakkor esettanulmányok és munkajelentések bizonyítják, hogy a számítási algoritmusok nem minden esetben vezetnek reális eredményekhez.

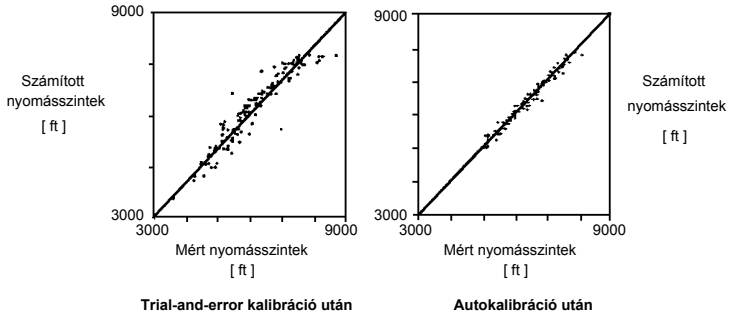
A trial-and-error kalibráció a nagyobb elméleti tudásigény mellett egy időigényes folyamat. A szükséges idő csökkenése a gyakorlottsági szinttel arányos. A módszer igazán nagy előnye az, hogy a modell-adatrendszer változtatásai során a várt és a kapott eredmények eltérései sokszor koncepcionális vagy adathibákat tárnak fel, a kalibráció végére a modellező szakember teljes mértékben megismeri a vizsgált rendszer működését, egyben ismeri az alapadat érzékenységet, valójában egy sok részletre kiterjedő vizsgálatnak vetve alá a rendszert.

Az autokalibrációt a repülésnél használt robotpilótához lehet hasonlítani, amire azt megtanították, arra remekül alkalmas. Ugyanakkor váratlan helyzetekben szükséges, hogy a gép irányítását a kapitány vegye át, hozzátéve, hogy a landolás általában a robotpilótával sokszor simább, mint amikor a kapitány teszi le a gépet. Ugyanez érvényes a kalibrálásra is, az autokalibráció sokszor hatékony és gyors, ugyanakkor speciális helyzetekben és főképpen akkor, amikor az adatrendszerben valamilyen rejtett hiba, belső ellentmondás van a trial-and-error kalibrációnak nincsen alternatívája. Az autokalibráció használatával elveszítjük a rendszer mélyebb megismerésének lehetőségét is. Az autokalibrációval kapott paraméterértékek (amennyiben a kalibráció sikeres és a keresési algoritmus valóban az optimumot találja meg) általában nagyobb pontosságúak. CARRERA és szerzőtársai (1989) egy végeselem modellhez használt adatrendszer példáján mutatták be, hogy a mért és a szimulált piezometrikus szintek eltérése - autokalibráció alkalmazása esetén - erősen lecsökkent (54. ábra)

7.4. A térinformatikai rendszerek (GIS) alkalmazási lehetőségei a kalibráció során

A transzport-modellek kalibrálása során egyre nagyobb szerepet játszanak a geográfiai információs rendszerek (*térinformatikai rendszerek*). A nevezett rendszerekben egyszerre találhatók meg a képi, grafikus, numerikus és a szöveges információk egy tetszőlegesen bonyolult felépítésű relációs adatbázis keretein belül, amelyek egyfelől felhasználhatók a szivárgáshidraulikai és transzportmodellek alap- és modelladatrendszerének kialakításához, másfelől azok ellenőrzésére, kalibrálására is alkalmasak

(TAMÁS et. al.,2002). Mint azt BIESHEUVEL és HEMKER (1993) egy példán bemutatja, a GIS adatbázisban tárolt adatok segítségével történhet a transzportmodell adatrendszerének a felépítése, majd a számítások eredményei (nyomás- és koncentráció-eloszlás, szivárgási sebességmező adatai, stb.) visszakerülnek a GIS adatbázisba (55. ábra).



54. ábra

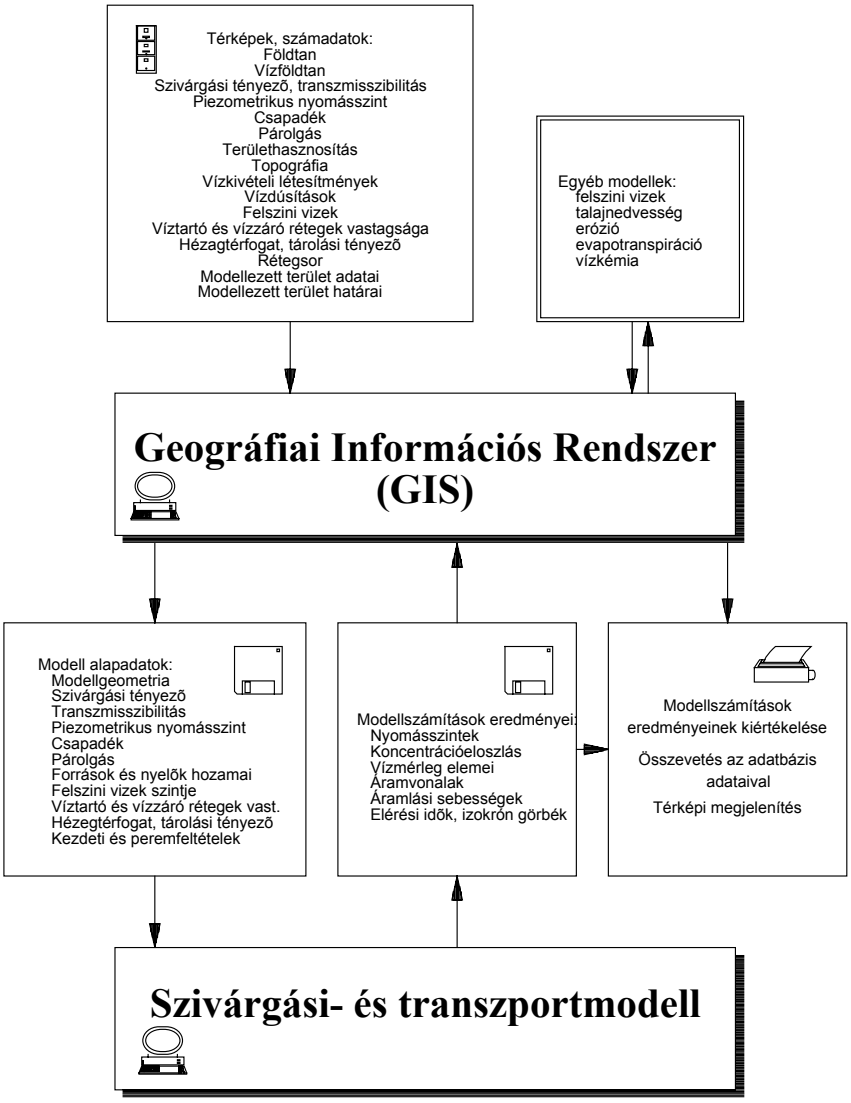
A közvetett és közvetlen kalibráció hatékonyságának összehasonlítása (CARRERA et al., 1989)

A központi adatbázishoz kapcsolt térinformatikai rendszer alkalmas arra, hogy a kapott eredményeket grafikus úton megjelenítse, valamint hogy azokat az adatbázisban szereplő reprezentatívnak tekintett adatokkal egybevesse. Ellentmondások megléte esetén a számításokhoz felhasznált adatrendszer módosítható. A rendszer nagy előnye az alapadat-rendszer felépítésének leegyszerűsödésén túl az is, hogy a területre vonatkozó folyamatosan bővülő mérési adatsorok felhasználásával a modell reprezentativitása, pontosítása folyamatosan történhet.

A GIS hidrodinamikai és transzportmodellezési alkalmazásának azonban számos hátránya is van, melyek közül a legnagyobb, hogy a legelterjedtebb GIS rendszerek elsősorban fejlett demonstrációs eszköztárral, adatbázis kezeléssel rendelkeznek. Ezen programok numerikus számítási képességei egyenlőre nem szolgálják ki a hidrodinamikai és transzportmodellezés ilyen igényeit. Éppen ezért a megvalósult projektek elsősorban a kiindulási adatok és eredmények GIS rendszerekkel történő vizualizálásában, és további egyéb célú felhasználásában rejlő lehetőségeket használták ki, valamint egy esetlegesen meglévő országos GIS alapú adatbázisból a modellszámításokhoz szükséges adatok átvételét oldották meg. Összességben megállapítható, hogy a jelenleg működő GIS rendszerek: ESRI ARC/Info vagy ArcView, Intergraph Microstation vagy Geomedia, Sirius 7, stb. egy térképezési feladat megoldására vagy adatok és eredmények vizualizációjára alkalmasak, ugyanakkor numerikus modulok és alapvető számítási képességek hiányában a transzport-modellezésben közvetlenül egyenlőre nem vagy alig alkalmazhatók (TAMÁS et. al., 2002).

A térinformatikai rendszerek és a hidrodinamikai és transzportmodellek összeköthetőségének igényét mutatja az is, hogy az újabb modellező szoftverek biztosítják az adatcsere lehetőségét az említett GIS rendszerekkel, sőt egyes programok egyszerű térinformatikai modullal is rendelkeznek, melynek célja a koncepcionális modell kialakításának támogatása. Ezen rendszerek a modellkoncepció megadását követően

automatikusan hozzák létre a használatra kiválasztott numerikus számítást elvégző szoftver részére a modelladat-rendszert. Ennek az automatizmusnak ugyanolyan hátrányai vannak, mint az autokalibrációnak, nevezetesen, hogy kevéssé befolyásolható az, hogy az alapadat-rendszer alapján hogyan alakuljon ki a modelladat-rendszer, azaz a rendszer „tudását” nem a modellező szakember ismeretei és ötletei, hanem a programot készítő munkacsoport felkészültsége és az általuk figyelembe vett szituációk összessége határozza meg.



55. ábra
Geográfiai Információs Rendszer és a transzportmodell összeillesztése
(BIESHEUVEL és HEMKER, 1993)

8. A Processing MODFLOW for Windows (PMWIN) környezet bemutatása

A Processing MODFLOW for Windows (PMWIN) egy teljes, háromdimenziós környezet, talajvíz-áramlási (hidrodinamikai) és transzport-modellezési feladatok megoldásához. Jelen fejezetben a PMWIN 5.x verziójú, Windows 3.1, 9x és XP alatt futó verzióját mutatjuk be.

A PMWIN program professzionális grafikus megjelenítést, véges differencia módszert alkalmazó hidrodinamikai modellt (MODFLOW), a hidrodinamikai és a transzportmodell kalibrációjára szolgáló inverz megoldást használó eszközt (PEST és UCODE), részecske-követési, egyben advektív transzport modellt (PMPATH), véges differencia elven működő, valamint a karakterisztika módszerét használó transzportmodelleket (MT3D, MOC2D, MT3DMS, és számos további hasznos modellezési eszközt tartalmaz.

A grafikus megjelenítés kényelmes modellezési környezetet biztosít. A grafikus felületre importálható DXF vektorgrafikus és BMP rasztergrafikus állomány. A készített modell méretét a gyakorlatban elsősorban a rendelkezésre álló memória határozza meg, bár a készítendő modell rendelkezik tényleges méretkorlátokkal (maximálisan 1000 időlépcső, 80 modellréteg és 250000 cella modellrétegenként). A PMWIN környezetben izovonalas és/vagy színskálázott térképeket lehet készíteni mind a bemeneti adatokból, mind a számítási eredményekből. Az időben változó depressziós teret vagy koncentráció—eloszlásokat a animációk formájában is meg lehet tekinteni. Az eredményeket bemutató ábrákat sokféle file formátumba lehet elmenteni, úgymint pl. Golden Software SURFER DAT (ASCII XYZ), DXF és BMP (Windows Bitmap).

A diszkrét áramlási egyenleteket a MODFLOW által felkínált megoldási algoritmusokkal lehet megoldani, a környezet valamennyi USGS MODFLOW változatot (MODFLOW-88, MODFLOW-96 és MODFLOW-2000) támogatja. A számításokat permanens és nem permanens állapotú rendszerekre egyaránt elvégezhetjük.

A PMWIN az alapcsomagokon kívül további hét MODFLOW csomagot támogat: az időben változó nyomású határt (Time-Variant Specified-Head (CHD1, LEAKE et al., 1991)), a direkt megoldó rutint (DE45, HARBAUGH, 1995), sűrűségfüggő hidrodinamikai csomagot (DEN1, SCHAARS és van GERVEN, 1997), a függőleges gát csomagot (Horizontal-Flow Barrier (HFB1, HSIEH és FRECKLETON, 1992)), a rétegen belüli tározási csomagot (Interbed-Storage (IBS1, LEAKE and PRUDIC, 1991)), a rezervoár csomagot (RES1, FENSKE et al., 1996) és a speciális patak Streamflow-Routing (STR1, PRUDIC, 1988).

A modellparaméterek kalibrációját a PEST (DOHERTY et al., 1994) és a UCODE (POETER - HILL, 1998) programokkal történő inverz számítással is elvégezhetjük, automatikus modell-kalibrációs lehetőséget felhasználva.

A PMPATH (CHIANG - KINZELBACH, 1994, 1998)részecske követő modullal a hidrodinamikai modellel számított depressziók és piezometrikus szintek éppúgy megjeleníthetők, mint az áramlási sebességtérben felvett áramvonalak térbeli képe. Lehetőség van a rendszerben vízrészecskék kijelölésére, majd a víz utjának áramlás

irányába, illetve azzal szemben történő követésére is. A program különböző, a képernyőn megvalósítható, grafikus lehetőségeket is kínál, beleértve a hidroizohipszák, a depresszió felületek és sebességvektorok ábrázolását.

A rendszer logikus felépítésű környezetet biztosít 3D transzportmodellek (MT3D (ZHENG, 1990), MT3DMS (ZHENG - WANG, 1998), MOC3D (KONIKOW et al., 1996)) bemeneti állományinak elkészítéséhez, majd a számítások DOS környezetben történő futtatásához, végül az eredmények megjelenítéséhez.

A modellezési eszközök tartalmaznak egy eredmény feldolgozót (**Result Extractor**), egy paraméter interpolálót (**Field Interpolator**), egy paraméter generátort sztochasztikus szimulációkhoz (**Field Generator**), egy vízmérleg számítót (**Water Budget Calculator**), egy 2D grafikon megjelenítőt (**Graph Viewer**), valamint egy bemutató eszközt (**Presentation tool)**.

A **Result Extractor** megengedi, hogy a felhasználó szimulációs eredmények közül egy-egy periódusra vonatkozó eredményeket (piezometrikus szinteket, depressziókat, a Darcy-sebességvektorok komponenseit, a felszíni vizekből származó járulékos hozamokat és koncentrációkat) válasszon ki és mentsen el további feldolgozásra. Megtekintheti grafikusan ábrázolt formában az eredményeket vagy elmentheti azokat ASCII vagy SURFER-kompatibilis adatfájlokba.

A **Water Budget Calculator** nemcsak a felhasználó által megjelölt zónák vízmérlegét számítja, hanem az ilyen zónák közötti vízmozgásokat változást is. Ez az eszköz nagyon hasznos sok gyakorlati esetben. Megengedi továbbá, hogy a felhasználó meghatározza az áramló hozamokat egy egyedi határfelületen keresztül.

A **Field Generator** árammezőket generál heterogén transzmisszivitás - vagy szivárgási tényező-érték eloszlással. Ez lehetővé teszi, hogy a felhasználó valószínűségelméleti alapon szimulálja ismeretlen kismértékű heterogenitások hatásait és befolyását. A **Field Generator** MEJÍA (1974) algoritmusát használja.

A **Graph Viewer** a szimulációs eredmények (hidraulikus nyomásszintek, depressziók és koncentrációk) időbeli változásának grafikonjait jeleníti meg.

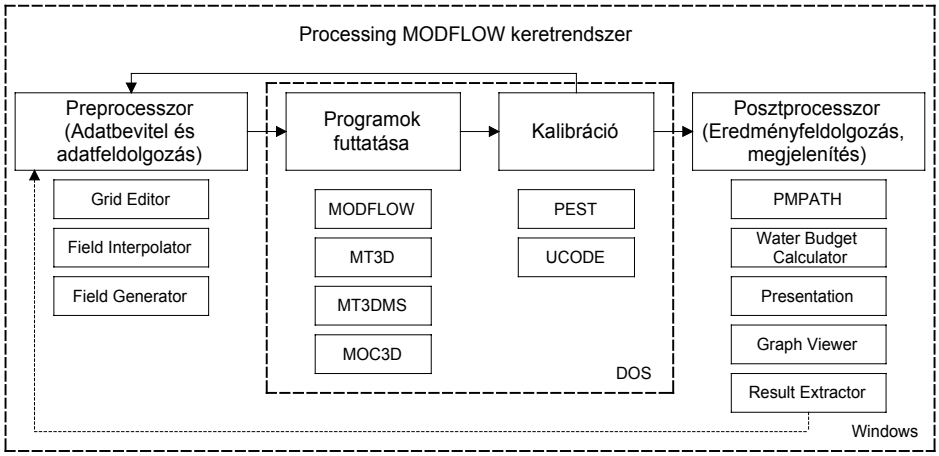
A **Presentation Tool** segítségével a bemeneti és az eredményállományok feliratozott, izovonalas térképeit lehet elkészíteni, továbbá színskálás ábrázolásra is lehetőség van. A jó minőségű grafikákat SURFER, DXF, HPGL és BMP (Windows Bitmap) formátumban lehet elmenteni. Ezen kívül lehetőség van a nem permanens számítások eredményeinek grafika-sorozatokkal történő ábrázolására, melyekkel rövid animáció készíthető.

Rendszerkövetelmények:

- PC Microsoft Windows 95/98/ME/NT 4.0/XP operációs rendszerrel,
- 16 MB RAM (32MB vagy több ajánlott),
- CD-ROM meghajtó és merevlemez,
- VGA vagy jobb felbontású monitor,
- Microsoft Mouse vagy kompatibilis egyéb egér.

8.1. Munka a PMWIN környezetben

A PMWIN számos a modellezéssel kapcsolatos program pre- és posztprocesszora. Ezen programok általában MS-DOS környezetben futó, többnyire valamilyen FORTAN nyelven írott rutinok, melyeknél az adatbevitel nehézkesen szerkeszthető, általában hosszú szöveges állományokkal történik és az eredményeket is hosszú, akár több 10 MB méretű szöveges, ritkábban bináris állományokban kapjuk meg. Mivel ezekkel a szöveges állományokkal nehéz dolgozni, ezért szükségesek azok a programok (mint a PMWIN is), melyekben a szimulált rendszer megtervezhető, majd a program elkészíti a szükséges input szövegfájlokat a FORTRAN program részére, melyek később DOS ablakban futtathatók. Az eredményként kapott állományokat ismét egy posztprocesszor feldolgozóprogrammal (PMWIN) jelenítjük meg és értékeljük ki (56. ábra).



56. ábra
A Processing MODFLOW környezet felépítése

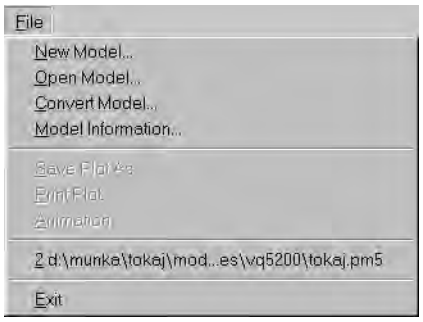
A program indítása a Start menüben a **Programok → Processing Modflow 5 → Processing Modflow** ikonnal lehetséges. A menüből közvetlenül indítható a **PMPATH** részecske-követőprogram, továbbá a **Field Generator** sztochasztikus modellező eszköz és a **Field Interpolator** interpoláló eszköz (57. ábra), de a felsorolt programokat célszerű a főprogramból megnyitni. Az indítás után a nyitóképernyő jelenik meg (58. ábra).

57. ábra
A Start menüből indítható programok

58. ábra
A Processing MODFLOW indítóképernyője

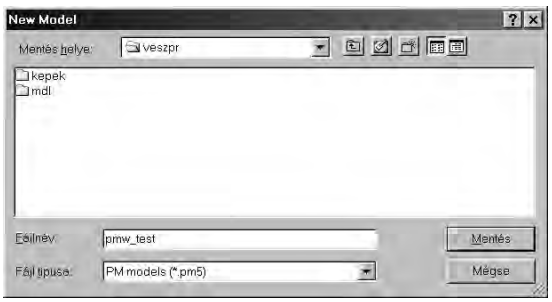
8.1.1. A menürendszer

8.1.1.1. A File menü (59. ábra)



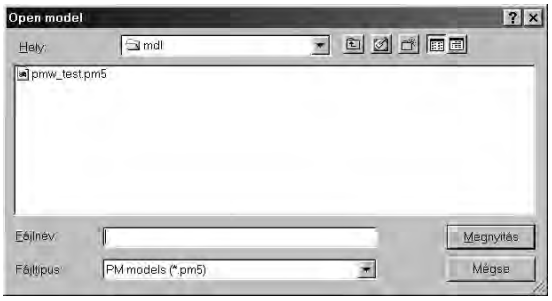
59. ábra
A **File** menü

A **File → New Model** parancs szolgál egy új adatrendszer felépítésére. Célszerű minden modellt külön könyvtárba menteni, mivel egyrészt a rendszer alkalmaz kötelező nevű állományokat, melyek több modell azonos könyvtárba írása esetén felülírják egymást, másrészt mert egy-egy adatrendszer rengeteg állományból áll, melyek strukturálása célszerű. A parancs választása esetén a ***New Model*** dialógusablak nyílik meg, ahol egy nevet kell adni a készítendő projektnek, melyet egy pm5 kiterjesztésű állományban tárol a rendszer (60. ábra)



60. ábra
A ***New Model*** dialógusablak

A **File → Open Model** parancs szolgál egy meglévő, korábban létrehozott adatrendszer megnyitására. A parancs választása esetén az ***Open Model*** dialógusablak nyílik meg, ahol kiválaszthatjuk a megnyitandó projekt nevét (61. ábra).

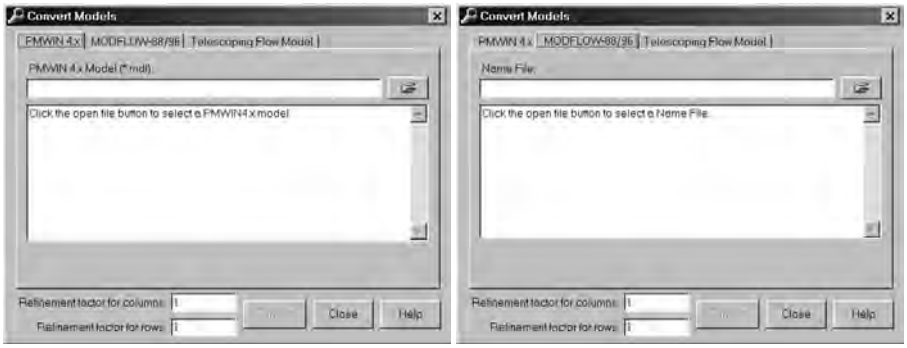


61. ábra
Az ***Open Model*** dialógusablak

A **File → Convert Model** parancs három célra szolgál: Itt konvertálhatjuk a korábbi, 4.x verziójú modelleket, valamint MODFLOW-88 vagy MODFLOW-96 formátumú állományokat 5.x verziójú formátumra, a szükséges állománynév megadása vagy a gomb megnyomása után történő kiválasztás után. Az eredeti modell finomítható, oly módon, hogy megadhatjuk, hogy egy-egy elemet hány sorra (***Refinement factor for rows***) és oszlopra bontson a rendszer fel (***Refinement factor for coloumns***) (62. ábra).

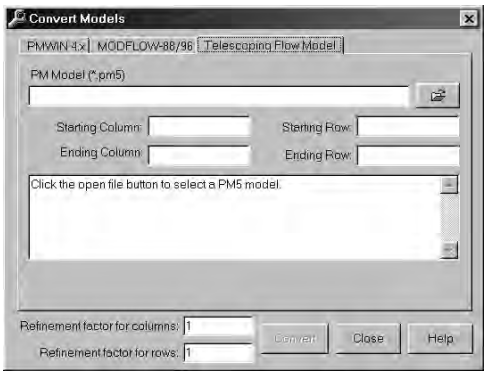
PMWIN 4.x és MODFLOW-88/96 állományok konvertálására szolgáló ablakok

A **File → Convert Model** parancs harmadik lapja a ***Telescoping Flow Model*** egy meglévő 5.x verziójú modell részmodelljét készíti el (63. ábra). Ehhez meg kell adnunk egyrészt a meglévő modell nevét a ***PM Model (*.pm5)*** szövegdobozba, másrészt a készítendő modellkivágat első és utolsó sorának és oszlopának (***Starting coloumn, Ending Coloumn, Starting row, Ending row***) sorszámát a meglévő modell elemszámozása szerint, de a korábbiakhoz hasonlóan elemsűrítés (***Refinement factor***) is kérhető. A készített részmodell peremein a rendszer maga határoz meg peremfeltételeket, amik szükség szerint korrigálandók.



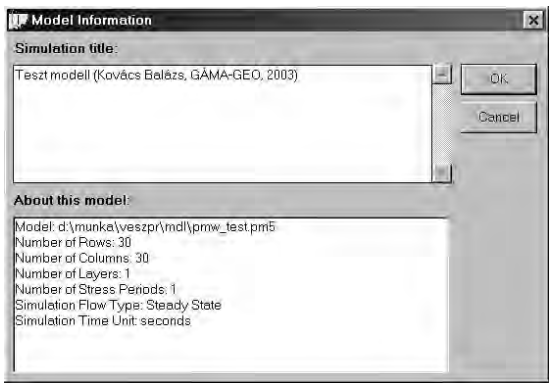
62. ábra

Amennyiben sűrítést kérünk, akkor a rendszer helyesen kezeli az intenzív és extenzív mennyiségeket, aminek következménye, hogy pl. ha egy cellát, amiben 100 m^3/d vízkivételt irányoztunk elő, négyfelé bontunk, akkor 4 db 25 m^3/d hozammal jellemzett kisebb elemet kapunk. Mindezen túlmenően a ***Telescoping Flow Model*** ablakkal létrehozott új modellt célszerű áttekinteni, mert kerülhetnek az új modellbe logikus, ugyanakkor szándékunktól eltérően kialakított sajátosságok, melyeket ezúton lehet korrigálni.



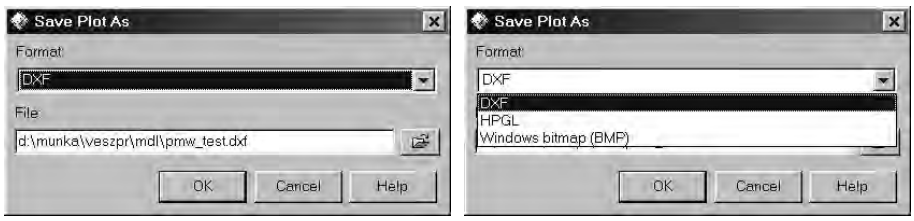
63. ábra
A részmodell kialakítása

File → Model information paranccsal a modell legfontosabb aktuális jellemzőit nézhetjük meg, illetve a ***Simulation title*** ablakban a modellre vonatkozó saját megjegyzéseket is beírhatjuk. A legfontosabb információkat az „erről a modellről" (***About this model***) ablakban láthatjuk: a projektfájl neve és elérési útja, sorok, oszlopok és rétegek száma, időlépcsők száma, permanens vagy nem permanens modell, az idő mértékegysége (64. ábra).



64. ábra
A modelladatokat leíró tábla

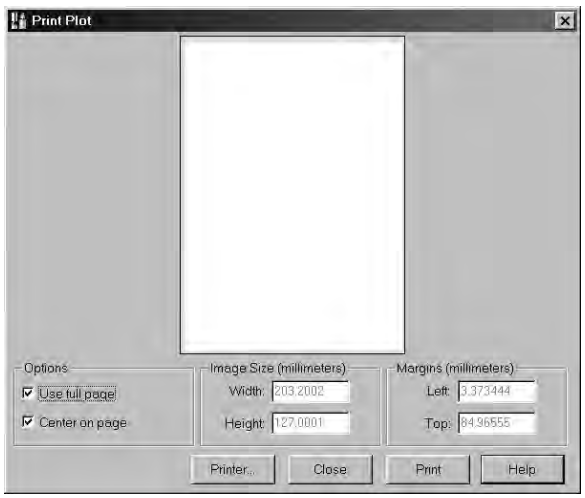
A **File → Save Plot As...** paranccsal a képernyőn lévő aktális tartalmat lehet elmenteni Windows Bitmap (*.BMP), Hewlett-Packard Graphics Language (HPGL) és AutoCAD drawing exchange formátumba (*.dxf) (65. ábra). Az az első raszter-, az utóbbi kettő vektrografikus formátum, így a formátumot a további feldolgozási célnak megfelelően célszerű eldönteni. A ***File*** szövegdobozban adhatjuk meg a készítendő állomány nevét.



65. ábra
Grafika mentési lehetőségek Save Plot As paranccsal

File → Print Plot paranccsal az aktuális grafika nyomtatása történhet (66. ábra). A legfontosabb opciók a teljes oldalt kitöltő nyomtatás (***Use full page***) és a lapközépre helyezett nyomtatás (***Enter on Page***). Amennyiben nem teljes oldalra széthúzva és/vagy nem középre nyomtatunk, akkor a kép szélességét és hosszúságát mm-ben (***Image Size (millimeters): Width*** és ***Height***) és a bal és felső oldali margókat (***Margins (millimeters): Left*** és ***Top***) is megadhatjuk.

File → Animation paranccsal közvetlenül elérhetők a képsorozatként gyártott animációk. Mivel ezek a **Tools → Presentation** paranccsal készíthetők, ezért részletesebben ott írjuk le.

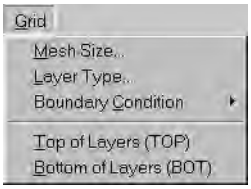


66. ábra
A grafika nyomtatása

Az **File → Animation** és a **File → Exit** parancsok között a legutóbb készített modellek elérési útjait találjuk, melyekre klikkelve ezek közvetlenül behívhatók. Egyszerre a PMWIN környezet egy modell kezelésére képes, ezért csak új ablakban elindítva a programot lehet két modellt párhuzamosan építeni. Futtatni az azonos alapértelmezésű fájlnevek miatt nem lehet, a környezet egy másik modell aktuális futása esetén hibaüzenetet küld és engedélyt kér a futó alkalmazás megszakítására. Mindezt nem célszerű megtenni, ezért két modell párhuzamos kezelése csak különösen indokolt esetben célszerű.

File → Exit paranccsal a PMWIN környezet elhagyható.

8.1.1.2. A Grid menü

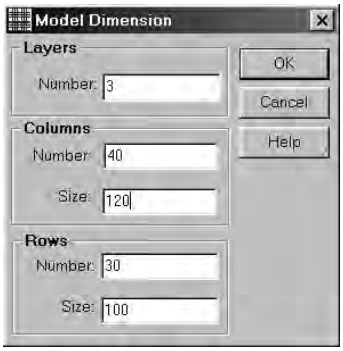


67. ábra
A Grid menü

A **Grid** menüben a szimulálandó rendszer geometriájának és alapvető tulajdonságainak megadása válik lehetővé.

A **Grid → Mesh Size...** paranccsal a modell térdimenzióinak méreteit, majd az egyes cellák méreteit állíthatjuk be. Amennyiben a modellt éppen most hozzuk létre, akkor először a ***Model Dimension*** nevű ablakot kell kitölteni, ahol megadhatjuk a rétegek

számát (***Layers***) az oszlopok (***Coloumns***) darabszámát (***Number***) és méretét (***Size***), illetve a sorok (***Rows***) darabszámát (***Number***) és méretét (***Size***) (68. ábra). Itt jegyezzük meg, hogy a modellezés előtt eldöntendő a hosszúság alkalmazott mértékegysége, ami a későbbiekben részben meghatározza a további paraméterek esetében alkalmazott mértékegységeket is. Pl. ha a hosszúság egysége méter, akkor a szivárgási tényezőt m/d, m/s, m/év dimenzióban kell megadni, ha centiméter, akkor cm/d, cm/s, cm/év az alkalmazandó mértékegység. Hasznos a hosszúságot méterben mérni, mert így használhatjuk a legjobban érzékelhető SI mennyiségeket.

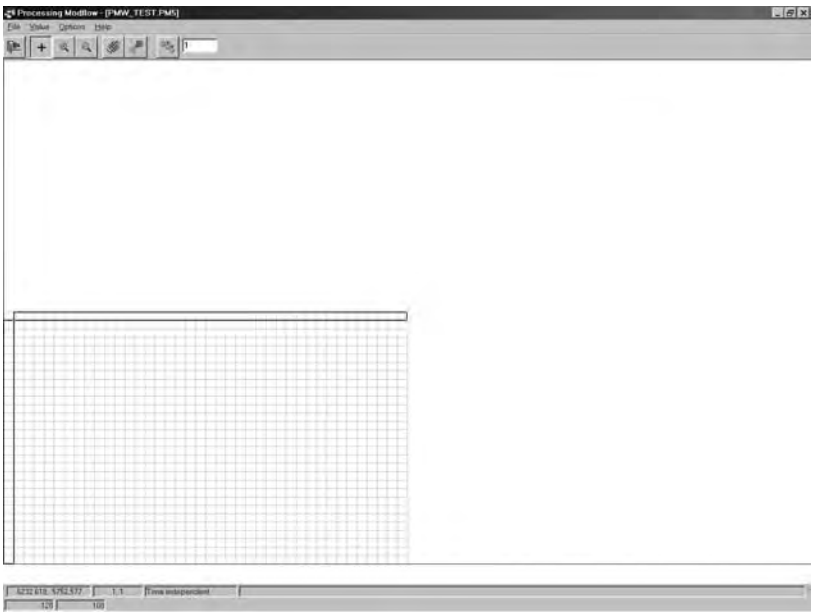


68. ábra
A modell elemrendszerének előzetes definíciója

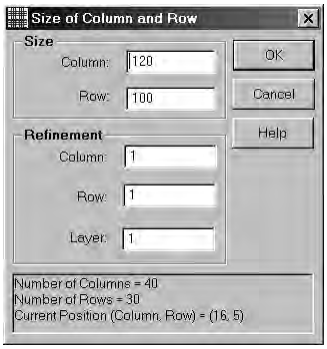
A modellben később lehetséges az elemek méretét változtatni, a számukat növelni, éppúgy mint a modellrétegeket függőlegesen több részre bontani. Ez azonban csak előre nagyon átgondoltan történhet, és a gyakorlat azt mutatja, hogy főként a rétegszám tekintetében hasznos, ha további változtatás nem történik. Ezután a **Grid Editor** programrész egy módosított változata jelenik meg a 69. ábra szerinti ablakban.

Itt az egyes cellákon a kurzorral mozoghatunk vagy az egérrel rákattintva jelölhetjük ki bármely elemet. Csak akkor lehetséges az egyes elemek kijelölése, ha a kijelölés gombot + bekapcsoljuk. A kijelölt elemek koordinátája az ablak alsó szegélyén megjelenik a kurzor aktuális pozíciójával együtt.

A cellák méreteit a cellára klikkelve, majd jobb egérgomb segítségével feljövő ablakban változtathatjuk meg (70. ábra). Ebben az ablakban, mind az elem méretét (Size: Coloumn, Row), hanem a több részre bontását is megadhatjuk a tér három irányában (Refinement: Coloumn, Row, Layer). A több részre bontás a rácsháló miatt a többi elemek méretét is befolyásolhatja. Amennyiben a több részre bontás nem működik, akkor először az ablakból kilépve e merevlemezre kell írni a háló adatait, majd a **Grid → Mesh Size...** paranccsal újra szerkeszteni és módosítani a hálót.
Az elem kijelölését követően a horizontális irányú részekre bontásra lehetőség van a Ctrl-→, Ctrl-↑ billentyűkombinációkkal, mely módosítások visszavonását a Ctrl-← és Ctrl-↓ billentyűkkel lehet elérni.



69. ábra
A modellháló kirajzolása, a modellelemek felülnézetben



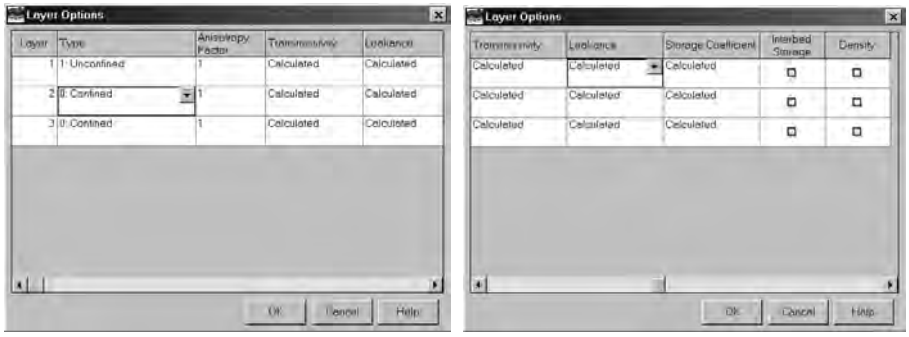
70. ábra
Elemméret megváltoztatása és az elem felosztása

Amennyiben a módosítás jelentős, akkor a 71. ábra szerinti üzenet jelenik meg a képernyőn, és felajánlja a program az aktuális helyzetnek megfelelő geometria elmentését egy külön könyvtárba, mielőtt a mentés megtörténik, így egy korábbi állapothoz vissza lehet térni. Más módon a rácsháló módosítása nem vonható vissza!!!

A PMWIN környezet lehetőséget nyújt nem a rácsháló északi iránytól különböző tájolására, illetve tetszőleges koordinátarendszer (pl. EOV) alkalmazására, amit részletesen a rácsháló tájolása fejezetben, később tárgyalunk.

71. ábra
A korábbi állapot mentésére lehetőséget adó ablak

A **Grid → Layer Type...** paranccsal az egyes rétegek tulajdonságait adhatjuk meg. A parancs hatására a ***Layer Options*** ablak nyílik meg (72. ábra), ahol láthatók az egyes rétegek tulajdonságai táblázatos formában. A réteg típusai (***Type***): 0: zárt tükrű, 1: nyílt tükrű, 2: Vegyes tükrű (transzmisszivitás közel állandó), 3. Vegyes tükrű (transzmisszivitás változó). Az anizotrópia (***Anizotropy factor***) tényező a két horizontális főirány (x és y) tekintetében rétegenként megadható, továbbá kényelmi funkció, hogy előírható, hogy a transzmisszivitás (***Transmissivity***) értékeket és a függőleges vízforgalom mérőszámát (***Leakance***) a szivárgási tényező és a geometriai adatokból, a tárolási tényezőt (***Storage Coefficient***) a fajlagos tárolási tényezőből és a rétegvastagságból a szoftver számítsa (***Calculated***) vagy a felhasználó adja meg (***User defined***). Ez utóbbi lehetőség arra is alkalmat ad, hogy ne csak egymással érintkezésben lévő vízadó és vízrekesztő testeket, hanem egymástól ismert távolságra található vízadókat is modellezhessünk. Egyben valamennyi rétegnél megadhatjuk, hogy az IBS1 és a DEN csomagokkal figyelembe kívánjuk e venni a rétegen belüli tározódást, illetve a sűrűségfüggő vízmozgást.



72. ábra
A Layer Options dialógusablak

A **Grid → Boundary Condition** paranccsal az alkalmazott véges differencia modell peremfeltételeit állíthatjuk be. A két almenüvel egyrészt a MODFLOW IBOUND paraméterét, másrészt az MT3D/MT3DMS ICBOUND paraméterét lehet megadni a később ismertetett Grid Editor segítségével (73. ábra). A készített mátrixokban az aktív, azaz változó potenciálú és koncentrációjú cellákat 1-gyel, az állandó nyomású és koncentrációjú cellákat –1-gyel jelölik, az inaktív, azaz a számításból kizárt részeket pedig 0-val jelölik.

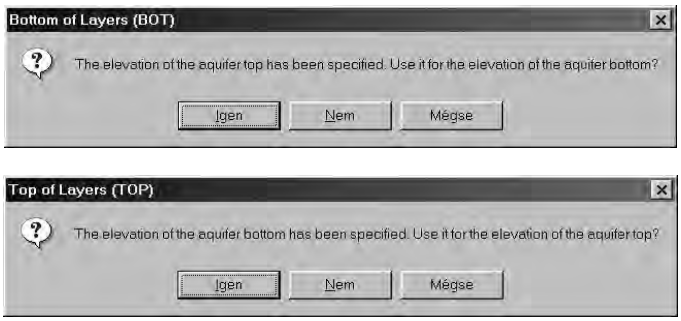
73. ábra
A peremfeltételek kiválasztására szolgáló almenü

A **Grid → Top of Layers (TOP)** paranccsal a rétegek fedőszintjeit adhatjuk meg. Az értékek cellákhoz rendelését a Grid Editorral tehetjük meg, amit később ismertetünk.

A **Grid → Bottom of Layers (BOT)** paranccsal a rétegek fedőszintjeit adhatjuk meg. Az értékek cellákhoz rendelését a Grid Editorral tehetjük meg, amit később ismertetünk.

Amennyiben olyan rendszert építünk fel, ahol az egyes rétegek egymással érintkeznek akkor egy felső réteg feküszintjei megegyeznek az alatta található réteg fedőszintjeivel. Ezt a program támogatja oly módon, hogy amennyiben vannak megadott fedő vagy feküszintek, akkor egy dialógusablak (74. ábra) segítségével lehetővé teszi, a közös fedő vagy feküszintek generálását.

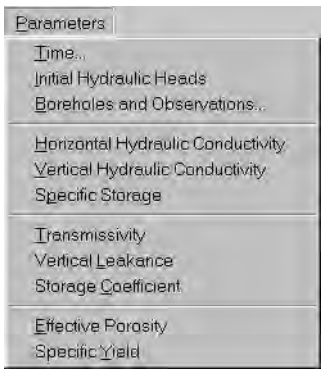
Amennyiben különálló vízadókat modellezünk, akkor a **Nem** gombbal megtarthatjuk az eltérő fekü és fedőszinteket, de ebben az esetben a ***Layer Options*** dialógusablakban az adott rétegek közötti vertikális vízforgalom mértékét (***Leakance***) a felhasználónak kell megadnia (***User defined***).



74. ábra
A fedőszintek és a feküszintek illesztését automatizáló dialógusablak

8.1.1.3. A Parameters menü

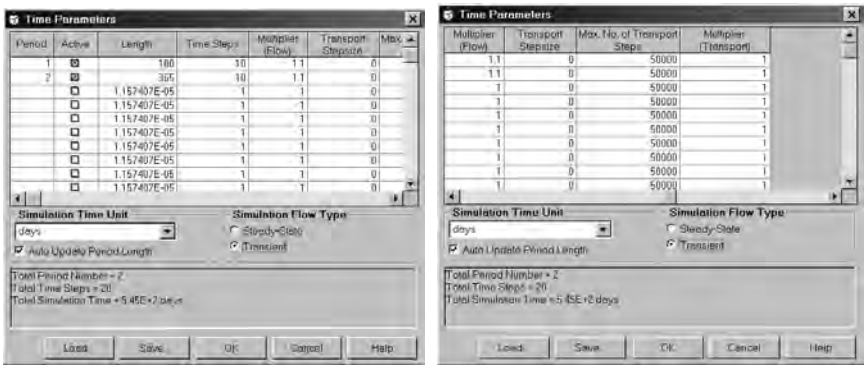
A **Parameters** menüben (75. ábra) a rendszer Grid menüpontban megadott elemeinek általános földtani és vízföldtani jellemzőit adhatjuk meg, illetve az ezen jellemzők megadásához szükséges idő dimenzióját. A rendszer mértékegység konzekvens, a Grid menü alkalmazásakor magunk döntöttünk a hosszúság mértékegységéről [L] és itt az idő [T] mértékegységének megadására is kényszerülünk. Amennyiben ezt is eldöntöttük (általában s vagy nap mértékegységet lehet javasolni), akkor a szivárgási tényezőket [L]/[T], a transzmisszivitást $[L]^2/[T]$ mértékegységre átváltva kell megadni.



75. ábra
A Parameters menü

A **Parameters → Time** paranccsal az idővel kapcsolatos beállítások érhetők el (76. ábra). Az ablakban először az idő mértékegységét célszerű beállítani (***Simulation Time Unit***), ahol a másodperc (***seconds***), perc (***minutes***), óra (***hours***), nap (***days***) és év (***years***) közül választhatunk. Mindent összevetve a legjobban értelmezhető egységeket nap egység választás esetén kapunk: szivárgási tényező [m/d], transzmisszivitás [m^2/d], eltelt idő [d], ugyanakkor pl. a beszivárgást [m/d] kell megadnunk [mm/év] helyett. Másodszor a rendszer típusát (***Simulation Flow Type***) kell megadni, ami lehet permanens állapot (***Steady-state***) vagy nem permanens állapot (***Transient***). Permanens állapotban az időbeli változások elhanyagolhatóak, az adott helyzetben kialakul egy dinamikus egyensúlyi állapot, melyhez tartozó nyomásszinteket számítjuk. Nem permanens helyzetben az időben változó depressziós teret és koncentráció-eloszlásokat számítjuk.

A nem permanens folyamatokat azonos jellemzőkkel leírható periódusokra (***Period***) bontjuk, melyeket további időlépcsőkre bonthatunk. A periódusok közül az aktuális számítások során figyelembe vetteket aktívnak (***Active***) jelöljük ki. A periódusok hosszát (Length) a választott mértékegységben adjuk meg. Ezt a periódust bonthatjuk az időbeli folyamatok jobb követése érdekében időlépcsőkre (***Time Steps***), melyeknek a darabszámát a 76. ábra táblázatába be kell írni. Az időlépcsők lehetnek azonos hosszúak, vagy kezdetben rövidebbek majd egyre hosszabbak, amit egy szorzótényezővel (***Multiplier(Flow)***) állítunk be. A szorzótényező azt mutatja meg, hogy egy időlépcső hányszorosa legyen a következő lépcső hossza. Általában 1-1,15 közötti időlépcső szorzótényezők elegendően hosszúak. Konstans időlépcső esetén a szorzótényező 1. Beállíthatjuk még a transzportmodellnél alkalmazott időlépcsőt (***Transport Stepsize***), azonban itt javasolt 0 értéket beírni, mert akkor a gép számítja a program numerikus legkisebb numerikus hibák mellett történő futatásához szükséges időlépcsőket. Megadható továbbá a szennyeződés terjedési számítások során elérhető maximális időlépcsőszám (***Max. No. of Transport Steps***), amire a túl kicsi időlépcsők esetén megvalósuló hosszadalmas számítások elkerüléséhez van szükség. Ugyancsak megadható az időlépcső szorzótényező a transzportmodellhez (***Multiplier (Transport)***) is.

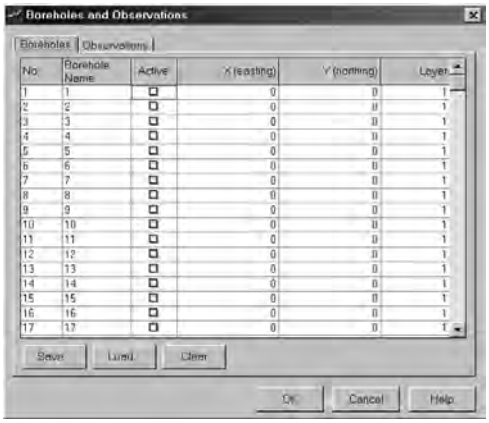


76. ábra
Az idő-paraméter beállítására szolgáló ablak

A **Parameters → Initial Hydraulic Heads** menüben a hidrodinamikai számítások kezdeti feltételét jelentő nyugalmi nyomásszint-eloszlásokat adhatjuk meg elemenként. Az adatbevitelt a később bemutatott Grid Editorral lehet elvégezni.

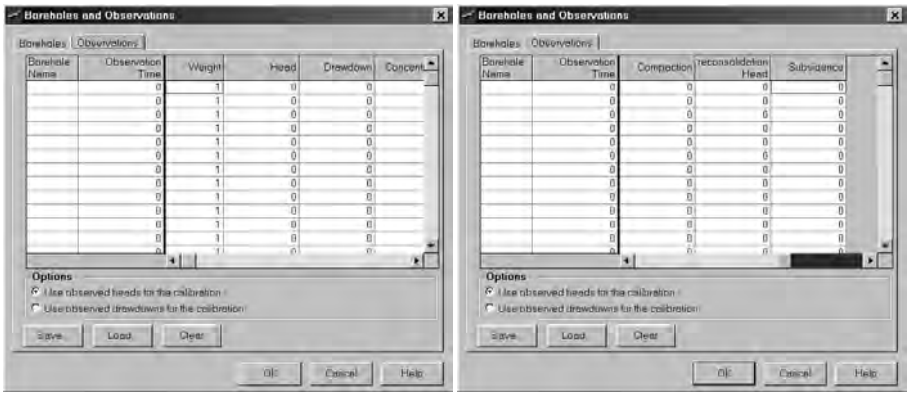
A **Parameters → Boreholes and Observations** menüben két táblázattal adhatjuk meg a megfigyelő kutak (***Boreholes***) és az észlelések (***Observations***) adatait, melyeket később az automatikus kalibrációhoz (PEST, UCODE), illetve a modellszámítás eredményeinek értékelésénél használhatunk fel.

A figyelőkút táblázatban (77. ábra) egy sorszán (***No.***) azonosítja a kutat, mellette a kút jelölését is beírhatjuk (***Borehole Name***), egy adott feladat szempontjából felhasználandó kutakat aktiválni kell az ***Active*** dobozzal. Megadandó a kút helyzete X koordináta (=EOV Y) (***Easting***), Y koordináta (=EOV X) (***Northing***) és a kúttal szűrőzött réteg sorszáma (***Layer***).



77. ábra
A figyelőkutak adatai

Az észlelések táblázatában (78. ábra) a kút jelölése az azonosító, majd megadandó az időpont (***Observation Time***) az észlelés pontosságát jelölő súlyfaktor (***Weight***) is. A súlyszám minél magasabb, annál jobban veszi azokat figyelembe a program az automatikus kalibráció során, értelemszerűen a –ás súly az adat figyelmen kívül hagyását jelenti. Egy kúthoz több időpontbeli észlelés is tartozhat. Az észlelések lehetnek: nyomásszintek (***Head***), depressziók (***Drawdown***), koncentrációk (***Concentration***), összenyomódási értékek (***Compaction***), konszolidációs nyomás értékek (***Preconsolidation Head***) és felszínsüllyedés értékei (***Subsidence***).



78. ábra
Az észlelések táblázatai

A kalibrációhoz szükséges információt a táblázat alján kell beállítani: vagy az észlelt nyomásszintek vagy az észlelt depressziók alján történik a kalibráció (***Use observed heads for the calibration*** vagy ***Use observed drawdowns for the calibration***).

A **Parameters → Horizontal Hydraulic Conductivity** menüben a vízszintes szivárgási tényezők eloszlását adhatjuk meg elemenként. Az adatbevitelt a később bemutatott ***Grid Editor***ral lehet elvégezni.

A **Parameters → Vertical Hydraulic Conductivity** menüben a függőleges szivárgási tényezők eloszlását adhatjuk meg elemenként. Az adatbevitelt a később bemutatott ***Grid Editor***ral lehet elvégezni.

A **Parameters → Specific Storage** menüben a fajlagos tárolási eloszlását adhatjuk meg elemenként. Az adatbevitelt a később bemutatott ***Grid Editor***ral lehet elvégezni.

A **Parameters → Transmissivity** menüben a transzmisszivitás eloszlását adhatjuk meg elemenként. Az adatbevitelt a később bemutatott ***Grid Editor***ral lehet elvégezni. Nem kell az adatbevitelt elvégezni, ha korábban a rétegek tulajdonságai (***Layer Options,*** 72. ábra) dialógusablakban megadtuk, hogy a vízszintes szivárgási tényezők és a modellgeometria alapján történjék az értékek számítása.

A **Parameters → Vertical Leakance** menüben a függőleges átszivárgási tényezők (b érték) eloszlását adhatjuk meg elemenként. Az adatbevitelt a később bemutatott ***Grid Editor***ral lehet elvégezni. Nem kell az adatbevitelt elvégezni, ha korábban a

rétegek tulajdonságai (***Layer Options,*** 72. ábra) dialógusablakban megadtuk, hogy a vízszintes szivárgási tényezők és a modellgeometria alapján történjék az értékek számítása. Kötelező az értékeket megadni, ha a modellezett rétegek nem egymáson nyugszanak és közöttük valamilyen nem modellezett vízrekesztő réteg van. Ekkor ezt az értéket külön ki kell számítani és meg kell adni.

A **Parameters → Storage Coefficient** menüben a tárolási tényező eloszlását adhatjuk meg elemenként. Az adatbevitelt a később bemutatott ***Grid Editor***ral lehet elvégezni. Nem kell az adatbevitelt elvégezni, ha korábban a rétegek tulajdonságai (***Layer Options,*** 72. ábra) dialógusablakban megadtuk, hogy a fajlagos tárolási tényezők és a modellgeometria (rétegvastagság) alapján történjék az értékek számítása.

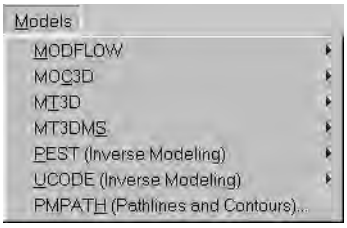
A **Parameters → Effective porosity** menüben a szabad hézagtérfogat értékek eloszlását adhatjuk meg elemenként. Az adatbevitelt a később bemutatott ***Grid Editor***ral lehet elvégezni.

A **Parameters → Specific Yield** menüben a fajlagos hozam értékek eloszlását adhatjuk meg elemenként. Az adatbevitelt a később bemutatott ***Grid Editor***ral lehet elvégezni.

8.1.1.4. A Models menü

A Models menün keresztül érjük el a Grid menüben leírt geometriájú, a Parameters menüben megadott tulajdonságokkal jellemezhető porózus közegben lejátszódó hidrodinamikai és transzportfolyamatokat leíró modellek speciális lehetőségeit.

Az I. kötet csak a hidrodinamikai számításokhoz szükséges programok leírását adja meg, a transzportszámítás programjainak magyar nyelvű leírását a II. kötet tartalmazza.



79. ábra
A Models menü

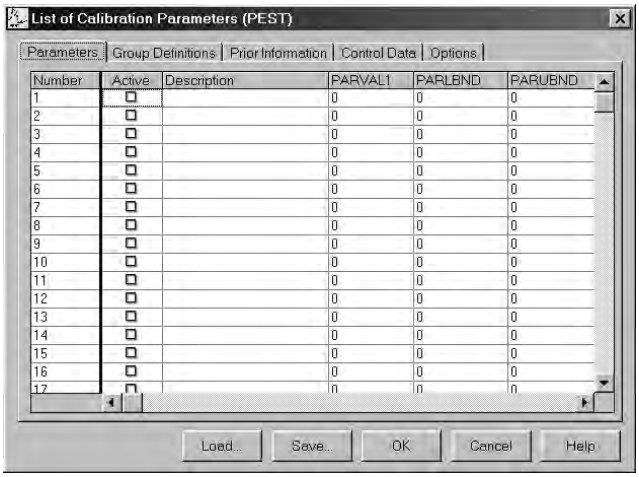
A **MODFLOW** 3D, telített közegben lejátszódó hidrodinamikai folyamatokat leíró programcsomag. A MODFLOW moduláris felépítésű FORTRAN program, melyhez speciális helyzeteket leíró programcsomagok (***Packages***) csatlakoztathatók. Itt csak a legismertebb csomagokkal foglalkozunk.

A **MOC3D** transzportmodell a karakterisztika módszerének segítségével oldja meg a transzport egyenletet. A karakterisztika módszerének alkalmazásához a Grid menüben definiált elemosztást használja fel.

Az **MT3D/MT3DMS** programok a MODFLOW-hoz fejlesztett transzportmodellek. A két program abban különbözik egymástól, hogy az MT3DMS többkomponensű (kompetitív) transzport számítására alkalmas. A programban többfajta módszer alkalmazására van lehetőség (véges differencia módszer, karakterisztika módszerének két változata). A megoldás során lehetőség van az advektív-diszperzív transzport, a lineáris és nem lineáris adszorpció és a bomlás figyelembe vételére is.

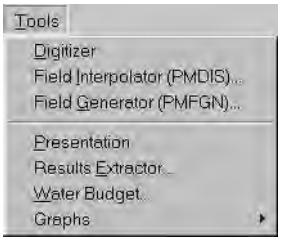
A **PEST** és az **UCODE** inverz modellező eszközök, melyekkel egyes paraméterek számíthatók. A számítandó paramétereket sorszámokkal kell megjelölni, melyeket valamennyi adatbeviteli mezőnél egy paraméterszám (***Parameter number***) jelöl. A két program futtatása előtt egy paraméter listát (***Parameter list,*** 80. ábra) kell összeállítani, melyet a **Models → PEST → Paraméter List,** illetve **Models → PEST → Paraméter List** parancsokkal lehet elérni.

A listán a paraméter száma (***Number***) az az érték, amelyiket a változtatandó, azaz optimalizálandó paraméter definíciójakor a paraméterszámnak (***Parameter Number***) megadtunk, adható hozzá egy rövid leírás (***Description***) megadandó az optimalizáláshoz használandó kezdőérték (***PARVAL1***) és az értéktartomány alsó (***PARLBND***) és felső (***PARLBND***) határa, ahol az optimális érték egyáltalán keresendő. A **Group Definitions** lapon arra nézve adhatunk utasítást, hogy milyen úton keresse az optimális értéket a program, a **Prior Information** lapon pedig a keresendő paraméterek között fennálló előzetes kapcsolatokat írhatjuk le matematikai formában, pl. az egyik képződmény szivárgási tényezője kétszerese a másikának, stb.. A **Control Data** a program kereső algoritmusának paramétereit adja meg, léteznek alapértelmezett értékek, de ezeket a gyorsabb vagy jobb keresés érdekében meg lehet változtatni. Az **Options** lap pedig az eredmények megjelenítésére, mentésére vonatkozó lehetőségeket kínál fel.



80. ábra
A paraméterlista felépítése

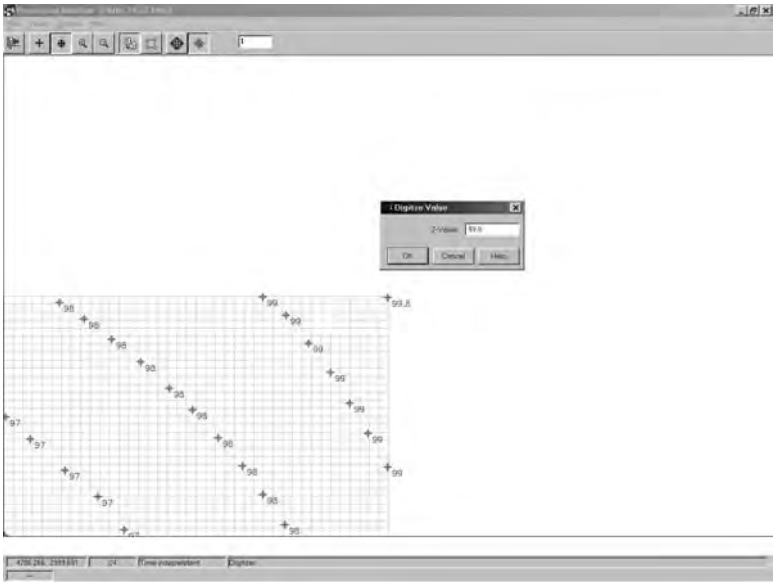
8.1.1.5. A Tools menü



81. ábra
A Tools menü

A **Tools → Digitizer** menüvel egy speciális **Grid Editor** ablak (82. ábra) érhető el, ami lehetővé teszi pontok digitalizálását a modellezett térrészen és a pontokhoz értékek rendelését. A digitalizált pontok és értékek elmentése is lehetséges, ezeket később a **Field Interpolator**ral lehet a modell felépítéséhez felhasználni. A digitalizáló használatát bemutató példát a II. kötet tartalmaz.

Az ablakban a digitalizálási képességet a digitalizáló gomb benyomásával lehet aktívvá tenni. Ezután az egérrel a modellezett térre kattintva bárhova pont helyezhető el. A lehelyezett pontra jobb egérrel kattintva a hozzárendelt érték adható meg. Egy-egy pont törlése a lenyomott CTRL billentyű esetén végzett klikkeléssel lehetséges. A digitalizáló fájlműveleti parancsai a **Value → Points** menüpont alól érhetők el.



82. ábra
A digitalizáló ablak

(Tools → Digitizer →)Value → Points → Delete all menüponttal az összes digitalizált pont egyszerre törölhető.

(Tools → Digitizer →)Value → Points → Save as menüponttal az összes digitalizált pont egy xyz kiterjesztésű ASCII szövegállományba menthető el. Ez a fileformátum a bemeneti állománya a **Field Interpolator** programnak.

(Tools → Digitizer →)Value → Points → Load menüponttal a korábban kimentett digitalizált pontok újra betölthetők, majd szerkeszthetők.

A **Tools → Field Interpolator (PMDIS)...** menüvel ismert adatok alapján (melyek lehetnek fúrási pontokból származó adatok vagy egyéb digitalizált értékek) számíthatjuk valamennyi elemre a legvalószínűbb értéket, úgy, hogy a pontokra inter- és extrapolációval egy folytonos térfelületet fektetünk és ezek adott elem középpontjára számított értékeit az elemekhez rendeljük. Az interpolációs megoldásokat korábban ismertettük.

A programnak szüksége van a projektfájl nevére (*.pm5), mert innen veszi a rácsháló alakját és az elhelyezkedését a használt koordináta rendszerben (ezt a ***Grid Position*** lapon meg is mutatja).

A Grid Position mezőt általában be sem kell állítani, hiszen a tájolást általában a modellezés korábbi szakaszában már beállítottuk. Ha ez nem volna így, akkor járjunk el úgy, ahogyan azt a környezet beállításainál leírtuk.

Továbbá meg kell adni egy bemeneti állományt, mely vagy a digitalizálóval készített állomány vagy egy alábbi szintaxisú szövegfájl.

n

x_1, y_1, z_1

x_2, y_2, z_2

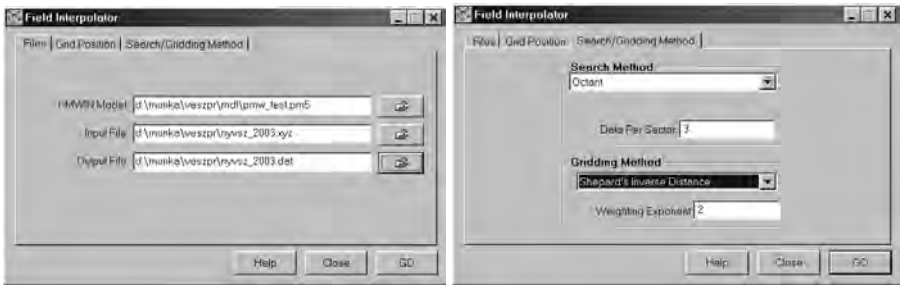
...

x_n, y_n, z_n,

ahol n az észlelési pontok száma, x_i, y_i az észlelési pontok koordinátái a tájolásnak megfelelő koordinátarendszerben, z_i az észlelt és egyben interpolálandó érték a x_i, y_i koordinátájú pontban.

Ezen állományokon túlmenően meg kell adni a ***Files*** lapon a kimeneti állomány nevét(83. ábra). A készített fájl megfelel a PMWIN ASCII mátrix formátumának, amit a ***Grid Editor*** segítségével illeszthetünk a modellbe. A ***Search/Gridding Method*** lapon állíthatjuk be a keresési módot (***Search Method***): egyszerű (***Simple***), kvadráns (***Quadrant***) vagy oktáns (***Octant***). Az egyszerű keresés annyit tesz, hogy a legközelebbi, a ***Data Per Sector*** dobozban megadott darabszámú adatból számítja az interpolált értékeket. Kvadráns keresés esetén térnegyedekre osztja a területet a vizsgált elem környezetében és valamennyi térnegyedben a legközelebbi, a ***Data Per Sector*** dobozban megadott darabszámú adatból számítja az interpolált értékeket. Oktáns keresés esetén térnyolcadokkal történik mindez.

A program négyfajta interpolációs algoritmust ismer: A Shepard-féle távolsággal fordítottan arányos súlyozás módszerét, a lineáris interpolációt alkalmazó Renka-féle háromszög-módszert, a krigelést és a kétváltozós Akima-módszert. A módszerek leírását a geostatisztikai szakirodalomban lehet fellelni. Amennyiben súlyozott átlagszámítás történik, úgy a súlyt (***Weighting Exponent***) is meg kell adni.



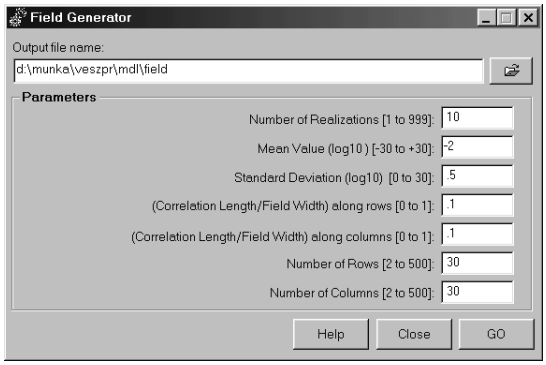
83. ábra
Az interpoláló eszköz bemeneti adatai

Valamennyi interpolációnak megvan az előnye és hátránya, kiválasztásukhoz rutinra és geostatisztikai ismeretekre van szükség. Bármilyen alapon is történik az interpolációs algoritmus kiválasztása, az eredmények izovonalas térképek formájában való ábrázolásával a helyes eredményekről való meggyőződés szükséges. Az extrapolációt lehetőleg el kell kerülni, egyébként a **Field Interpolator** alkalmazása a modell-adatrendszer belső ellentmondásosságához vezet.

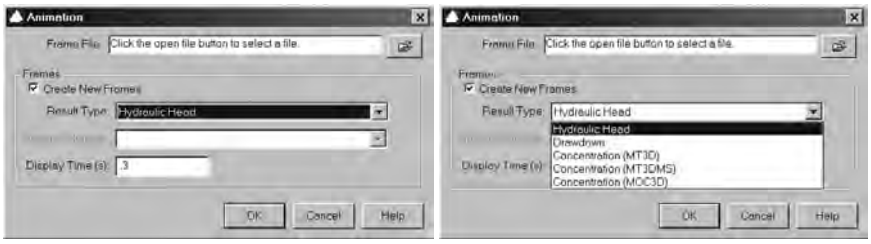
A **Tools → Field Generator (PMFGN)...** menüvel sztochasztikus modellezéshez szükséges eszközt érhetünk el (84. ábra). Az eszköz adott szórású és átlagértékű véletlen, lognormális eloszlású adathalmazokat generál. Ez alkalmas lehet szivárgási tényező vagy transzmisszivitási mezők véletlen előállítására, melyeket egymás után lefuttatva a modellnek a véletlen hatásokra való érzékenységét vizsgálhatjuk, illetve egy-egy vízszint, depresszió kialakulásának valószínűségét határozhatjuk meg. A program 1-999 közötti darabszámú (***Number of Realizations***) adatrendszert generál a kimeneti fájlnév (***Output File Name***) szövegdobozba írt állománynévvel és az állomány sorszámának megfelelő kiterjesztéssel. Megadandó az átlagérték tizes alapú logaritmusa (***Mean Value (log10)***), szórása (***Standard Deviation (log10)***) . A még szignifikáns autokorrelációhoz tartozó távolságot, azaz a hatástávolságot (***Correlation Length/Field Width***) terepi mérések alapján vagy tapasztalati úton kell meghatározni.

A **Tools → Presentation** menüvel egyrészt bemutató grafikát állíthatunk elő, másrészt számítások végzésére is alkalmas. Ez a terület olyan, amit a program számításokra nem használ, azaz állományokkal tetszés szerinti próbaműveleteket végezhetünk anélkül, hogy az a meglévő, működőképes adatrendszerben változást okozna. A menüvel egy Grid Editor ablakhoz jutunk, ahol a objektumokat, színeket állíthatunk be, izovonalas térképeket rajzolhatunk, mint ahogy az a Grid Editor leírásánál található. Többletszolgáltatás az animáció (Animation) parancs, ahol a Grid editorban beállított térképek, színskálás ábrázolások szerint lehet a nem permanens számítási

eredményekhez tartozó állapotok grafikáit egymás után előállítani, majd mint, képsorozatot animációként bemutatni.



84. ábra
A Field Generator adatlapja



85. ábra
Az animációs parancsablak

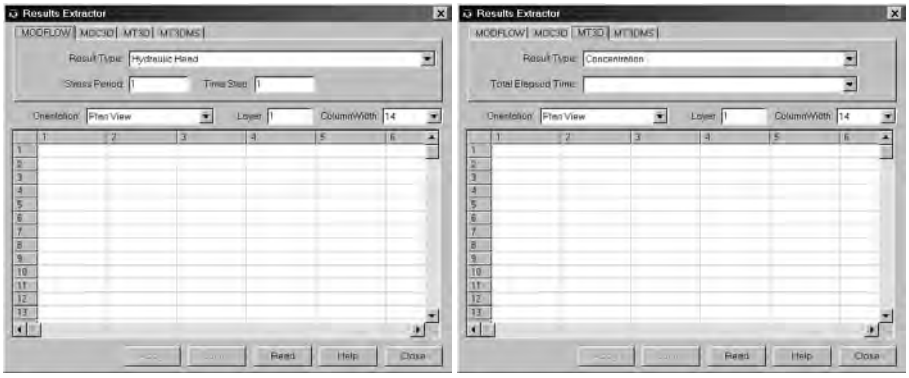
Az animációhoz egy új könyvtárat kell létrehozni és egy állománynevet kell hozzá megadni (***Frame file***). Ezt követően az új diák létrehozása (***Create New Frames***) doboznál kell döntést hozni: ha egy meglévő animációt akarunk megtekinteni, akkor üresen marad a doboz, ha egy újat szeretnénk létrehozni, akkor kipipálandó. A megjeleníteni akart eredmény típusa (***Result Type***) lehet piezometrikus szint (***Hydraulic Head***), depresszió (***Drawdown***) és koncentráció (***Concentration***), melyet az MT3D, MT3DMS vagy a MOC3D programmal hoztunk létre. Ezután a program elkészíti a diasorozatot, amit ESC megnyomásig újra és újra lejátszik (85. ábra).

A **Tools → Result Extractor...** menüvel az eredmények kinyerése történhet, a 86. ábra szerinti lapok segítségével. Valamennyi lap esetén a kiválasztott eredményeket az olvas (***Read***) gomb segítségével híjuk be a táblázatba, majd az alkalmaz (***Apply***) gombbal menthetjük el a beolvasott eredményeket az aktuális **Grid Editor** ablakba. A táblázatosan mutatott mátrix adatait a mentés (***Save***) gombbal ASCII mátrix formátumban tárolhatjuk el. A az ablak bezárása ***Close*** gombbal történik.

Az tájolás (***Orientation***) menüben adható meg, hogy a táblázat egy réteg, azaz vízszintes sík mentén mutassa a kiválasztott eredményelem alakulását (**Plan view**), megadva a kívánt réteg (**Layer**) sorszámát, vagy egy oszlop (***X-section(Coloumn***))

vagy soriránnyú (***X-section(Row)***) függőleges metszet mentén. Ez utóbbi esetekben megadandó a kiválasztott oszlop vagy sor sorszáma is. Az oszlopszélesség (***Coloumn Width***) mezőben adható meg a táblázat oszlopainak szélessége.

A hidrodinamikai számítások eredményeit a MODFLOW lapon nyerhetjük ki. Megadva a periódus (***Stress Period***) és az azon belüli időlépcső (***Time Step***) sorszámát és a kívánt eredmény típusát. Ez utóbbi lehet nyomásszint (***Hydraulic Head***), depresszsiók (***Drawdown***), koncentrációk (***Concentration***), összenyomódási értékek (***Compaction***), konszolidációs nyomás értékek (***Preconsolidation Head***) és felszínsüllyedés értékei (***Subsidence***). és valamennyi a vízmérleget módosító modellelem (nyelők/források, állandó nyomású cellák, GHB cellák, folyók, szivárgók, maradó beszivárgás, evapotranszspirációs hozamok, stb.), által szállított vízmennyiség.



86. ábra
A Result Extractor eredménykinyerő programrész

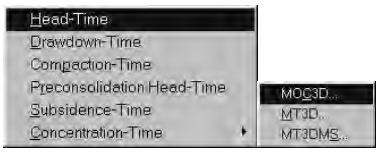
Transzportmodell számítási-eredmények kinyerése esetén megadandó az időpont (***Total Elapsed Time***), amikorra vonatkozó állapot eredményeit nyernénk ki. Az eszköz segítségével kinyerhetők a koncentrációra, az oldott és a megkötött anyagmennyiségre vonatkozó eredmények.

A **Tools → Water Budget...** menüvel egy vízmérleg meghatározó program indul el. A Vízmérleg elemeit számítja ki a teljes modellezett térre, ugyanakkor a ***Zone*** gombra kattintva a modellben zónákat jelölhetünk ki egy Grid Editor ablak segítségével, a zónákhoz egy-egy sorszámot rendelhetünk. Ekkor a program a teljes modellen kívül az egyes kijelölt zónákra is megadja a vízmérleg elemeit rétegenként.

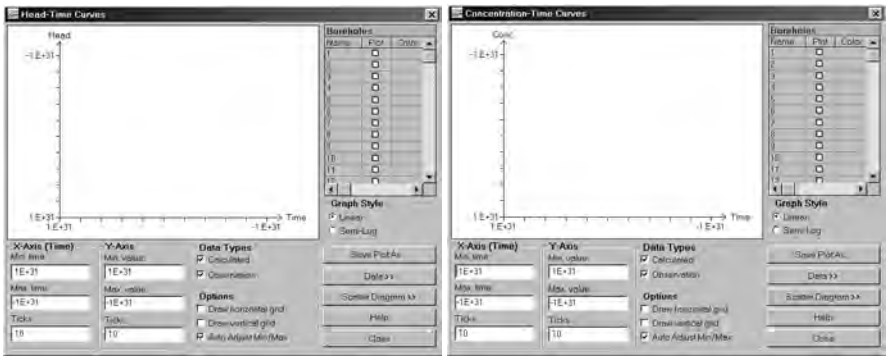
A **Tools → Graphs** menüvel az időben változó eredményeket lehet ábrázolni (87. ábra). Ezek: A nyomásszint-idő (***Head-Time***), depresszió-idő (***Drawdown-Time***), összenyomódás-idő (***Compaction-Time***), konszolidációs nyomás-idő (***Preconsolidation Head-Time***), süllyedés-idő (***Subsidence-Time***) és koncentráció-idő (***Concentration-Time***) grafikonok.

A grafikonrajzolóban a észlelőkutak (***Boreholes***) táblázatából kiválasztható az ábrán feltüntetendő kutak száma, illetve, hogy számított vagy észlelt értékek ábrázolását tervezzük (**Data Type: Calculated, Observation**). Beállíthatók az x (idő) tengely

(***x-Time Axis***) paraméterei: kezdő időpont (***Min. time***), végső időpont (***Max. time***) és osztások száma (***Ticks***), az ordinátán hasonlóan (minimum, maximum és osztás (***Min value, Max. value, Ticks***)).



87. ábra
A Tools → Graphs menü

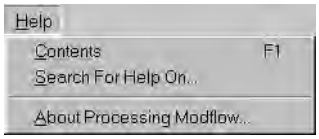


88. ábra
A grafikonrajzoló ablak

A beállításoknál megadható a vízszintes és függőleges osztóvonalak rajzolása (***Draw horizontal/vertical grid***) és a tengelyek minimum és maximum értékének automatikus változtatása (***Auto Adjust Min/Max***). A grafikon lineáris vagy szemilogaritmikus lehet (***Graph Style: Linear, Semi-Log***).

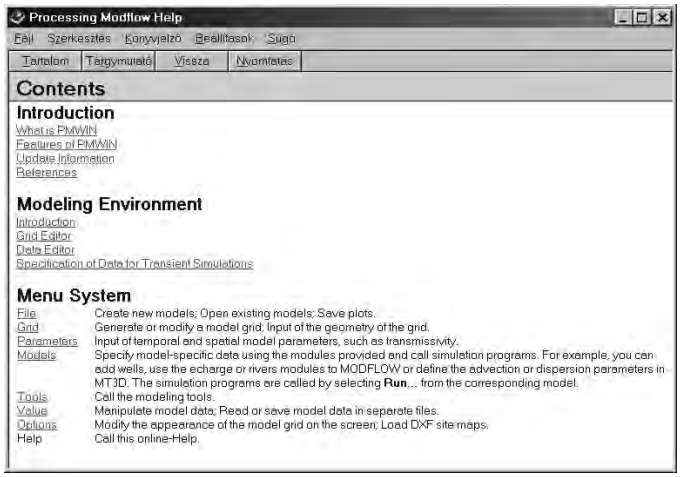
A grafikon a ***Save Plot As*** gombbal menthető el, a felhasznált adatokat a ***Data*** gombbal tekinthetjük meg, az észlelt és mért értékek pontdiagramos megjelenítését a ***Scatter Diagram*** gombbal lehet elkészíteni.

8.1.1.6. A Help menü



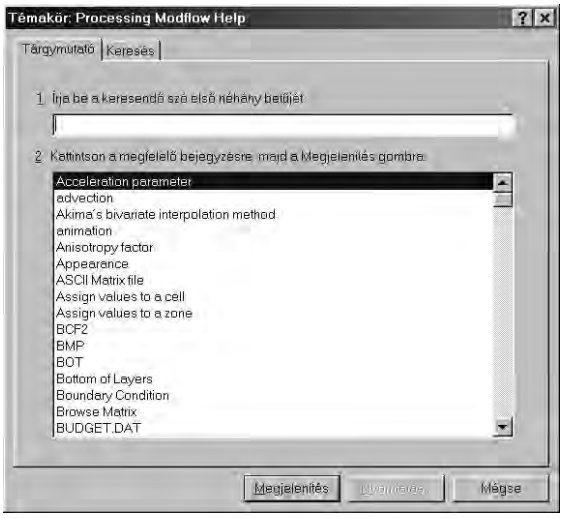
89. ábra
A Help menü

A **Help → Contents** menüvel a súgó érhető el (90. ábra). A súgó gyakorlatilag a teljes kézikönyvet tartalmazza, ugyanakkor az egyes programok komplett dokumentációja a telepítőlemezen Adobe Acrobat PDF formátumban is megtalálható.



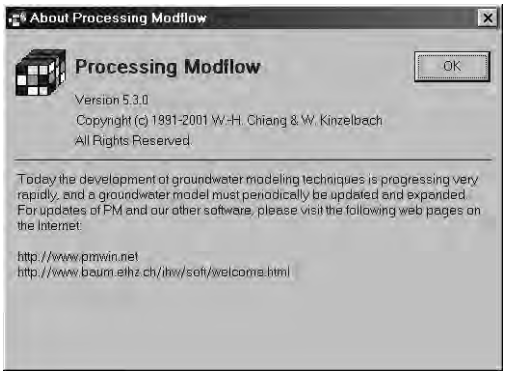
90. ábra
A Súgó kezdőlapja

A **Help → Search For Help On...** menüvel a súgóbeli keresés indítható el (91. ábra).



91. ábra
Keresés a súgóban

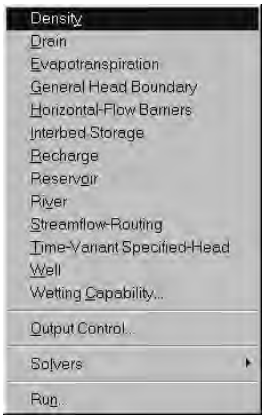
A **Help → About Processing Modflow** menüben a használt program verzióját és a szerzői jogokra és frissítési lehetőségekre vonatkozó ablak jelenik meg (92. ábra).



92. ábra
Az aktuális verzió száma és copyright üzenetek

8.2. A Legfontosabb MODFLOW csomagok

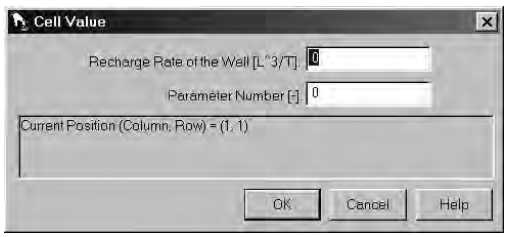
A MODFLOW csomagokat a **Modells →MODFLOW** menüből lehet elérni (93. ábra).



93. ábra
A MODFLOW csomagok menüje

8.2.1. Kút csomag (Well package)

A kút csomag ismert hozamú vízkivételek és betáplálások szimulációjára szolgál. Tekintettel arra, hogy a MODFLOW egy-egy elem vízmérlegét számítja, ezért az egyes elemekbe eső összes hozamot (az elembe eső szűrőzésű kutak együttes hozamát) (***Recharge Rate of the Well***) kell bevinni. A termelt hozamok negatív, az injektált hozamok pedig pozitív előjellel szerepelnek a vízmérlegben.



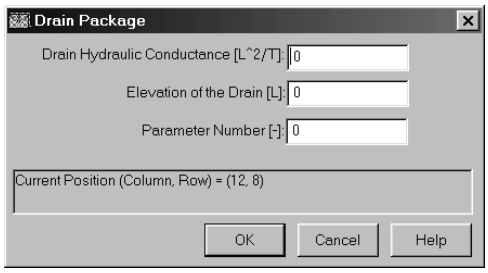
94. ábra
Értékadás a kút csomag esetén

8.2.2. Szivárgó csomag (Drain package)

A szivárgó egy olyan víztelenítő létesítmény, ami akkor lép működésbe, ha a szivárgó környezetében a talajvízszint magasabbá válik, mint a szivárgó fenékszintje. A feltételezés szerint az elvezetett víz mennyisége arányos a drén fenékszintje feletti vízoszlop nyomásával és a drén körüli képződmények vízvezető képességével (95. ábra).

$$Q_d = C_d \cdot (h - d) = K \cdot L \cdot (h - d), \qquad (8.1.)$$

ahol Q_d a drén hozama, C_d a drén vízszállító képessége (***Drain Hydraulic Conductance***), h a nyomásszint az elemben, d a drén fenékszintje (***Elvation of the Drain***), K egy egyenértékű szivárgási tényező, melyik leírja a vízadó és a szivárgó belseje közötti nyomásveszteségeket és L a szivárgó hossza az elemben.

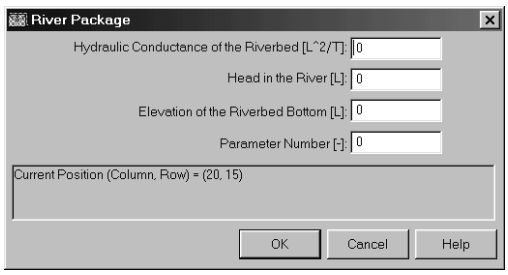


95. ábra
Értékadás a szivárgó csomag esetén

Ha a vízszint alacsonyabban áll, mint a drén, akkor a szivárgónak a vízmérlegre nincsen hatása.

8.2.3. Folyó csomag (River package)

A folyó csomag annyiban különbözik a szivárgótól, hogy függetlenül a vízállástól, a folyónak van hatása a vízmérlegre. Ha a folyó vízállása magasabb, mint a talajvíz nyomásszintje, akkor a folyó táplálja a vízadót, ellenkező esetben megcsapolja. A folyó elemek oldalfalainak a folyómederben lévő részei vízzáróak, vízforgalom kizárólag a folyó mederfenekén, a kolmatált zónán keresztül lehetséges.



96. ábra
A folyócella definíciója

A folyóból a vízadóba jutó hozamot a

$$Q_{folyó} = C_{folyó} \cdot (H_{folyó} - h), \qquad ha \quad h > h_{mederfenék}$$
$$Q_{folyó} = C_{folyó} \cdot (H_{folyó} - h_{mederfenék}), \quad ha \quad h \le h_{mederfenék} \tag{8.2.}$$

képlettel számítjuk a talajvízszint függvényében, ahol h a talajvízszint, $H_{folyó}$ a vízállás (***Head in the River***), $h_{mederfenék}$ a mederfenék szintje (***Elevation of Riverbed Bottom***) és $C_{folyó}$ a felszíni és a felszín alatti vizek kapcsolatára jellemző mérőszám (***Hydraulic Conductance of the Riverbed***):

$$C_{folyó} = \frac{k_{kolmatált}}{m_{kolmatált}} L \cdot W, \tag{8.3.}$$

ahol $k_{kolmatált}$ és $m_{kolmatált}$ a kolmatált zóna szivárgási tényezője, illetve vastagsága, L a folyó hossza, W a szélessége az elemen belül.

8.2.4. GHB csomag (General Head Boundary)

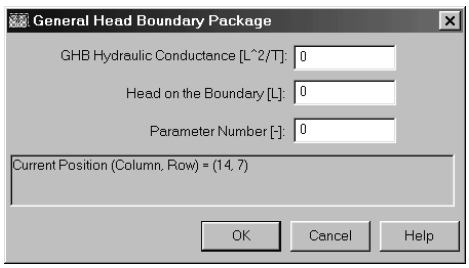
A GHB csomaggal puha peremfeltételeket lehet biztosítani. A peremen ki- és beáramló vízmennyiség arányos a GHB cellák esetén az aktuális és egy előírt vízszint eltérésével, azaz:

$$Q_{GHB} = C_{GHB} \cdot (h_{GHB} - h), \tag{8.4.}$$

ahol Q_{GHB} a hozam, h_{GHB} az előírt (***Head on the Boundary***), h az aktuális vízszint és C_{GHB} a perem erősségét jelző mérőszám (***GHB Hydraulic Conductance***):

$$C_{GHB} = \frac{k \cdot A}{L_0}, \tag{8.5.}$$

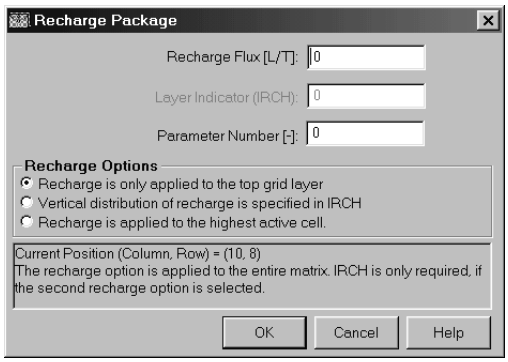
ahol k a réteg vízszintes szivárgási tényezője, A a szivárgás irányára merőleges felület nagysága az elemben és L_0 a perem távolsága az állandó nyomásúnak feltételezett határtól. Ez a definíció azt jelenti, hogy felfogható a GHB perem egy olyan cellának, mint egy állandó h_{GHB} vízszinttel jellemezhető peremtől ismert L_0 távolságra lévő cella.



97. ábra
A GHB cellák adatbeviteli ablaka

8.2.5. Maradó beszivárgás (Recharge package)

A maradó beszivárgást egy intenzitásértékkel adjuk meg.



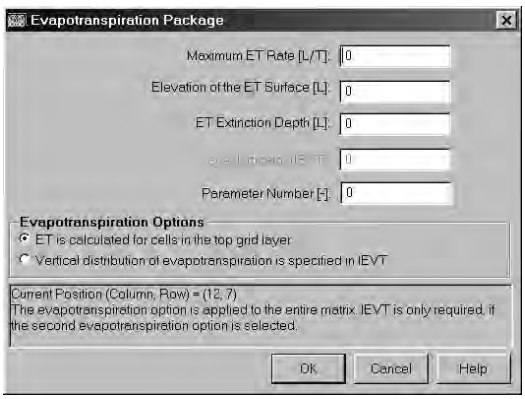
98. ábra
A maradó beszivárgás megadása

A maradó beszivárgás értékét a ***Recharge Flux*** mezőben kell megadni. A beszivárgás miatt megjelenő hozamokat a legfelső réteghez (***Recharge is only applied to the top grid layer***), egy az IRCH mezőben megadott sorszámú és ezért területileg eltérő mélységben található réteghez (***Vertical distribution of recharge is specified in IRCH***) vagy végül a legfelső aktív cellához (***Recharge is applied to the highest active cell***) rendelhetjük hozzá. Amennyiben az első esetet választottuk, akkor az inaktív cellák esetén a beszivárgást a vízmérlegben nem veszi a program figyelembe.

A hozamot az intenzitás és az elem területének szorzataként kapjuk meg.

8.2.6. Növényborítottsági csomag (Evapotranspiration)

A MODFLOW evapotranszspirációs csomagja a növények párologtató hatását és a földfelszín kiszáradása miatti vízveszteséget veszi figyelembe (99. ábra).



99. ábra
Evapotranszspiráció párbeszédpanel

A vízvesztés maximális (***Maximum ET rate***), amennyiben a talajvízállás a felszínhez egy megadott h_s szinten (***Elevation of ET surface***) belül közelít és zérus ha egy bizonyos d szint (***ET Extinction Depth***) alatt van. A két szint között a változást lineárisnak tételezzük fel.

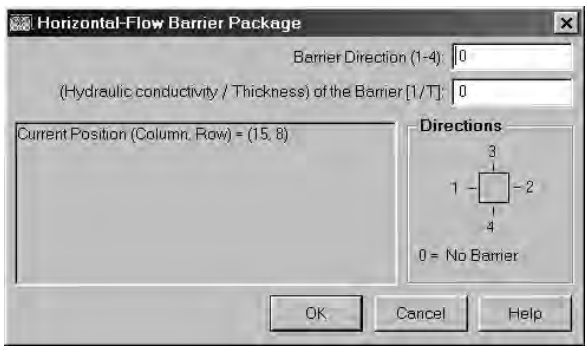
$$R_{ET} = R_{ETMaximum},\ ha\ h > h_s$$
$$R_{ET} = 0,\ ha\ h > h_s - d \qquad (8.6.)$$
$$R_{ET} = R_{ETMaximum} \cdot \left[\frac{d-(h_s-d)}{d}\right],\ ha\ (h_s - d) \le h \le h_s.$$

ahol $R_{ETMaximum}$ a maximális vízveszteség

Az evapotranspirációból fakadó vízveszteségeket a legfelső réteghez (***ET is calculated for cells in the top grid layer***) vagy külön mátrixban (IEVT) adható meg az evapotranszspiráció által érintett cellák mélysége (***Vertical distribution of evapotranspiration is specified in IEVT***).

8.2.7. Függőleges gát csomag (Horizontal Flow Barrier package)

A csomag célja résfal, szádfal vagy vetők szimulációja. A csomagnál megadandó, hogy a cella melyik oldalán (Barrier Direction) és milyen vízvezető képességű gát található. Azt a vízvezető képességet a gát anyagának szivárgási tényezője és a vastagságának a hányadosa adja (***(Hydraulic conductivity/Thickness) of the Barrier,*** 100. ábra).

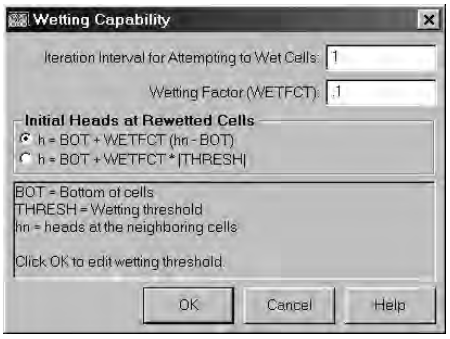


100. ábra
Függőleges gát megadása

8.2.8. Visszanedvesedés (Wetting Capability)

A szimulációk során az elemek, ha elvesztik a vizüket és kiszáradnak, akkor inaktívvá válnak. A visszanedvesedési csomag lehetővé teszi a vízszint ismételt emelkedését követően ez inaktív cellák aktívvá válhatnak.

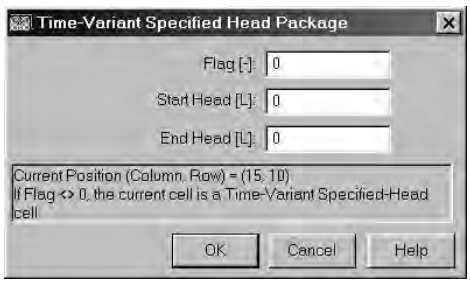
A csomag akkor teszi lehetővé egy inaktív cella aktívvá válását, ha a szomszédos cellában az előző iteratív lépés során a vízszintje az inaktív cella fenékszintjét vagy egy a felhasználó által megadott küszöbszintet (TRESH, Wetting Treshold) meg nem halad. Amennyiben a feltétel teljesül, akkor a cella aktívvá válik és a vízszintje a felhasználó által kiválasztott képlettel számítható (101. ábra).



101. ábra
Visszanedvesedés megadása

8.2.9. Időben változó nyomásszintek csomagja (Time-variant Heads)

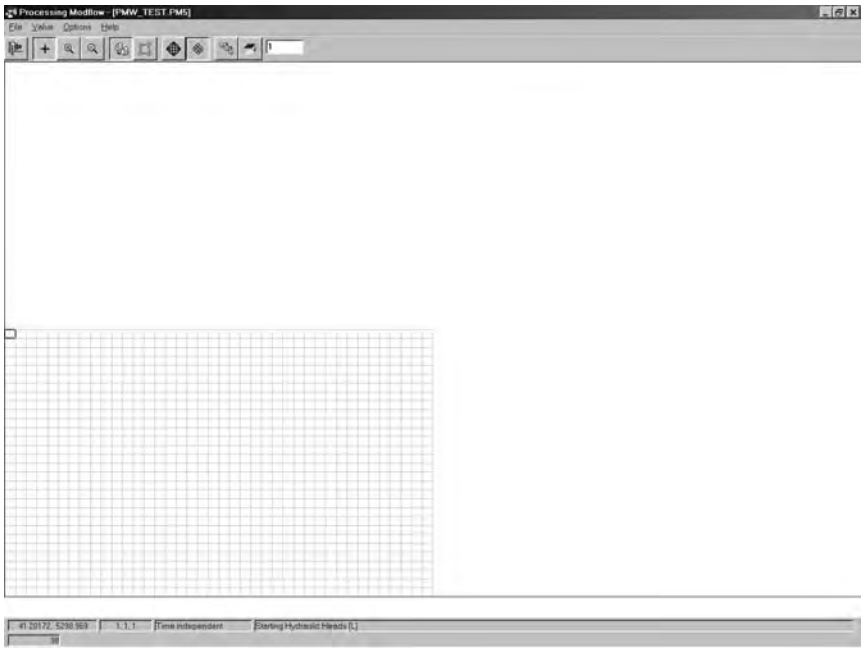
Az időben változó nyomásszintek csomagja által érintett elemeket a zérustól eltérő ***Flag*** számmal jelölhetjük ki. Ezután az elemben az időlépcső elején (***Start Head***) és a végén kialakuló (***End Head***) nyomásszinteket kell megadni. A cellában a nyomásszint változása a kezdeti értéktől a záróértékéig az egyes időlépcsők során – a feltételezések szerint - lineárisan változik.



102. ábra
Időben változó nyomásszintek

8.3. A Grid Editor (rácsháló szerkesztő) használata

A **Grid Editor** a program egyik legtöbbet használt rutinja. A PMWIN a modellezés során az egyes hálóelemekhez rendelt geometriai adatokat, anyagi tulajdonságokat, források és nyelők adatait mátrixok formájában kezeli. Ezen mátrixok kialakítását, szerkesztését, módosítását a **Grid Editor**ral végezhetjük el (103. ábra).



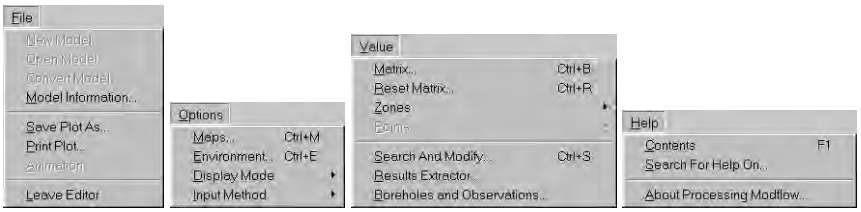
103. ábra
A Grid Editor

Az **Grid Editor**ban a következőket tehetjük meg:

- Az összes cellához azonos értéket rendelhetünk,
- Bármely kiválasztott cellához adott értékeket rendelhetünk,

- Egy adott, kiválasztott cellaértéket bármely másik cellához hozzárendelhetünk (másolás)
- Egy poligonnal körülhatárolt modellezett részhez, zónához értéket rendelhetünk,
- Az adott mátrixnak egy kritériumnak megfelelő értékű elemeit megváltoztathatjuk,
- Elmenthetjük az elemeket, illetve beolvashatunk korábban számított vagy mentett mátrixértékeket,
- Matematikai műveleteket végezhetünk a mátrixokkal.

A Grid Editor menürendszerét a 104. ábra az ikonokat a 105. ábra mutatja be.



104. ábra
A Grid Editor menürendszere

A Grid Editor menürendszere

105. ábra
A Grid Editor ikonjai a hálószerkesztésnél, a digitalizálásnál és egyéb mátrixok szerkesztésénél

Az ikonok szerepe balról jobbra:

- Ajtó (***Leave Editor***): Az editorablak elhagyása, a mátrix aktuális értékekkel való
- elmentése, megfelel a **File →Leave Editor** parancsnak.
- Kijelölés: Kurzor üzemmód, amennyiben benyomva található, úgy a kurzor mozgatása lehetséges, így az adott mátrixon belül bármely elemre rámutathatunk.
- nagyító: Lenyomása után a modell bármely két pontjára feszített téglalap alakú térrész kinagyítható a lenyomott bal egérgomb segítségével.
- kicsinyítő: Lenyomása után a lépték visszaáll az eredeti állapotra.
- Cella-zóna váltó gomb: segítségével az adatbeviteli mód cellánkénti bevitelről zónás bevitelre változik, megfelel az **Options →Input Method** parancsnak.
- Tájoló gomb: A gomb segítségével a térképi észak és a modell y tengelynek megfelelő tájolások között váltogathatunk. A gombnak nincs hatása, ha az y

tengely észak felé néz. A tájolásról a környezet (***Environment***) leírásánál lesz szó.

- Cellaérték másoló gomb (***Duplication***): ki-be kapcsolható, amíg bekapcsolva van, addig a mátrix értékek másolódnak a kurzor mozgatási útjának megfelelően.
- Rétegmásoló gomb (***Layer copy***): A gomb segítségével lehetőség van a 1 ablakban kijelzett, aktuális réteg mátrixelemeinek egy tetszőleges másik rétegbe másolására. A gomb ki/be kapcsolja a teljes mátrix másolási funkciót, ha bekapcsolt állapotban egy másik rétegre ugrunk vagy PgDn/PgUp gombbal, vagy az aktuális rétegszám átírásával, akkor a meglátogatott rétegekben valamennyi mátrixelem a kiindulási hely mátrixelemeinek értékét veszi fel.

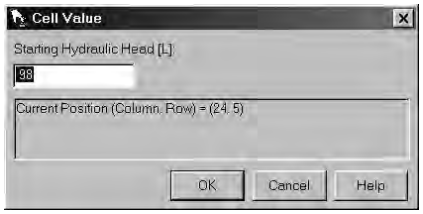
A **Grid Editor** menüparancsai:

- **File → Model information**: A modellhez rendelt szöveges leírás lekérése, szerkesztése **File → Save Plot As**: Az éppen ábrázolt mezőtulajdonság (képernyőrajz) mentése vektorgrafikus (HPGL vagy DXF) esetleg raszteres (BMP) formátumban.
- **File →Leave Editor**: Mátrixszerkesztés befejezése, értékek mentése vagy mentés elhagyása
- **Value →Matrix →Reset**: Teljes mátrix törlése és egy megadott értékkel való felülírása.
- **Value →Matrix →Browse**: A mátrix végigböngészése táblázatkezelő formátumban, a mátrix elemeinek mentése SURFER dat formátumban vagy saját formátumban, egy korábban mentett mátrix beolvasása.
- **Value →Zones →Save As** vagy **Load**: Adatbevitelhez felhasznált zónahatárok mentése illetve beolvasása. A zónák olyan térrészek, amelyeket azonos tulajdonság jellemez. Ezeket zóna üzemmódra váltás után az egérrel jelölhetjük ki, majd a jobb egérgombbal rendelhetünk az egyes zónákhoz értékeket.
- **Value →Search and Modify**: Kijelölhetők a modell elemek részhalmazai (pl. adott értékintervallumba eső elemek) és a kiválasztott elemekkel multiplikatív és additív műveletek végezhetők, esetleg egy adott értékre cserélhetők le.
- **Value →Result Extractor**: A Result Extractor az adott mátrix elemeit a browserhez hasonlóan megmutatja és további feldolgozásra alkalmas formában elmenti a kívánt eredményeket.
- **Options →Maps**: definiálhatók olyan dxf rajzfájlok vagy raszteres képek, amelyeket az editorablakban a modellezett térrészen való tájékozódásra használhatunk fel. (Lásd a környezet beállítása című részt.)
- **Options →Environment**: A képernyőn mutatott térrész határainak definiálása, a mátrixadatok esetleges izovonalas formában való ábrázolásának megadása, vektorábrázolás megadása (Lásd a környezet beállítása című részt.)
- **Options →Display →Mode →Global** vagy **Local** A vizsgált terület északi irányban vagy helyi koordináták szerint tájolva.
- **Options → Input Method → Cell-by-cell** vagy **Zones**: Cellánként vagy zónánként való adatbeviteli mód.
- **Help**: Súgó file-ok angolul

Az összes cellához azonos érték rendeléséhez kiválasztandó a **Value →Matrix →Reset** parancs: a Reset Matrix párbeszédablak jelenik meg, ahová a kívánt érték beírható (106. ábra). Az ablakon belül a program feltünteti a megváltoztatandó paraméter típusát és a dimenzióját is.

106. ábra
A Reset Matrix párbeszédablak

Bármely kiválasztott elemhez adott érték hozzárendeléséhez ki kell választani az adott elemet, majd a jobb egérgombbal egyet kattintva a ***Cell Value*** párbeszédablak jelenik meg. Az ablakban a paraméter neve és dimenziója megjelenik, és beírható az új vagy módosított érték.

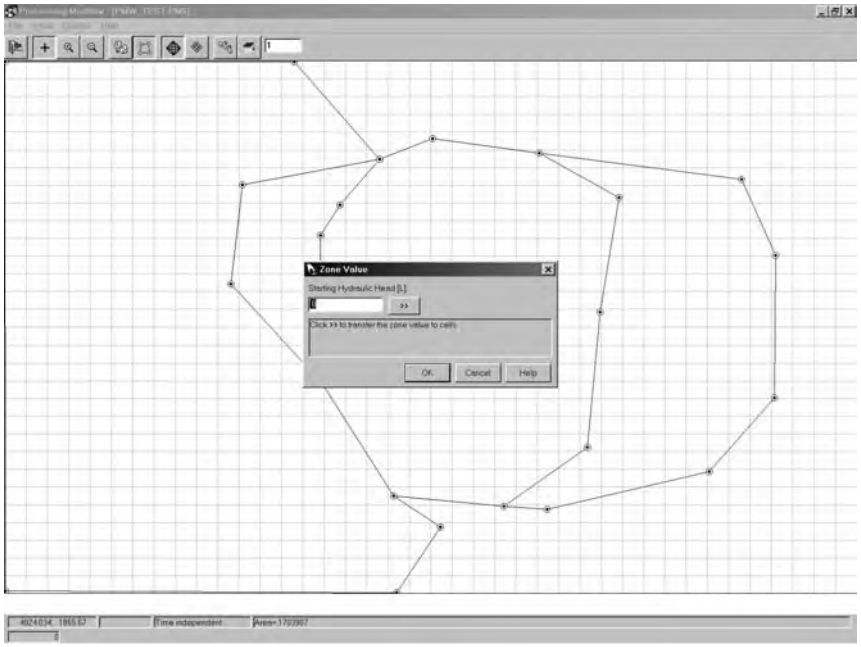


107. ábra
A Cell Value párbeszédablak

Egy kiválasztott cellaérték másolásához kiválasztandó az adott cella, amelyhez rendelt értéket másolni kívánja, majd megnyomva a ikont, másolási üzemmódba váltunk. Közben az ikonon a kis ablak besárgul. Ezután végigmozgatva a kurzort azokon az elemeken, ahova a kijelölt értéket másolni kívánjuk az érték átmásolódik. Amennyiben a cellák nem határosak egymással, úgy a cellák között egérrel való ugrással lehet folytatni a másolást. A másolással érintett cellák színe ideiglenesen megváltozik.

A modellezés során lehetőség van zónák alkalmazására. Minden zóna egy poligon, melyen belül a tér, az adott jellemző szempontjából homogénnek tekinthető, azaz egy konstans értékkel leírható. Egy zónához érték rendeléséhez válassza ki a zóna beviteli üzemmódot a ikonnal, vagy az **Options → Input Method → Zones** paranccsal. Az egérrel kattintva készítsen poligont vagy poligonokat, amelyek a különböző tulajdonságú térrészeket választják el egymástól. A poligon zárásához klikkeljen a vonal kezdő pontjára. Amennyiben egymást átfedő zónák vannak, úgy a legbelsőbbel kell elkezdeni, majd az egyre nagyobb zónákat kell megrajzolni.

Amennyiben helyesen vettük fel a zónákat, úgy az egér mozgatásával mindig kékre vált az a zóna amelyben az egérmutató éppen tartózkodik. Amennyiben a poligon kijelölését elrontottuk volna, úgy a rajzolás közben a jobb egérgombbal klikkelve az adott poligont újrakezdhetjük, amennyiben már kész poligont szeretne törölni, úgy az egeret mozgassa az adott poligonon belülre, majd amikor az kékre vált és nyomja meg a ***Delete*** gombot a klaviatúrán. A zónákhoz értéket rendelni az egérnek a zónán belülre mozgatásával lehet, majd amikor az adott zóna határa kékre vált, akkor a jobb egérgomb megnyomására megjelenik a ***Zone Value*** párbeszédablak.



108. ábra
Adatbevitel a zónákba

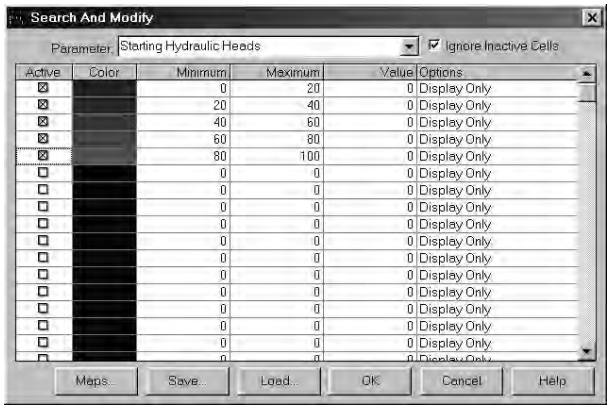
Beírva a zónára jellemző értéket az ablakba, majd lenyomva a [>>] gombot a poligonnal határolt területen belülre eső cellákhoz a megadott értéket rendeli a program. Ha az értékeknek a cellákba másolása (a [>>] gomb megnyomása) elmarad, akkor a zónákról a program nem vesz tudomást, mivel a számításokat nem a zóna, hanem a cellaértékekből felállított mátrixok alapján végzi a program.

A zonákhoz rendelhető poligonokat a **Value →Zones →Save As** vagy **Load** paranccsal kimenthetjük vagy később beolvashatjuk.

Az adott mátrixban egy kritériumnak megfelelő értékű elemek kikereséséhez és megváltoztatásához a **Value → Search and Modify** parancsot használhatjuk (megjelenik a ***Search and Modify*** párbeszédpanel(109. ábra)).

A panelben a megváltoztatandó vagy kikeresendő érték a ***Minimum*** és ***Maximum*** oszlopokba írt értékek közé esik. A minimum és maximum érték által meghatározott

intervallumba eső elemeket a program a ***Color*** cellában mutatott színűre változtatja (ráklikkelve megváltoztatható), amennyiben az adott sor aktív (***Active***). Az ***Options*** cellában határozandó meg az a művelet, amit végezni akarunk: ez lehet a ***Value*** oszlopba írt értékkel való helyettesítés (***Replace***), azzal való szorzás (***Multiply***) vagy összeadás (***Add***), de csak beszínezhetjük a kiválasztott elemeket is (***Display only***). Ezzel az utóbbi lehetőséggel a terület színskálás térképét is elő lehet állítani. A felső ***Parameter:*** nevű cellában az éppen szerkeszthető egy vagy több paraméter neve van felsorolva, ahonnan a megfelelőt ki kell választani.



109. ábra
A Search and Modify párbeszédablak

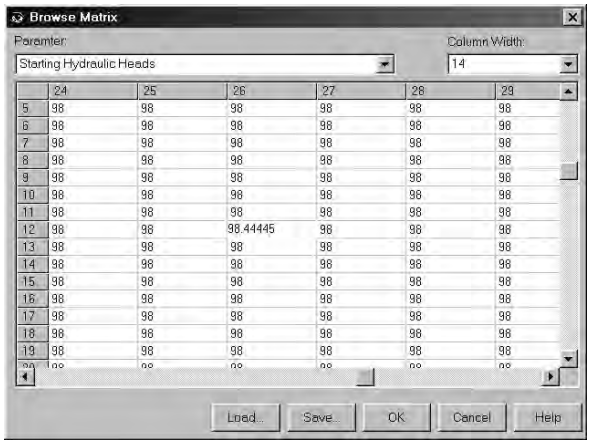
Az inaktív cellák figyelmen kívül hagyása (Ignore Inactive Cells) dobozzal lehetővé válik, hogy a peremfeltételeknél inaktívvá tett elemek esetében a kijelölt műveletet a program ne hajtsa végre.

Az aktuális beállításokat a ***Save*** és ***Load*** gombokkal menthetjük vagy behívhatjuk.

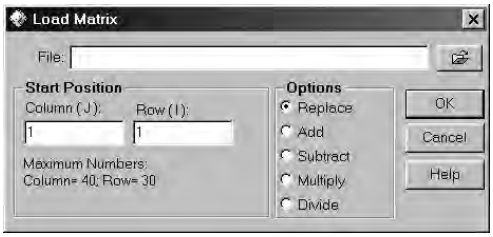
A mátrixelemek szerkesztéséhez és elmentéséhez válassza az ***Editor*** **Value →Matrix →Browse** parancsát, amire a ***Browse Matrix*** ablak jelenik meg (110. ábra).

Az ablaknak a legördülő paraméter menüjéből (***Parameter:***) lehet kiválasztani a szerkeszteni vagy menteni kívánt jellemzőt az aktuálisan szerkesztett paraméterek közül. Bármely értékre kattintva az érték megváltoztatható vagy megnyomva a ***Save*** gombot, majd a fájlnév megadása után az ablakban választott formátumban (ASCII szöveg vagy SURFER xyz DAT formátum) az OK gomb megnyomására a program az adatokat elmenti a merevlemezre.
A korábban számított és mentett mátrixértékeket beolvasásához válassza az editor **Value →Matrix →Browse** parancsát, az ablak legördülő paraméter menüjéből válassza ki a beolvasni kívánt paramétert az aktuálisan szerkeszthető paraméterek közül, majd nyomja meg a ***Load*** gombot (***Load File*** ablak megjelenik (111. ábra)). A fájlnév megadása után az ***OK*** gomb megnyomására a program az adatokat beolvassa

a merevlemezről. Amennyiben a beolvasandó mátrix mérete nem fele meg a szerkesztendő mátrix méretének, akkor hibaüzenetet kaphatunk.



110. ábra
A Browse Matrix ablak



111. ábra
A Load Matrix párbeszédpanel

A mátrixokkal matematikai műveletek végzéséhez a ***Load Matrix*** ablak (111. ábra) további opcióit használhatjuk fel. Amennyiben pl. a szivárgási tényező és a rétegvastagság értékeinek megfelelő mátrixiokkal rendelkezünk (ezek származhatnak korábbi mentésből vagy pl. a ***Field Interpolator*** használatából) úgy a két mátrix szorzataként kaphatjuk a transzmisszivitás mátrixot. Ehhez először olvassuk be az egyik szorzandó mártixot pl. a rétegvastagságét, majd második lépésként olvassuk be a szivárgási tényező mátrixot de úgy, hogy az ne feülírja, hanem összeszorozza a mátrixok értékeit (***Options: Multiply***). Amennyiben nem szorozni, hanem hozzáadni akarunk a korábban beolvasott mátrixhoz akkor az ***Add***, ha kivonni, akkor a ***Substract***, ha osztani, akkor a ***Divide*** opciót kell kiválasztani.

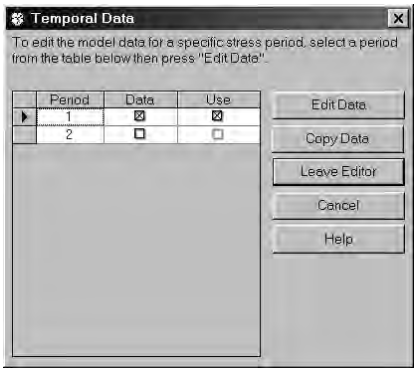
Be lehet olvasni egy részmátrixot is, ekkor a kezdőpont (***Start Position***) ablakrészben a részmátrix bal felső sarkának oszlop (***Coloumn***) és sorszámát (***Row***) kell megadni.

Amennyiben olyan adatokat szerkesztünk, amelyek időben változhatnak (pl. a kutak vízhozama stb.) és nem-permanens szimulációt végzünk, úgy a ***File Leave Editor***

parancs kiadásakor a ***Temporal Data*** ablak jelenik meg (112. ábra). Ez az ablak az egyes időlépcsők adatmátrixai közötti váltásra, az adatok időlépcsők közötti másolására és az adatszerkesztés elhagyására szolgál.

Egy másik időlépcső adatainak szerkesztéséhez válasszuk ki a táblázatban a megfelelő időlépcsőt (***Period***), majd nyomjuk meg az ***Edit Data*** gombot.

Egyik időlépcső adatainak a másik időlépcsőhöz rendeléséhez (másolás) válasszuk ki a táblázatban a megfelelő időlépcsőt (***Period***), majd nyomjuk meg az ***Copy Data*** gombot. A megjelenő ablakban adjuk meg annak az időlépcsőnek a sorszámát ahová másolni kívánjuk az adatokat.



112. ábra

A különböző periódusokhoz tartozó adatok elérése a Temporal Data ablakkal
Az adott paraméter adatainak szerkesztésének befejezéséhez nyomja meg a ***Leave Editor*** gombot! Ahhoz, hogy a számítások során az adott periódus során az adatmátrixot a program figyelembe vegye a használat (***Use***) mezőn belüli dobozt be kell jelölni!

8.4. A munkakörnyezet beállítása

A modellezési környezet beállításait minden munkafázis során megtehetjük: a rácsháló definiálásakor, az adatbevitel során a **Grid Editor** használatánál, de akár az eredmények megtekintése során is. Tanácsként annyi mondható el, hogy minél korábban történik mindez annál jobb. Mit is értünk a környezet beállításán:

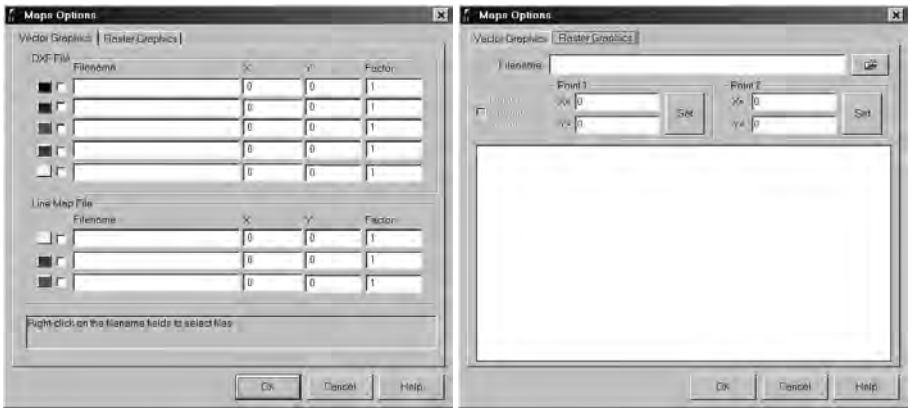
- vonalrajzok (digitális alaprajzok) megjelenítését,
- a rendszernek helyi koordinátarendszerből valós koordináta-rendszerbe illesztését
- a képernyőn megjelenítésre kerülő elemek (cellák, nyilak, izovonalak stb.) meghatározását.

8.4.1. Vonalrajzok (digitális alaprajzok) megjelenítése

Kiválasztva a ***Grid Editor*** **Options → Maps** parancsát a **Map Options** panel jelenik meg (113. ábra).

A panelban a **DXF File** dobozokba írja be az ábrázolni kívánt AutoCAD R12 DXF formátumú állomány nevét, majd a doboz előtti kis kockára ráklikkelve jelezze a megjelenítés szándékát. A Fájlnév kiválasztása lehetséges a szövegmezőben jobb egér kattintással, amikor egy intéző ablak jelenik meg. A DXF állományokból csak a LINE, POLYLINE, POINT, ARC, SOLID, CIRCLE és TEXT típusú objektumok jelennek meg.

A ***Line Map File*** mezőkben ASCII szövegfájlban tárolt vonalak jeleníthetők meg, mint pl. Golden Software Blanking (BLN) fájlok.



113. ábra
A Maps Options párbeszédablak

Az ***X és Y opciók*** megadásával a bal alsó sarok kezdőkoordinátáit adhatjuk meg, ami a rajz vonatkoztatási pontját is jelenti egyben, a ***Factor*** mezőbe pedig a rajz méretarány-változtatási igényét írhatjuk be, azaz ha pl. a DXF állományban az egység cm, de a modellben ugyanez méter akkor a szorzószám 100. Több vonalrajzot is feltehetünk az ábrára, illetve bármelyik megjelenítését tetszés szerint ki is kapcsolhatjuk.

Ha nem jelenne meg a képernyőn rajz, úgy a modellezett térrész (egyben a képernyőn látható térrész) nincs fedésben a rajz által lefedett térrésszel, aminek legtöbbször környezet-beállítási, vagy rajzfájlhiba okai lehetnek.

A ***Raster Graphic*** lapon rasztergrafikus (pl. Bitmap) állományok adhatók meg háttérként. A grafika és a valóság közötti kapcsolatot (georeferálás) 2 pont (***Point 1 és 2***) segítségével adhatjuk meg. Először adjuk meg a térképi raszteres állomány nevét (***Filename:***), majd adjuk meg a két referenciapont koordinátáit. Ezután a ***Set*** gomb megnyomásával a kurzor segítségével megjelölhetjük a térképen az adott koordinátájú pontok helyét.

A térkép nézetét az egérrel változtathatjuk: a nagyítás Shift és bal egérgombbal, a kicsinyítés Ctrl és jobb egérgombbal, a teljes térkép nézete az Alt és bal egérgombbal érhető el.

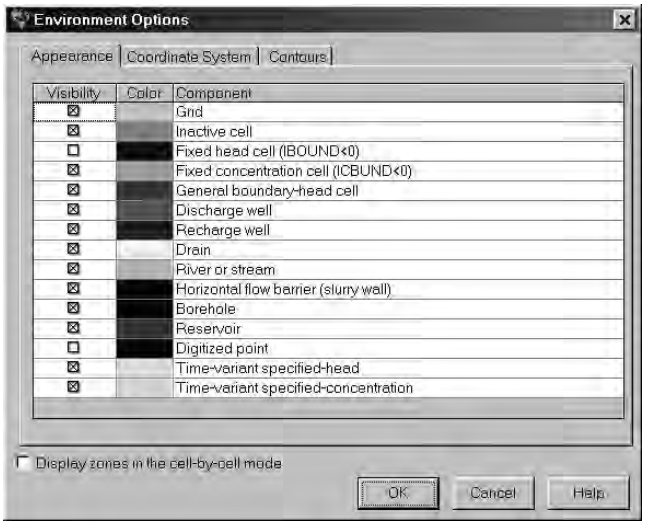
8.4.2. Az Options → Environment parancs

A rendszernek helyi koordinátarendszerből valós koordináta-rendszerbe illesztését és a képernyőn megjelenítésre kerülő elemek (cellák, nyilak, izovonalak stb.) meghatározását az ***Environment*** panel megfelelő beállításával érhetjük el, ehhez a ***Grid Editor*** **Options → Environment** parancsátkell kiválasztani. Az ***Environment*** ablakon belül az első lap a megjelenítések beállítására (***Appereance***), a második a koordinátarendszer beállítására, a harmadik az izovonalas térképi ábrázolásra (***Contours***) szolgál.

8.4.2.1. A megjelenítési beállítások

A ***Grid Appearance*** mezőben a kis dobozok kijelölésével az egyes, speciális tulajdonságú cellák esetleges megjelenítését, illetve a megjelenítés színét definiálhatjuk. azon elemek amelyek mellett a pipát megjelentetjük, azok az editorablakban láthatók lesznek a megadott színnel. A megjelentethető elemek:

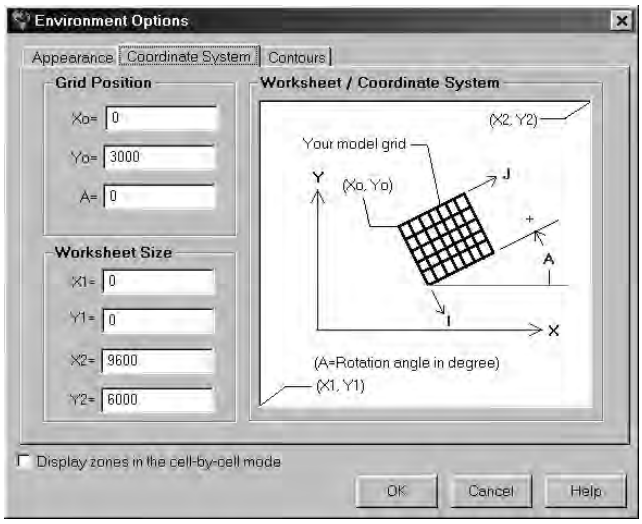
Grid	Rácsháló	Discharge Wells	Termelőkutak
Inactive cells	Inaktív cellák	Recharge Wells	Injektáló kutak
Fixed Head	Állandó nyomású cellák	Drain	Szivárgók
Fixed Conc.	Állandó konc. cellák	Specified Flows (in)	Betápláló hozamok
Bores	Fúrások	Specified Flows (out)	Megcsapoló hozamok
Observations	Megfigyelőkutak	Digitized Points	Digitalizált pontok
Gen. Head BoundaryHB cell	GHB cellák	River or Stream	Folyó vagy Patak
Horizontal Flow Barrier	Függőleges helyzetű gátak	Reservoir	Rezervoár
Time Variant Spec. Head	Időben változó nyomásszintek	Time Variant Spec. Conc	Időben vált. koncentráció



114. ábra
A megjelenítési beállítások

8.4.2.2. A modell tájolása

A program két koordináta rendszert használ, egyrészt egy helyi koordináta rendszert ahol a rácsháló bal alsó sarka a 0,0 koordinátájú pont, másrészt egy valós koordinátarendszert, mint amilyen pl. a Magyarországon alkalmazott Gauss-Krüger, sztereografikus vagy EOV vetületi rendszer koordinátarendszere. Mivel a helyi koordinátarendszerben a cellák helye a cellaméretekkel adott, ezért ezt nem kell megadni, ugyanakkor a valós koordináta rendszert a modell bal felső sarkának X_0 és Y_0 pontjának valós koordinátáival, illetve a térkép elforgatásának mértékével meg kell adni (115. ábra)



115. ábra
A valós koordinátarendszer megadása

A rácshálót a **Grid → Mesh Size** ... parancsnál felbukkanó két ikonnal is lehet beállítani:

- ikon bekapcsolásával a rácsháló a képernyőn és egyben a valós koordinátasíkon mozgatható,
- ikon bekapcsolásával a rácsháló a képernyőn és egyben a valós koordinátasíkon forgatható.

A helyi és a valós koordinátarendszer közötti átkapcsolást az alábbi ikonok segítik:

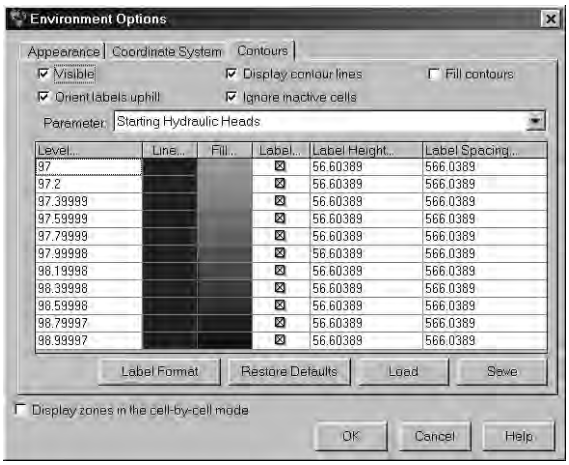
- helyi koordinátarendszer,
- valós koordinátarendszer.

A modell-rendszer tájolásához (koordináta rendszer meghatározásához) állítsa be a rácsháló megfelelő tájolását (***Grid Position*** mezőrész), majd a képernyő által mutatott térrész nagyságát (***Worksheet Size***). A képernyő által mutatott terület bal alsó sarka az X_1,Y_1; jobb felső sarka az X_2, Y_2 koordinátájú pont.

Figyelem! A magyar EOV rendszerben az EOV X koordináta az y tengelyre az EOV Y koordináta az x tengelyre kerül, ezért a bal felső sarok EOV X koordinátája az Y_0 érték. és ugyanez vonatkozik a képernyő által mutatott térrész valós koordinátáinak beállításaira is.

8.4.2.3. Izovonalas térképek ábrázolása

Az aktuálisan a Grid Editorban mutatott jellemző megtekintésére és az adatállomány ellenőrzésére a térképi megjelenítés ajánlható, amit szintén az **Options → Environment** paranccsal érhetünk el (116. ábra)



116. ábra
Az izovonalak megjelenítése

A láthatóság (***Visible***) doboz ki/be kapcsolja az izovonalas/színskálás megjelenítést.

Az izovonalak ábrázolása doboz (***Display Contour Lines***) az izovonalak megjelenítését kapcsolja ki, ekkor csak a színskálás ábrázolás érvényesül.

A kitöltés (***Fill Contours***) doboz a színskálás ábrázolást kapcsolja ki/be, míg az izovonalak megjelenítése lehetséges marad.

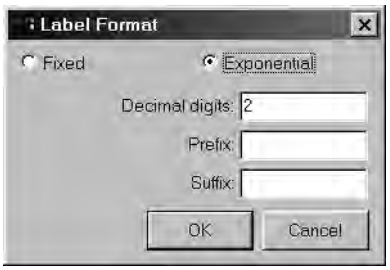
A felület térbeli leképzését könnyíti meg az izovonal-feliratok dombirányú elhelyezése (***Orient labels uphill***).

Az inaktív cellák területén a megjelenítés kikapcsolására szolgál az inaktív területek fiogyelmen kívül hagyása doboz (***Ignore inactive cells***).

A táblázatos részben a fejlécen a ***Level*** gombra kattintva állíthatjuk be az első (***Minimum***) és (***Maximum***) utolsó izovonal szintjét és az izovonalak közötti lépésközt (***Interval***). A ***Fill*** feliratra kattintva a színkitöltést adhatjuk meg a minimális és a maximális értékekkel jellemezhető területrészek színével. Az egyes izovonalakra írandó cimkét engedélyezzük a ***Label*** dobozban. A ***Label height*** és ***Label spacing*** beállítá-

sokkal a cimkék magasságát és egymástól való távolságát szabályozhatjuk a térképi hosszúság egységekben megadva.

A ***Label Format*** gombbal a cimkék formátumát adhatjuk meg adott számú tizedesekre kerekítve tizedes törtként (***Fixed***) és tudományos számábrázolással ú.n. normálalakban (***Exponential***) (117. ábra). A cimkékhez elő és utótag is rendelhető (***Prefix*** és ***Suffix*** mezők)

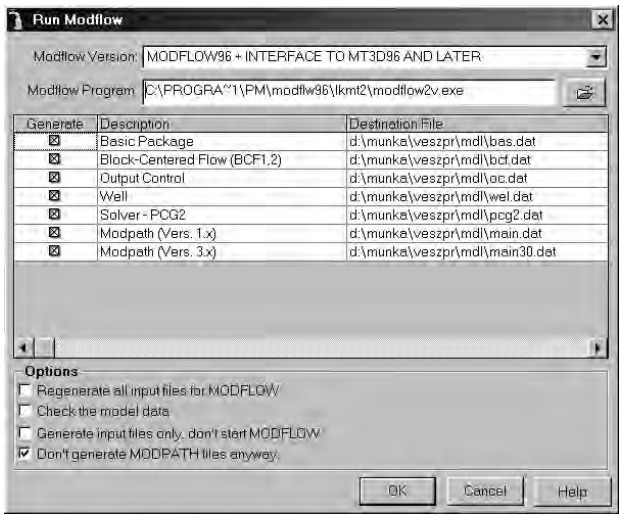


117. ábra
A feliratok formázása

A ***Save*** és ***Load*** gombokkal az izovonalas ábrázolások beállításai menthetők el, illetve tölthetők be.

8.5. A MODFLOW futattása

Az összes paraméter beállítását követően a **Models → MODFLOW → Run** paranccsal lehet a futtatást elindítani. Ekkor a 118. ábra szerinti ablak jelenik meg.



118. ábra
A MODFLOW futtatási ablaka

A ***Modflow Version*** mezőben a futtatandó program verzióját adhatjuk meg. Ha más indok nincsen akkor javasolható a MODFLOW-96 program használata. A ***Modflow Program*** mezőben a kiválasztott programverzió elérési útját állíthatjuk be.

Az ablakban látható táblázat tájékoztatási célt szolgál. Bemutatja a megadott adatrendszer esetén szükséges modulokat, illetve a táblázatban mutatja, hogy egyes csomagok újragenerálása szükséges-e.

Az ablakban előírhatjuk, hogy valamennyi csomagot a program újra elkészítse (***Regenerate all input files for MODFLOW***) még akkor is, ha azok tartalma nem változott. A ***Check the model data*** doboz az adatrendszer formai ellenőrzésére ad utasítást. Amennyiben a csomagokat előállítjuk, de nem indítjuk el (***Generate input files only, don't start MODFLOW***), akkor erre később a MODFLOW.BAT batchfájl elindításával bármikor később is lehetőség van. Mivel a Processing MODFLOW saját áramvonal-rajzoló és részecskekövető programmal (PMPATH) rendelkezik, ezért a MODPATH használatára nincs szükség. A ***Don't generate MODPATH files anyway*** doboz kiválasztásával az általában szükségtelen állományok generálását tilthatjuk le.

8.6. Eredmények kiértékelése és PMPATH

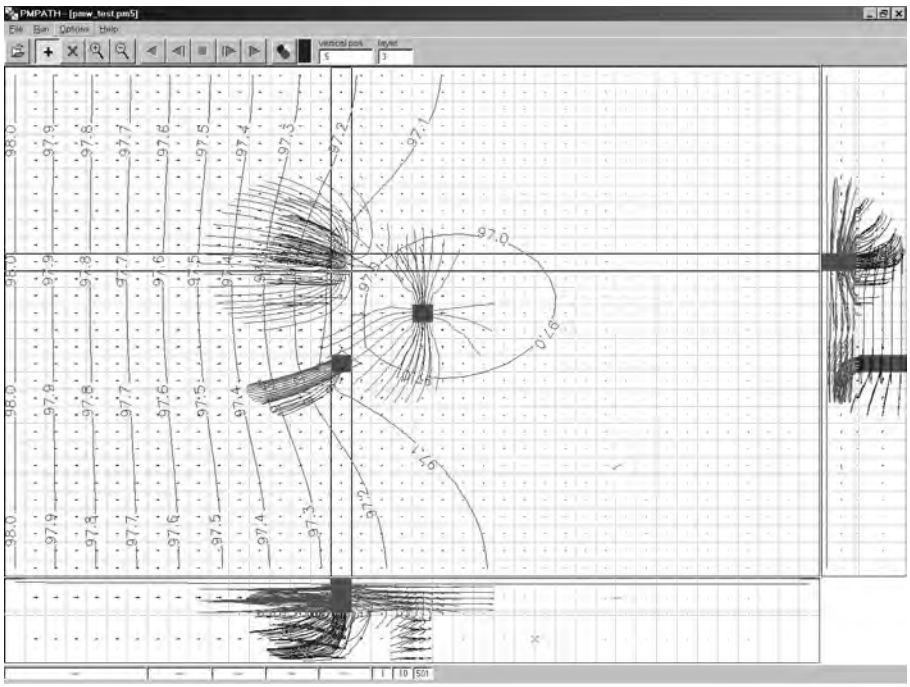
Az eredmények kiértékelésének legegyszerűbb eszköze a PMPATH program használata. A PMWIN környezetből a programot a **Models → PMPATH (Pathlines and Contours)** menüponttal lehet elindítani.

A PMPATH program egy áramvonal követő program, melynek számos alkalmazási lehetősége lehet. A rendszerrel a felhasználó által megadott pontból vagy pontokból a víz áramlási irányával egyező vagy éppen azzal szemben kirajzolhatók az áramvonalak. Egy szennyezett terület vizsgálata esetén érdekes lehet, hogy az ott beszivárgó szennyezett víz milyen úton és mennyi idő alatt merre juthat el. Ebben az esetben a víz szivárgási útját követve kell az áramvonalakat meghatározni. Más esetben pedig arra lehetünk kíváncsiak, hogy egy természetes vízkilépési helyhez vagy víztermelő létesítményhez honnan jut a víz. Ekkor az ismert érkezési pontból (kút, forrás, stb.) a víz szivárgásával szemben határozzuk meg, hogy mely területekről érkezik oda a víz és mekkora időn belül jut a vízkilépési vagy vízkivételi pontig a víz.

A rendszer használatához diszkrét vízrészecskéket kell kiválasztani (definiálni) és a program a kiválasztott vízrészecskék útját határozza meg és rajzolja ki. Az áramvonalak kirajzolása egyben a hozamok megjelenítésére is alkalmas: amennyiben egyenletesen osztjuk szét a vízrészecskéket egy kiindulási területen, akkor a sűrűbben kirajzolt áramvonalak nagyobb, a ritkábban rajzoltak alacsonyabb fluxusokat jeleznek. Azokon a területeken, ahol áramvonalak nem futnak, pang a felszín alatti víz.

A PMPATH elindításakor a 119. ábra szerinti munkaterület jelenik meg.

A rendszerben először definiálni kell vízrészecskéket. Ehhez a kijelölő gombot kell megnyomni majd a vízrészecskék tervezett helyén lévő cellákat az egérgomb lenyomása mellett ki kell jelölni, ekkor az ***Add Particles*** panel jelenik meg (120. ábra).



119. ábra

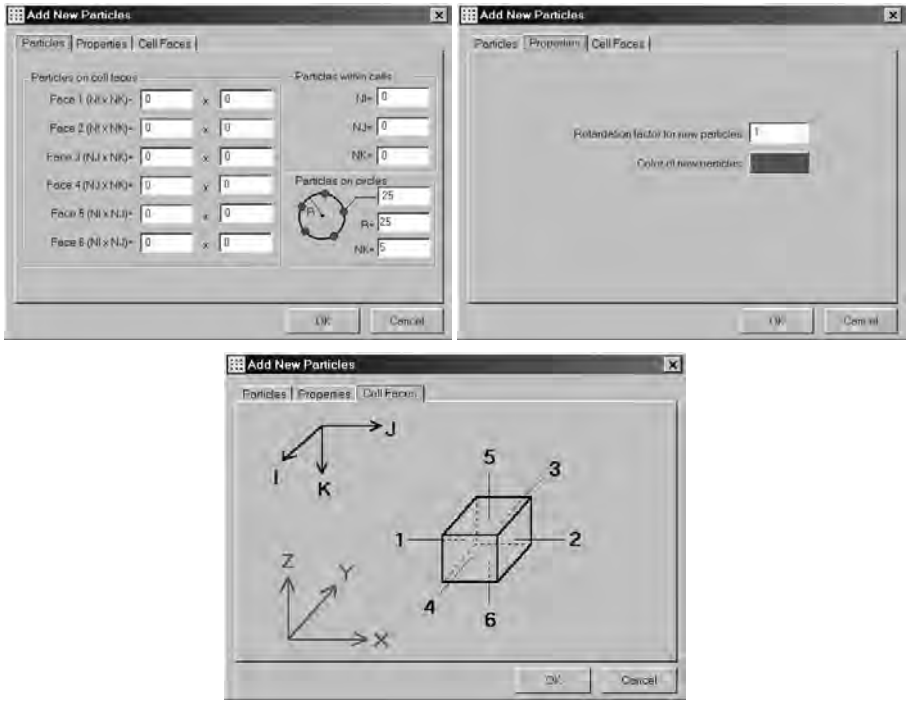
A PMPATH munkakörnyezete egy kútcsoport körüli áramvonalrendszer kirajzolása esetén

A ***Particles*** lapon az elemoldalak (***Cell Faces***) lapon megjelölt számozás szerinti oldalakra (***Particles on cell faces***), illetve a cellákon belülre (***Particles Within cells***) lehet a felhasználó által megadott darabszámú vízrészecskét elhelyezni. A henger-szimmetrikus szivárgási terek jobb követése érdekében az elemek középpontja köré rajzolt körökre (***Particles on Circles***) is lehet vízrészecskéket telepíteni. A tulajdonságok (***Properties***) lapon a vízrészecske színét és a részecskére jellemző késleltetést (***Retardation factor***). A színbeállításokat felülbírálhatja a modellrétegekhez rendelt színskála.

Lehet még vízrészecskéket a jobb egérgombbal is a rendszerbe helyezni, ekkor minden egyes részecskét külön-külön kell megadni.

A vízrészecskék törléséhez a **File → Delete all particles** parancson túl a gomb segítségével is lehet. A gomb bekapcsolt állapota mellett kijelölve egy térrészt, a modell kiválasztott rétegén belüli, térrészre eső vízrészecskék törlődnek.

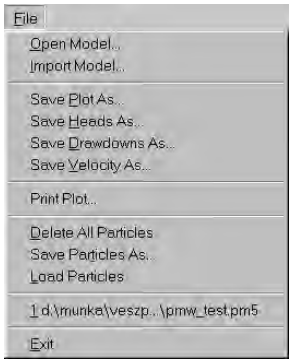
A kijelölt vízrészecskék mozgását az áramlási irányba a gombokkal, az áramlással szemben a gombokkal lehet egy időlépcsőre, illetve a teljes szimulációs időtartamra számítani.



120. ábra
A vízrészecskék hozzáadása panel

A kész áramképet ezután a **File → Save Plot As** parancs használatával lehet elmenteni és további feldolgozásra előkészíteni.

8.6.1. A File menü



121. ábra
A PMPATH File menü

A **File → Open model** paranccsal egy lefuttatott modell eredményállományai nyithatók meg és jeleníthetők meg a PMPATH környezetben.

A **File → Import model** paranccsal MODPATH 3. állományok töltetők be a környezetbe.

A **File → Save Plot As...** paranccsal a képernyőn lévő aktuális tartalmat lehet elmenteni Windows Bitmap (*.BMP), Hewlett-Packard Graphics Language (HPGL) és AutoCAD drawing exchange formátumba (*.dxf)

File → Save Heads As... paranccsal az eredményül kapott nyomásszintek mentése történhet meg.

File → Save Drawdowns As... paranccsal az eredményül kapott depressziókat lehet elmenteni.

File → Save Velocity As... paranccsal az eredményül kapott nyomásszintek és szivárgási tényezők alapján számított szivárgási sebességeket lehet elmenteni. A mentés során külön kiírhatók az X és Y irányú sebességkomponensek, továbbá az eredő sebességvektor is.

File → Print Plot paranccsal az aktuális grafika nyomtatása történhet. A legfontosabb opciók a teljes oldalt kitöltő nyomtatás (***Use full page***) és a lapközépre helyezett nyomtatás (***Center on Page***). Amennyiben nem teljes oldalra széthúzva és/vagy nem középre nyomtatunk, akkor a kép szélességét és hosszúságát mm-ben (***Image Size (millimeters): Width*** és ***Height***) és a bal és felső oldali margókat (***Margins (millimeters): Left*** és ***Top***) is megadhatjuk. Egy legördülő menüből megadható, hogy a nyomtatásban a felülnézet mellett valamelyik vagy mindegyik keresztmetszeti kép is megjelenjék-e.

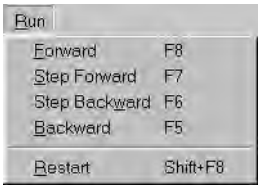
A **File → Delete All Particles** paranccsal a korábban definiált vízrészecskék törölhetők.

A **File → Save Particles As** paranccsal az aktuálisan definiált vízrészecskék tulajdonságai és helyzetük menthető el.

A **File → Load Particles** paranccsal a korábban elmentett vízrészecske adatok tölthetők be.

A **File → Exit** paranccsal a PMPATH programot be lehet zárni.

8.6.2. A Run menü



122. ábra
A PMPATH Run menü

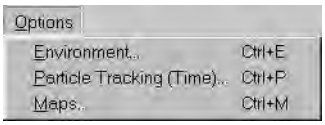
A **Run** menü parancsai az **Options** menüben beállított tulajdonságú vízrészecskék mozgását vezérli. A vízrészecskék mozgását lehet az áramlás irányába és azzal ellentétes irányban is vizsgálni.

A **Run → Forward,** és a **Run → Step Forward** parancsokkal a vízrészecskék áramlási irányba történő mozgását lehet vizsgálni.

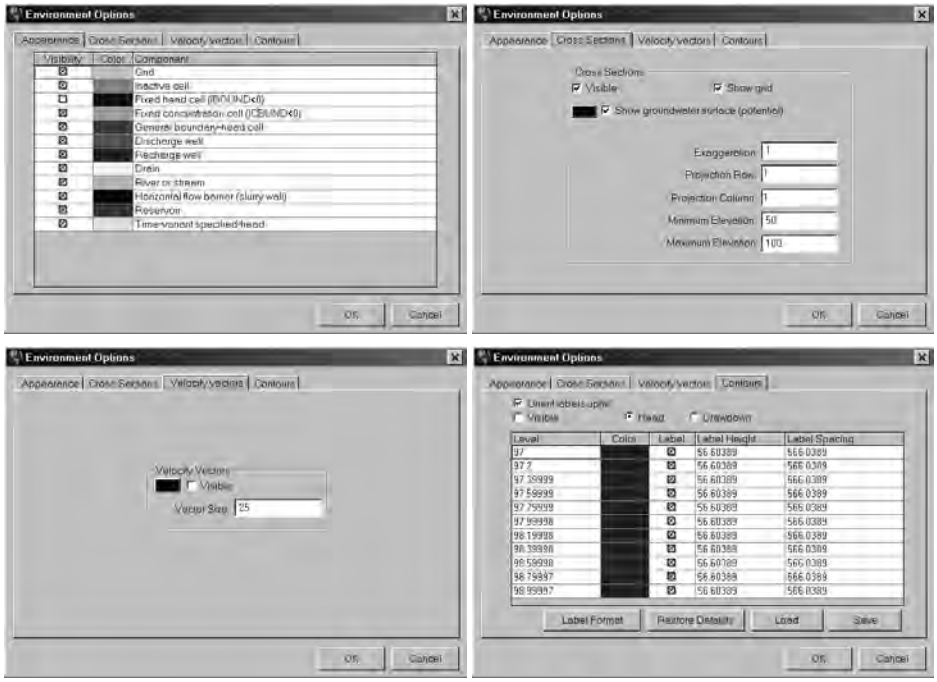
A **Run → Backward** és a **Run → Step Backward** parancsokkal a vízrészecskék áramlási iránnal ellentétesen történő mozgását lehet vizsgálni.

A **Run → Restart** paranccsal a kijelölt vízrészecskék útjának számítása újra indítható.

8.6.3. Az Options menü



123. ábra
A PMPATH Options menü



124. ábra
A környezet beállításai az Environment ablakkal

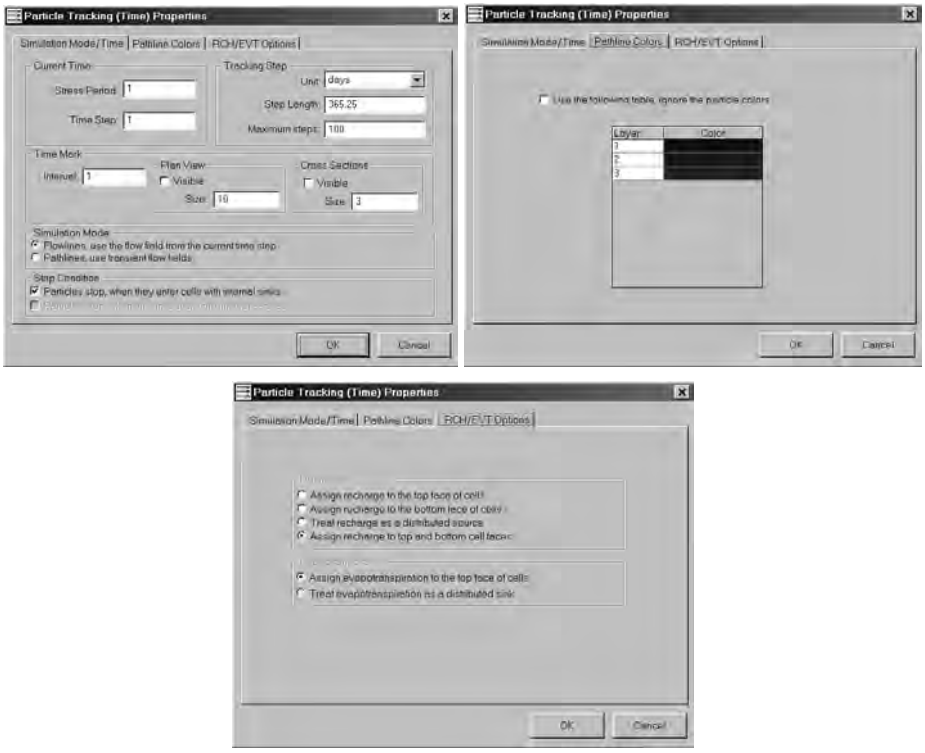
A környezet beállításainál (**Options → Environment,** 124. ábra) először a megjelenítési beállításokat lehet megadni (***Appearance***), melyek megegyeznek a PMWIN láthatósági beállításaival. A **Cross Sections** lapon megadható egy sor (***Projection Row***) és oszlop (***Projection Coloumn***), melynek mentén a program metszeten is ábrázolja – adott magassági torzítás (***Exaggregation***)az áramvonalakat. A láthatóság (***Visible***) doboz engedélyezi a metszetek rajzolását, a háló rajzolás (***Show Grid***) do-

boz, pedig a metszeteken teszi lehetővé ez elemek, a vízszint berajzolása (***Show groundwater surface (potential)***) doboz, pedig vízdomborzat ábrázolását. A metszeteken ábrázolt mélységtartományt a minimális és maximális magasság (***Minimum-Maximum Elevation***) segítségével adhatjuk meg.

A ***Velocity vectors*** lapon az egyes elemekbe rajzolt sebességvektoroknak megfelelő nyilak rajzolását lehet engedélyezni (***Visible***). A nyilak méretét a ***Vector Size*** mezőben lehet változtatni.

A ***Contours*** lapon az eredmények izovonalas ábrázolását lehet beállítani. A modul azonos a PMWIN térképrajzoló moduljával, ugyanakkor itt megadható, hogy az ábrázolás a depresszió vagy a nyomásszint értékeket felhasználva történjék.

Az **Options → Particle Tracking Time** menüben a vízrészecskék tulajdonságait, illetve a számítási feltételeket lehet beállítani (125. ábra).



125. ábra
Az Options menü beállításai

A ***Simulation Mode/Time*** lapon a vizsgált periódus (***Stress Period***) és a perióduson belüli időlépcső (***Time Step***) számát adhatjuk meg. Beállítható a részecske követéséhez egy időlépcső (***Step Length***) a kiválasztott idő mértékegységben (***Unit***) és megadható, hogy egy teljes szimuláció hány ilyen időlépcsőt öleljen fel (***Maximum Steps***). Az áramvonalra jeleket lehet rajzolni, melyek megjelenítését, illetve gyakoriságát és méretét a ***Time Mark*** mezőrészben lehet beállítani. Két szimulációs lehető-

ség (***Simulation Mode***) áll rendelkezésre vagy a kiválasztott periódus időlépcsőjének megfelelő sebességtérben zajlik a számítás (***Flowlines, use the flow field from the current time step***) vagy a nem permanens számítás során éppen aktuális és folyamatosan változó sebességtereket (***Pathlines, use transient flow field***) használja a rendszer a szimulációhoz. Beállítható, hogy a részecskék megálljanak, ha azok egy nyelőhöz (pl. kút) érkeznek (***Particles stop, when they enter cells with internal sinks***).

A ***Pathlines/Colors*** lapon egy színskála segítségével megadható, hogy az egyes modellrétegeken belül haladó áramvonalak milyen színűek legyenek, ez segíti az eredmények értelmezését.

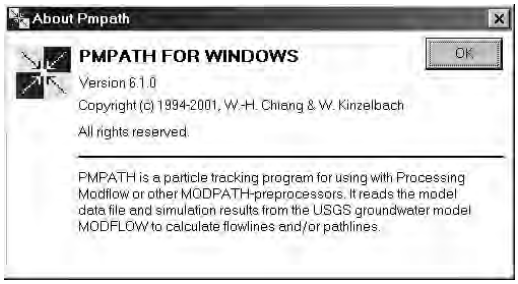
Az ***RCH/EVT options*** lapon a beszivárgás és az evapotranspirációra vonatkozó beállítások tehetők meg. A maradó beszivárgásból eredő hozamot a cella tetejéhez (***top face***), aljához (***bottom face***), mindkettőhöz (***top and bottom face***) rendelhetjük, illetve a hozamot eloszthatjuk egyenletesen a cellán belül (***distributed source***).

Az evapotranszspirációs hozamokat csak a cellák felső oldalához (***top face***) lehet rendelni, illetve megoszló hozamként kezelhető (***distributed source***).

8.6.4. A Help menü

A Help menün (126. ábra) keresztül érhető el a súgó, illetve a program verziószáma

126. ábra
A PMPATH Help menü



127. ábra
A PMPATH verziószáma és copyright üzenetek

9. Felhasznált irodalom

AKIMA, H. (1978a). A Method of Bivariate Interpolation and Smooth Surface Fitting for Irregularly Distributed Data Points, ACM Transactions on Mathematical Software (4), 148-159.

AKIMA, H. (1978b). Algorithm 526: Bivariate Interpolation and Smooth Surface Fitting for Irregularly Distributed Data Points, ACM Transactions on Mathematical Software (4), 160-164.

BEAR, J. - VERRUIJT, A. (1987): Modelling Groundwater Flow and Pollution, D. Reidel Publ.Co., p. 153-158., 225-284.

BERNER, R.A. (1971): Principles of Chemical Sedimentology, McGraw - Hill Publ. Co., New York

BOJTÁR I. - MOLNÁR GY. - NAGY T. (1988): A végeselem módszer alkalmazása síkbeli feladatokra, Műszaki Könyvkiadó, 1988, pp.81-140.

CHIANG, W.-H., KINZELBACH W. – RAUSCH R. (1998): Aquifer Simulation Model for Windows - Groundwater Flow and Transport Modeling, an Integrated Program. Gebrüder Borntraeger Berlin, Stuttgart, ISBN 3-443-01039-3.

CHIANG, W.-H., KINZELBACH W. (1993) Processing Modflow (PM), Pre- and Postprocessors for the Simulation of Flow and Contaminants Transport in Groundwater System with MODFLOW, MODPATH and MT3D. kézirat

CHIANG, W.-H., KINZELBACH W. (1994): PMPATH for Windows. User's manual. Scientific Software Group. Washington, DC.

CHIANG, W.-H., KINZELBACH W. (1998): PMPATH 98. An Advective Transport Model for Processing Modflow and Modflow.

CHIANG, W-Hs. – Kinzelbach, W.(1999): Processing Modflow: A Simulation System for Modelling Groundwater Flow and Pollution, v5.0, kézirat

CHIANG, W-Hs. – Kinzelbach, W.(2001): 3D-Groundwater Modeling with PMWIN, A Simulation System for Modeling Groundwater Flow and Pollution, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, ISBN 3-540-67744-5, SPIN 10774334

CLAUSER C. (Ed.): Numerical Simulation of Reactive Flow in Hot Aquifers, Springer Verlag, p. 332, ISBN 3-540-43868-8

COATS, K.H. - DEMPSEY, J.R. - HENDERSON, J.H. (1970): A New Technique for Determining Reservoir Description from Field Performance Data, Petroleum Engineering Journal 10(1), pp. 66-74.

COOPER, H.H. - JACOB, C. E. (1946): A Generalized Graphical Method for Evaluating Formation Constants and Summarising Well Field History, Transactions of American Geophysical Union 27, pp. 526-534.

CZINKOTA, I. (1994): Talajok forróvizes extrakciója, PhD. Doktori értekezés, Gödöllő, kézirat

CSANÁDY, G.T. (1973): Turbulent Diffusion in the Environment, D.Reidel Publ. Co. Dordrecht, Boston, 248.p.

DE MARSILY, G. (1986): Quantitative Hydrogeology, Academic Press

DELHOMME, J. P. (1979): Spatial Variability and Uncertainty in Groundwater Flow Parameters: A Geostatistical Approach Water Resources Research, 15(2), pp. 269-280.

DOHERTY, J. – Brebber L: - Whyte P. (1994): PEST - Model-independent Parameter Estimation. User's manual. Watermark Computing. Australia.

DREVER, J.I. (1982): The Geochemistry of Natural Waters, Prentice-Halls, Englewood Cliff

EMSELLEM, Y. - DE MARSILY, G. (1971): An Automatic Solution for the Inverse Problem, Water Resources Research 7(5): pp 1264-1283.

FENSKE, J. P. – LEAKE S. A. – PRUDIC D. E. (1996): Documentation of a Computer Program (RES1) to Simulate Leakage from Reservoirs using the Modular Finite-difference Ground-water Flow Model (MODFLOW), U. S. Geological Survey, Open-File Report 96-364.

FILEP GY. (1988): Talajkémia, Akadémiai Kiadó, Budapest, pp. 48-49., pp. 118-120.

FILEP GY. – KOVÁCS B. – LAKATOS J. – MADARÁSZ T. – SZABÓ I. (2002): Szennyezett területek kármentesítése, Szerkesztette Szabó I., egyetemi tankönyv, Miskolci Egyetemi Kiadó pp. 483.

FREEZE, R.A. – Cherry, J.A. (1979): Groundwater, Prentice-Hall, Englewood Cliffs

GILLHAM, R.W. - ROBIN, M.J.L. - DYTYNYSHY, N.D.J. - JOHNSTON, H.M. (1984): Diffusion of Nonreactive and Reactive Solutes through Fine Grained Barrier-Materials, Canadian Geotechnical J. Vol.21(3). pp.541-550.

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

HAITJEMA, H.M. (1995): Analitic Element Modeling of Groundwater Flow, Academic Press

HALÁSZ B (1987): Gyenge oldatok advektív transzportjának számítása sokszintes felszín alatti tárolókban, Hidrológiai Közlöny, 67.évf. 5-6. pp.283-287.

HARBAUGH, A.W.(1995): Direct Solution Package Based on Alternating Diagonal Ordering for the U.S. Geological Survey Modular Finite-difference Ground-water Flow Model: U.S. Geological Survey Open-File Report 95-288, 46 pp.

HARBAUGH, A.W. – McDONALD M. G. (1996a): User's Documentation for MODFLOW-96, an Update to the U.S. Geological Survey Modular Finite-difference Ground-water Flow Model, USGS Open-File Report 96-485.

HARBAUGH, A.W. – McDONALD M. G. (1996b): Programmer's Documentation for MODFLOW-96, an Update to the U.S. Geological Survey Modular Finite-difference Ground-water Flow Model, USGS Open-File Report 96-486.

HEIDERMANN, H. (1986): Datenfehler bei matematisch-numerischen Grundwassermodellen - Input Sensitivität und Kalman Filter, Mitteilungen Institut für Wasserbau, RWTH Aachen, Vol. 61.

HSIEH - FRECKLETON (1993). Documentation of a Computer Program to Simulate Horizontal-flow Barriers using the U. S. Geological Survey's Modular Three-dimensional Finite-difference Groundwater Flow Model. U.S. Geological Survey, Open-File Report 92-477.

HUYAKORN, P.S. - PINDER, G.F. (1983): Computational Methods in Subsurface Flow, Academic Press, pp.181-228, 341-401.

ISTOK, J. (1989): Groundwater Modeling by the Finite Element Method, American Geophysical Union, Water Resources Monograph Vol.13.

JACQUARD, P. - JAIN, C. (1965): Permeability Distribution from Field Pressure Data, Petroleum Engineering Journal 5, pp. 281-294.

JUHÁSZ J. (1981): Áramlástan – Hidrogeológia, Egyetemi jegyzet, Tankönyvkiadó, pp. 113-114.

JUHÁSZ J. (1987): Hidrogeológia, Akadémiai Kiadó, p. 971.

KECKLER, D. (1999): SURFER for Windows User's Guide, Version 7, Golden Software Co. Colorado, US.

KEIDSER, A. - ROSBJERG, D. - HÖGH JENSEN, K. - BITSCH, K. (1990): A Joint Kriging and Zonation Approach to Inverse Groundwater Modelling, Proc. of ModelCARE'90: Calibration and Reliability in Groundwater Modelling, IAHS Publ. No. 195. pp.171-183.

KEMPER, W.D. - MAASLAND, D.E.L. - PORTER, L.K.(1964): Mobility of Water Adjacent to Mineral Surfaces, Proc. of Soil Sciences Society of America Vol. 28(2), pp.164-167.

KINZELBACH, W. (1986): Groundwater Modelling (An Introduction with Sample Programs in BASIC), Elsevier

KINZELBACH, W. - SCHÄFER, W. - HERZER, J. (1991): Numerical Modeling of Natural and Enhanced Denitrification Processes in Aquifers, Water Resources Research, Vol. 27. No.6. pp. 1123-1135.

KONIKOW, L.F. - BREDEHOEFT, J.D. (1978): Computer Model of Two-Dimensional Solute Transport and Dispersion in Groundwater Techniques of Water-Resources Investigations of the US Geological Survey, Chapter C2, US Government Printing Office, Washington

KONIKOW, L. F. - GOODE D. J. – HOMBERGER G. Z. (1996): A Threee-dimensional Method-of-characteristics Solute-transport Model. U. S. Geological Survey. Water Resources Investigations report 96-4267.

KÖNIG, CH. (1993): Numerische Modellierung von Grundwasserströmungs- und Stofftransportvorgängen am Niederrhein, Mitteilungen Inst. für Bodenmechanik und Grundbau, (Hrsg.: SEMPRICH, S.), TU Graz, Mitteilungsheft 10, pp. 178–192.

LEAKE, S.A. - PRUDIC, D. E. (1991): Documentation of a Computer Program to Simulate Aquifersystem Compaction using the Modular Finite-difference Ground-water Flow model. U.S. Geological Survey.

LERMAN, A. (1979): Geochemical Processes - Water and Sediment Environments, Wiley and Sons, New York

MÁRKOS G. (1987): A hidrogeokémiai rendszerek diffúziós folyamatai, 1.rész: Alapfogalmak és korszerű diffúzióelmélet, Hidrológiai Közlöny, 67. 5-6. pp.255-271.

MATHERON, G. (1973): The Intrinsic Random Functions and Their Application, Advanced Applied Probability, 5, pp. 439-468.

McDONALD, M.G. - HARBAUGH, A.W. (1988): MODFLOW, A Modular Three-Dimensional Finite Difference Groundwater Flow Model US Geological Survey Water Resources Inv. Bk.6, Chap. A1., Washington D.C., Open-file report 83-875

McDONALD, M.G. - HARBAUGH, A.W. – ORR, B.R. – ACKERMANN D.J. (1991): BCF2 - A Method of Converting No-flow Cells to Variable-head Cells for the U.S. Geological Survey Modular Finite-Difference Ground-water Flow Model. U.S. Geological Survey, Open-File Report 91-536, Denver.

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

MEIJA – RODRIGUEZ-ITURBE (1974): On the Synthesis of Random Field Sampling from the Spectrum: An Application to the Generation of Hydrologic Spatial Processes. Wat. Res. Res. 10(4), 705-711.

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

NYE, P.H. (1979): Diffusion of Ions and Uncharged Solutes in Soils and Soil Clays, Advances in Agronomy, Vol. 31, pp. 225-272.

OGATA, A. (1970): Theory of Dispersion in Granular Medium, US Geological Survey Professional Paper, 411-I.,US. Government Printing Office, Washington

OGATA, A. - BANKS, R.B. (1961): A Solution of Differential Equation of Longitudinal Dispersion in Porous Media, US Geological Survey Professional Paper, 411-A., US. Government Printing Office, Washington

PECK, V. - GORELICK, S. - DE MARSILY, G. - FORSTER, S. - KOVALEVSKY, V. (1988): Consequences of Spatial Variability in Aquifer Properties and Data Limitations for Groundwater Modelling Practice, IAHS Publication, No. 175, pp. 25-30., 37., 54-55, 78-113.

PERKINS, T.K. - JOHNSTON, D.C. (1963): Review of Diffusion and Dispersion in Porous Media Society of Petroleum Engineering J., Vol.3. pp. 70-84.

POETER E. P. – Hill M.C. (1998): Documentation of UCODE, a Computer Code for Universal Inverse Modeling, U.S. Geological Survey, Water-Resources Investigations Report 98-4080.

PORTER, L.K. - KEMPER, W.D. - JACKSON, R.D. - STEWART, B.A. (1960): Chloride Diffusion in Soils as Influenced by Moisture Content, Proc. of Soil Sciences Society of America, Vol. 24(6), pp.400-403.

PRUDIC, D. E. (1988): Documentation of a Computer Program to Simulate Stream-aquifer Relations using a Modular, Finite-difference, Grund-water Flow model, U.S. Geological Survey, Open-File Report 88-729, Carson City, Nevada.

QUIGLEY, R. M. - YANFUL, E.K. - FERNANDEZ, F. (1987): Ion Transfer by Diffusion through Clayey Barriers, Proc. Geotechnical Practice for Waste Disposal, American Society of Civil Engineers, Geotechnical Special Publications 13. pp. 137-158,

REDDEL, D.L. - SUNADA, D.K. (1970): Numerical Simulation of Dispersion in Groundwater Aquifers, Colorado State University, Hydrology Paper, 41, p 79.

ROWE, R.K. (1987): Pollutant Transport Through Barriers Proc. ASCE Conf. on Geotechnical Practice for Waste Disposal, pp. 159-181.

SACHER, H. P. (1983): Berücksichtigung von Unsicherheiten bei der Parameterschätzung für mathematisch-numerische Grundwassermodelle, Mitteilungen Institut für Wasserbau, RWTH Aachen, Vol. 49

SAUTY, J.P. (1980): An Analysis of Hydrodispersive Transfer in Aquifers, Water Resources Research, 16(1) pp.145-158.

SCHAARS F.W. - van GERVEN, M.W. (1997): Density Package, Simulation of Density Driven Flow in MODFLOW. KIWA-report SWS 97.511, ISBN 90-74741-42-8. KIWA Research & Consultancy, Nieuwegein. The Netherlands.

SCHEIDEGGER, A.E. (1957): On the Theory of Flow of Miscible Phases in Porous Media, J. of Geophysical Resources, Vol. 66(10), pp. 3273-3278.

SHACKELFORD, Ch.D. (1990): Transit Time Design of Earthen Barriers, Engineering Geology, 29:79

SHACKELFORD, Ch.D. - DANIEL, D.E. (1991): Diffusion in Saturated Soil I.: Background, J. of Geotechnical Engineering, Vol.117. pp.467-484.

SHAW, D.J. (1986): Bevezetés a kolloid és felületi kémiába, Műszaki Könyvkiadó, Budapest

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

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

STEINER F. (1990): A geostatisztika alapjai, Tankönyvkiadó, Bp.

STRACK, O.D.L. (1989): Groundwater mechanics, Prentice-Hall, Englewood Cliffs

STRECKER, R.W. - CHU, W. (1986): Parameter Identification of Groundwater Contaminant Transport Model, Groundwater, 24(1); pp.56-62.

SZABÓ I.-KOVÁCS B. (1994): Numerikus modellszámítás a Gyöngyös-Atkári Vízmű védőidomának meghatározásához Szakvélemény, Kézirat

SZÉKELY F. (1986): Felszín alatti vizek konvektív kémiai tömegtranszportjának numerikus modellezése Hidrológiai Közlöny, 66.évf.4-5. pp.255-259.

TAMÁS J. – KOVÁCS B. – BÍRÓ T. (2002): Vízkészlet – Modellezés, egyetemi jegyzet, ISBN963 472 657 7, Debreceni Egyetem, p. 200.

THEIS, C.V. (1935): The Relation between the Lowering of the Piezometric Surface and the Rate and Duration of Discharge of a Well using Ground Water Storage, Transactions of American Geophysical Union, 16th Annual Meeting, Part 2. pp. 519-524.

VAN ROOY, D. - ROSBJERG, D. (1988): The Effect of Conditioning Transport Simulations on Transmissivity, Head and Concentration Data, Consequences of Spatial Variability in Aquifer Properties and Data Limitations for Groundwater Modelling Practice (Ed.: PECK, A. et al.), IAHS Publication No.175 pp. 163-177.

VÍZÜGYI MŰSZAKI SEGÉDLET (1994): Vízben oldódó szennyezőanyagok terjedése talajvízben, Országos Vízügy Hivatal, VMS-299-83

VOGT, M. (1993): Einsatz eines 3D Grundwassermodels im Rahmen der Umweltvertäglichkeitsprüfung für die Sonderabfallverbrennungsanlage in Kehl, Mitteilungen Inst. für Bodenmechanik und Grundbau, (Hrsg.: SEMPRICH, S.), TU Graz, Mitteilungsheft 10, pp. 193-205.

WATER SCIENCE AND TECHNOLOGY BOARD OF THE NATIONAL RESEARCH COUNCIL (1990): Ground Water Models, Scientific and Regulatory Applications, National Academy Press, Washington D.C., p.303.

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

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

YEH, W.W-G. - YOON, Y.S. - LEE, K.S. (1983): Aquifer Parameter Identification with Kriging and Optimum Parameterization, Water Resources Research, 19(1), pp. 225-233.

ZHENG, C. (1992): MT3D, A Modular Three-Dimensional Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion, and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems, IGWMC, Delft

ZHENG, C. (1996): MT3D Version DoD_1.5, a Modular Three-dimensional Transport Model, The Hydrogeology Group, University of Alabama.

ZHENG, C. – WANG P. P. (1998): MT3DMS, A Modular Three-dimensional Multispecies Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems. Documentation and user's guide. Departments of Geology and Mathematics, University of Alabama.

Tartalomjegyzék

1. Előszó helyett… 1
2. A hidrodinamikai és transzportmodellezés feladatai, célja, sajátosságai 3
3. A modellezés szakaszai és lépései 6
4. A víz porózus közegbeli mozgásának törvényszerűségei.....11
4.1. A hidrodinamikai modellezés elméleti alapjai, a szivárgás alapegyenlete.11
4.1.1. Telített közegbeli permanens szivárgás 11
4.1.2. Telített közegbeli nem permanens szivárgás 11
4.1.3. Nem permanens szivárgás telítetlen közegben 13
4.2. A szivárgás alapegyenletének megoldási módjai 16
4.2.1. Analitikus megoldások.....17
4.2.2. Numerikus megoldások.....27
5. A szennyezőanyagok terjedésének törvényszerűségei porózus közegben 50
5.1. A transzport-folyamatok és a transzportegyenlet 50
5.1.1. A kémiai anyagmérleg 51
5.1.2. A transzportfolyamat elemei.....51
5.1.3. A porózus közegben mozgó konzervatív szennyezőanyagokra érvényes transzportegyenlet 61
5.2. A transzportegyenlet megoldási módjai.....63
5.2.1. Analitikus megoldások.....63
5.2.2. Numerikus megoldások.....71
5.2.3. Részecskeszemléletű szimulációs eljárások 79
6. A modellszámítások adatrendszere.....82
6.1. A hidrodinamikai és transzportmodellek adatigénye.....82
6.1.1. A hidrodinamikai modell adatigénye.....82
6.1.2. A transzportmodell-számítás adatigénye 83
6.2. A modellszámítások adatigényének kielégítése.....83
6.2.1. A rendelkezésre álló adatok megbízhatósága, az alapadat-rendszer értékelésének szempontjai.....84
6.2.2. A modell-adatrendszer kialakítása.....86
6.2.3. Az adatrendszer méretének optimuma.....91
6.3. A modell-adatrendszer hibáinak okai és jellegzetességei.....91
6.4. Az alapadat-rendszer ellenőrzése.....93
7. A modellek kalibrációja 95
7.1. Az inverz számítási eljárásokkal végzett kalibráció 96
7.2. A trial-and-error módszer (közvetett közelítés).....98
7.3. Az autokalibráció és a trial-and-error módszer összevetése.....100
7.4. A térinformatikai rendszerek (GIS) alkalmazási lehetőségei a kalibráció során 100
8. A Processing MODFLOW for Windows (PMWIN) környezet bemutatása 103
8.1. Munka a PMWIN környezetben 105
8.1.1. A menürendszer 106
8.2. A Legfontosabb MODFLOW csomagok.....127
8.2.1. Kút csomag (Well package).....127

8.2.2. Szivárgó csomag (Drain package) 128
8.2.3. Folyó csomag (River package) 128
8.2.4. GHB csomag (General Head Boundary) 129
8.2.5. Maradó beszivárgás (Recharge package)....130
8.2.6. Növényborítottsági csomag (Evapotranspiration) 130
8.2.7. Függőleges gát csomag (Horizontal Flow Barrier package) 131
8.2.8. Visszanedvesedés (Wetting Capability) 132
8.2.9. Időben változó nyomásszintek csomagja (Time-variant Heads)....132
8.3. A Grid Editor (rácsháló szerkesztő) használata 133
8.4. A munkakörnyezet beállítása 140
8.4.1. Vonalrajzok (digitális alaprajzok) megjelenítése 140
8.4.2. Az Options → Environment parancs 142
8.5. A MODFLOW futattása....145
8.6. Eredmények kiértékelése és PMPATH....146
8.6.1. A File menü....148
8.6.2. A Run menü 149
8.6.3. Az Options menü....150
8.6.4. A Help menü 152
9. Felhasznált irodalom 153
Tartalomjegyzék

AQUAPLUS Kúttúró, Kútfúró és Vízépítő Kft.

6762 Sándorfalva, Szőnyházi út 1.

Telefon: (06-62) 251-747 ♦ Telefax: (06-62) 250-961

aquaplus@aquaplus.hu ♦ www.aquaplus.hu

Társaságunk, az AQUAPLUS Kúttúró, Kútfúró és Vízépítő Kft. 1989. szeptember 15-én alakult. Tagjai természetes személyek, akik a vízfeltárás, üzemeltetés területén korábban is magas szakmai követelményeket kívánó területeken dolgoztak.

FŐBB TEVÉKENYSÉGI KÖREINK:

- Önkormányzati tulajdonban lévő víziközművek és szennyvízművek üzemeltetése koncesszios szerződések keretében
- Vállalatok, vállalkozások saját vízbázisra épülő vízellátásának tervezése, kivitelezése, üzemeltetése
- Geotermikus energia feltárása, hasznosítása, hasznosító művek építése, hagyományos energiahordozók kiváltása
- Termálvízbázisú szabadidő és gyógyászati célú fürdőközpontok tervezése, építése, üzemeltetése
- Melyfúrású víz- és termálkutak tervezése, kivitelezése, javítása, eredménygaranciával
- Kutatás, fejlesztés, ivóvízbázisok védelmére vonatkozó célprogramban való részvétel
- Vízkezelő berendezések (vas- és mangántalanító, ammóniamentesítő, gáztalanító, vegyszeradagoló) tervezése, kivitelezése

Társaságunk tevékenységéről tovább, bővebb felvilágosítást az alábbi szakértők adnak:

A Z AQUAPLUS Kft. TEVÉKENYSÉGI TERÜLETE	SZAKMAI REFERENSEK NEVE	TELEFONSZÁMA
Vízgépészeti szerelések, ivóvíz hálózatok építése	Joó Mátyás	(62) 251-747 * (30) 9298-191
Geotermikus energia hasznosítása, fúrású üzemeltetés	Kurunczi Mihály	(92) 511-093 * (30) 370-1029
Közüzemi víz- és szennyvízszolgáltatás	Sándor Zsolt	(62) 251-747 * (30) 9150-141
Hidrogeológiai tanulmányok, tervezés	Olasz József	(62) 251-747 * (30) 206-7692
Ivó- és termálvízkutak kivitelezése	Privászki-J. Zsolt	(62) 251-747 * (30) 9689-833
Kutatás, fejlesztés, vízbázis védelem	Dr. Viszkok János	(1) 225-8830 * (30) 515-8531

Cg: 01-09-066730

GEOHIDRO GEOTECHNIKAI KFT.

1142. Budapest, Tengerszem u. 25.

Telefon: (+36) 1 468 22 33; (+36) 30 922 98 04 * Fax: (+36) 1 468 22 34

A kft. tevékenységi körei:

1. Helyszíni vizsgálatok:

- geotechnikai – talajmechanikai feltárások fúróberendezéssel és aknával, zavart és magmintás-vételezéssel
- szondázások, IN SITU talajvizsgálatok
- geotechnikai és környezetvédelmi megfigyelő rendszerek telepítése és ezzel kapcsolatos vizszintészlelő- és termelőkutak építése
- földmunkák műveszése
- környezeti állapotfelmérés

2. Laboratóriumi vizsgálatok

- talajosztályozó vizsgálatok
- egyirányú nyomószilárdság vizsgálatok
- vízáteresztőképesség, diszperzitás vizsgálatok
- kompressziós vizsgálatok
- triaxális vizsgálatok
- tömöríthetőségi vizsgálatok
- termoanalitikus vizsgálatok

3. Tervezői és szakértői tevékenység

- geotechnika (tervezés és előmunkálatok, szakértés)
- vízkiszorítók kőzetszemei hálózatai
- vízárolók
- vízgazdálkodási környezet- és vízminőség-védelmi létesítmények
- hidrogeológia
- környezeti felülvizsgálat
- építőmesteri szerkezetek
- geodézia
- talajmechanika, alapozás, földművek, föld alatti műtárgyak
- megfyelési műszaki ellenőr
- vízfeltárás, kútfúrás

Főbb referencia-munkáink:

- **Bős – Nagymaros Vízlépcsőrendszer** geotechnikai feltárási, tervezési, hidrogeológiai, mérnökgeológiai munkái, valamint a monitoring hálózat kiépítése, ezzel kapcsolatos vizsgálatai
- **Kőszárhely-terv torkolatlezárás** (VVT) munkálatában való részvétel
- **Mezőse-mocsár** termőszemcsevédelmi tartalék rehabilitációjának és a kapcsolódó megfigyelőrendszer fúrásai, kivitelezési és műszaki ellenőrzési munkái
- **Budaörs egyetem** és **Iroda** vizsgálata (helyszíni, laboratóriumi vizsgálatok, földmunkák, állékonysági vizsgálatok)
- **Szabics, Ipari hulladéklerakó telep**, geotechnikai szakvélemény
- **Miskolc, BOSCH-csarnok**, geotechnikai szakvélemény
- Üzletközpontok, irodaházak (**CORA, Michelfák, BRICOSTORE, Lurdy**-ház) melyépítési, vízteleítési tervének elkészítése
- **Duna részletes medररfelvétele** a budapesti hidak környezetében
- Víztornyok, antennák (VODAFONE, T-MOBIL) alapozásának tervezése
- **SUZUKI üzemcsarnok**, Esztergom
- **Budapest, 4. sz. metró** pesti oldali állomások és vonali műtárgyak hatása a talajvíz és rétegvíz (hidrogeológiai modellezés)
- Budapest, 4 sz. metró Baross tér felszíni rendezése, talajmechanikai és hidrogeológiai szakvélemény
- **Pécsi műszerkönyv** zagytároknak feltárási, ezzel kapcsolatos-kiépítési, laborvizsgálati, geológiai, hidrogeológiai, állékonysági vizsgálati, illetve a rekultivációs kialakításának tervezése

Várjuk kedves megrendelőink jelentkezését!!!

E-mail: geohidro@geohidro.hu; **Web:** www.geohidro.hu

GEOKOMPLEX KFT.

3527 Miskolc, József Attila u. 59.
Telefon: 06-46-505 146 , Fax: 06-46-345 000
E-mail: geokomp@axelero.hu Website: www.geokomplex.hu

A Geokomplex Kft. 1990-ben alakult az Orszagos Földtani Kutató és Fúró Vállalat szakmai utódaként, átvette legjobb szakembereit, berendezését, laboratóriumi eszközeit és a több évtizedes kutatási eredményeket dokumentáló földtani adattárát.

Vízépítési-vízbázisvédelmi berendezések tervezése, kivitelezése:

- Kutak, vízműrek, vízfúrólyukak-, szennyvízfúrólyukak tervezése, engedélyeztetése
- Védőidomok kijelölése, engedélyeztetése alapkutatástól üzemeltetési engedélyig
- Vízkutatás, egyedi vízellátó rendszerek, öntözőkutak tervezése, kivitelezése
- Termálvíz-és ásványvíz kutak tervezése, vizsgálata, értékelése
- Kútfúrás, meglévő kutak felújításának, felújítása, javítása
- Ivóvízminőség javító alternatívák, tervek készítése, engedélyeztetése
- Hidrogeológiai-hidraulikai terpi és laboratóriumi vizsgálatok
- Felszíni vízrendezési tervek.

Földtani-bányászati-környezetvédelmi kutatás tervezése, kivitelezése:

- Ásványi nyersanyag kutatási és műszaki üzemi terv, zárójelentés, készletszámítás, bányatelekfektetési dokumentáció, bányaműszaki üzemi terv, fúrórendezési terv
- Magfúrások, spirál- és kamafúrás, műszaki fúrások, injektáló fúrások
- Földtani-talajmechanikai laboratóriumi anyagvizsgálatok
- Talajmechanikai szakvélemények, minősítő vizsgálatok, alapozási szakvélemények
- Környezetvédelmi állapotfelmérés, felírás, hatásvizsgálat, környezetvédelmi program.

Felszínről 1000 m-ig tervezünk, fúrunk, mérünk és értékelünk.

Forduljon hozzánk bizalommal!

Golder Associates (Magyarország) Kft.
1021 Budapest, Hűvösvölgyi út 54.
Tel.: (1) 394-0005 Fax: (1) 394-0002
e-mail: golder@axelero.hu
homepage: http:\\www.golder.com

TAPASZTALAT ÉS MEGBÍZHATÓSÁG VILÁGSZERTE

A Golder Associates az öt világrész mintegy 140 országában szerzett 40 éves tapasztalatával, több mint 3000 munkatárs szakismeretével és a legkorszerűbb technikai hátterrel áll Megbízói szolgálatára – 1992 óta Magyarországon is – az alábbi szakterületeken:

- **Környezeti állapot felmérése, helyreállítása**
  - környezeti állapotfelmérések, hatásvizsgálatok
  - műszaki beavatkozás tervezése, engedélyeztetése
  - hosszú távú monitoring rendszer tervezése és üzemeltetése
  - kármentesítések felülvizsgálata, műszaki ellenőrzése
  - in-situ kármentesítési technológiák tervezése, kivitelezése
- **Környezetvédelmi felülvizsgálat**
  - felvásárláshoz, privatizációhoz, felszámoláshoz és új beruházásokhoz kapcsolódó „due diligence" auditok
  - I. és II. fázisú környezetvédelmi felülvizsgálatok
  - egységes környezethasználati engedély (IPPC) kérelem összeállítása, tanácsadás
- **Biztonsági elemzés, jelentés; kockázatfelmérés**
  - alternatív projektstratégiák szimulációja
  - környezeti kockázat kvalitatív és kvantitatív meghatározása
  - „scenario" elemzés
  - ipari létesítmények, hulladéklerakók biztonsági elemzése
  - nukleáris létesítmények biztonsági elemzése
- **Kommunális-, ipari-, és nukleáris hulladékgazdálkodás**
  - hulladékgazdálkodási beruházások tervezése, bonyolítása
  - ipari hulladéklerakók (szilárd, zagy) rekultivációja
  - Kohászios Alap pályázati anyagok elkészítése ill. felülvizsgálata (megvalósíthatósági tanulmány, környezeti hatástanulmány, kölcsög-hasznon elemzés, tender dokumentációk)
- **Építőmérnöki szolgáltatások**
  - környezetvédelmi, hulladékkezelő rendszerek tervezése
  - Projekt Irányítási Rendszerek tervezése
  - építési műszaki ellenőrzés, FIDIC mérnökszolgáltatások
  - megújuló energiaforrások hasznosítása
  - geotechnikai szolgáltatások
- **Környezettőldtani kutatás**
  - helyszín kiválasztása, részletes helyszíni kutatás
  - szennyeződés- transzport folyamatok vizsgálata, modellezése
  - létesítmények és környezetük kölcsönhatásának vizsgálata
- **Bányászat**
  - bányászati kőzetmechanika
  - rekultiváció és tájrendezés tervezése, engedélyeztetése
  - ásványi nyersanyagok kutatása
  - szénhidrogén telepek rezervoármechanikai szimulációja
- **Hidrogeológia**
  - vízbeszerzésher kapcsolódó hidrogeológiai kutatások
  - vízbázisok diagnosztikája, biztonságba helyezés tervezése
  - egyszerű és rétegszelektív kútháttérvizsgálatok, interferencia vizsgálatok, multipakkers megfigyelő rendszerek
  - hidraulikai modell-számítások proózus és repedezett közegben
  - vízbeszerzési műtárgyak tervezése, engedélyeztetése

További irodáink: USA · Kanada · Brazília · Chile · Peru · Dánia · Finnország · Franciaország · Németország · Nagy-Britannia · Olaszország · Spanyolország ·Svédország · Dél-afrikai Köztársaság ·· Kína · Hong-Kong · Fülöp-szigetek · Indonézia · Thaiföld ·· Ausztrália · Új-Zéland

MENDIKÁS Mérnöki Környezetvédelmi Kft.

3524 Miskolc, Kazinczy u. 28.
Telefon, fax: (46)-411-404
E-mail: mendikas.kft@chello.hu

A Környezetvédelmi Szolgáltatók és Gyártók Szövetségének tagja

Vegye meg honlapunkat is: www.freeweb.hu/mendikas

MSZ EN ISO 9001:2001 minőség-irányítási rendszer

Környezeti hatástanulmány készítés

Környezeti károk felmérése, kárelhárítási terv készítés, kármentesítés

Környezethasználati engedély kérelem (IPPC) készítés

Közmeghallgatás előkészítése, lebonyolítása

Talaj- és talajvízszennyeződés ártalmatlanítása, monitoring rendszerek tervezése, üzemeltetése

Teljeskörű környezetvédelmi felülvizsgálat, állapot felmérés elvégzése

Települési környezetvédelmi program készítése

Környezetvédelmi tanácsadás

Hulladékgazdálkodás tervezési feladatai

Vízminőség-védelmi kárelhárítási terv készítés

Különleges bányák létesítésének előkészítő munkái (kutatási terv, kutatás, zárójelentés, környezeti hatásvizsgálat, bányatelek feltétés, műszaki üzemi terv)

Hatósági engedélyeztetési eljárások lefolytatása

A tűrésekig, illetve mérnöki minden szükséges jogosítvánnyal rendelkezünk.

Valamennyi felsorolt tevékenységre kívánó referenciák!

A cég 1994 óta a **környezetvédelem és vízföldtani** kutatás szinte minden területén dolgozik. Tevékenységi körünk egy része a szennyezett ipari területek kármentesítésére kapcsolódik. Készítünk környezeti **állapotfelmérőket**, **kockázatelemzőket**, kiviteli tervet és elvégezzük a **kármentesítést** is. Különösen a talajvíz tisztításában értünk el szép eredményeket saját fejlesztésű berendezésinkkel. Új beruházások megvédjvezésére környezeti hatásvizsgálatokat készítünk.

Résztvesszünk pályázatok, valamint kiviteli tervek elkészítésével a Környezetvédelmi Alap Célfeladatként kezelt, bányavállalkozókra át nem hárított **tájrendezési feladatok** ellátásában.

1998 óta tevékenységünk jelentős része „A sérülékeny földtani környezetben lévő ivóvízbázisok diagnosztikai vizsgálata" országos programhoz kapcsolódik.
A programon belül **rejtett vízföldtani kutatást** végzünk, amelynek célja az egyes vízművek védőterületeinek meghatározása **numerikus modellezéssel**, az állapotértékelés és a biztonságba helyezési tervek elkészítése.

A programon kívül is végzünk vízföldtani modellezéseket, többek között hévízkutak védőidomának meghatározását. Összességében az ország különböző területén csaknem félszáz kisebb-nagyobb vízföldtani modellt készítettünk VISUAL MODFLOW, PROCESSING MODFLOW és FEFLOW szoftverekkel. Legutóbb eredményünk, hogy az országban először készítettünk 3D hőtranszport és áramlási modellt regionális területre, karsztos hévíztartóra.

SMARAGD-GSH Kft. a TÜV CERT eljárás alapján a környezetvédelmi és hidrogeológiai szakértés, kutatás, tervezés, fejlesztés, kivitelezés érvényességi területen **minőségbiztosítási rendszert** vezetett be, és alkalmaz 1999 óta. A rendszer megfelel az ISO 9001:2000 szabvány követelményeinek. Rendelkezünk a Nemzeti Akreditáló Testület által NAT-1-0966/2002 nyilvántartási számon kiadott, az MSZ EN ISO/IEC 17025:2001 szabványnak megfelelő **mintavételi akkreditálással**. A SMARAGD–GSH Kft. szakember gárdája, eddigi tevékenysége, és referenciamunkái alapján rendelkezik a feladatok elvégzéséhez szükséges akkreditálásokkal, megedélyekkel és a **Magyarországi Kamara tervezői** jogosultságával.

SMARAGD-GSH
Környezetvédelmi Szolgáltató Kft.
1114 Budapest, Villányi út 9.
e-mail: smaragd@smaragd.hu

Tel: (20) 935-3394, (20) 951-0402
Tel: (1) 361-4341, Fax: (1) 279-0022
www.smaragd.hu

Már Magyarországon is beszerezhetők a
Röhrenwerk Kupferdreh Carl Hamm GmbH termékei !

– Szondázó-berendezések
– Fúróberendezések
– Kútkiképzéshez kellékanyagok
– Vízmintavételi eszközök
– Vízanalitikai műszerek
– Levegő és gázanalitikai műszerek
– Mintavevők

– Talajvizsgálati műszerek
– Beton-, cement-, aszfalt- és betonvizsgálatra alkalmas műszerek
– Általános laborberendezések

GÁMA-GEO Kft.
3519 Miskolctapolca, Benczúr utja 111.
3529 Miskolc, Ifjúság utja 12. fszt3.
☎/🖷: 46-431-857

További termékek és információk a www.gama-geo.hu honlapon !

Már Magyarországon is beszerezhetők a
Röhrenwerk Kupferdreh Carl Hamm GmbH termékei !

– Szondázó-berendezések
– Fúróberendezések
– Kútkiképzéshez kellékanyagok
– Vízmintavételi eszközök
– Vízanalitikai műszerek
– Levegő és gázanalitikai műszerek
– Mintavevők

– Talajvizsgálati műszerek
– Beton-, cement-, aszfalt- és betonvizsgálatra alkalmas műszerek
– Általános laborberendezések

GÁMA-GEO Kft.
3519 Miskolctapolca, Benczúr utja 111.
3529 Miskolc, Ifjúság utja 12. fszt3.
☎/🖷: 46-431-857

További termékek és információk a www.gama-geo.hu honlapon !