



PhD értekezés

A DNAPL (Dense Non-Aqueous Phase Liquid) típusú szennyeződések felszín alatti transzport-folyamatainak szimulációja

Zákányi Balázs

okleveles környezetmérnök

Tudományos vezető:

Prof. Dr. Szűcs Péter

egyetemi tanár

Doktori Iskola vezetője:

Prof. Dr. Dobróka Mihály

egyetemi tanár

MIKOVINY SÁMUEL FÖLDTUDOMÁNYI DOKTORI ISKOLA

Miskolc, 2013.

Tartalom

1. Bevezetés	1
2. A talaj- és talajvíz szennyező halogéntartalmú szerves vegyületek tulajdonságai	4
2.1. Fizikai tulajdonság	5
2.2. Kémiai tulajdonságok	9
2.3. Emberi egészségre, környezetre gyakorolt hatások	11
3. A halogéntartalmú szerves vegyületek viselkedése és terjedése a felszín alatti környezetben	13
3.1. LNAPL típusú szennyezőanyagok	13
3.2. DNAPL típusú szennyezőanyagok	14
4. A DNAPL szennyező anyagok terjedésének meghatározása és monitorozása a földtani közegben és a vizekben	20
4.1. DNAPL szennyezők kiterjedésének meghatározása	21
4.1.1. A telítetlen zónában lévő szennyezőanyag fontossága	21
4.1.2. A kis átteresztőképességű rétegek jelentősége a DNAPL szennyezőanyagok esetében	22
4.1.3. A gócterületek lehatárolása	22
4.1.4. A térbeli lehatároláshoz használható eszközök, eljárások	23
4.2. DNAPL szennyezőanyagok mintavételezésének speciális eszközei	26
4.3. DNAPL szennyező anyagok monitorozásának speciális eszközei	29
4.4. A monitoring kutak szűrőhosszainak jelentősége	32
5. A szimulációkhoz alkalmazott Groundwater Modeling System háromdimenziós hidrogeológiai modellező rendszer bemutatása	34
5.1. DNAPL transzportmodellezési lehetőségek a Groundwater Modelling System programcsomagban	36
5.1.1. Az UTCHEM modul	37
5.1.2. A SEAM3D modul	39
6. Kihívások a DNAPL szennyezőanyagok transzport folyamatainak szimulációi során	41
6.1. Több fázisú áramlás	41
6.2. Numerikus megoldások bemutatása	46
6.3. A speciális szennyeződések transzport folyamatainak szempontjából fontos szerepet játszó numerikus közelítő módszerek bemutatása esettanulmányokon keresztül	50
6.3.1. Több szinten szűrőzött kutak hidraulikai viszonyainak vizsgálata véges differencia módszerrel, a transzport modellezések megbízhatóságának növelése érdekében	50
6.3.2. Gátak, töltések vizsgálata speciális szennyezőanyagok (pl. zagytározók) tárolásánál, végelelemes numerikus módszert alkalmazó modul segítségével	57
7. Lehetőségek a DNAPL transzport szimulációk megbízhatóságának növelésében	62
7.1. Agyag lencsék visszatartási határfokának meghatározása	62
7.1.1. Vízszintes fekvésű esete	62
7.1.2. Ferde fekvésű esete	68
7.2. Laboratóriumi permeabilitás görbék bevitele az Utchem modulba	76
7.3. Sztochasztikus modellezés alkalmazása speciális szennyezőanyagok modellezésénél	84
8. Eredmények értékelése, tézisek	94
9. Summary	96
10. Köszönetnyilvánítás	98

A DNAPL (Dense Non-Aqueous Phase Liquid) típusú szennyeződések felszín alatti transzport-folyamatainak szimulációja

1. Bevezetés

A halogénezett szénhidrogének környezeti elemekre és az élővilágra kifejtett káros hatásainak felismerése és kezelése körülbelül 30-40 évvel ezelőtt kezdődött a világon, hazánkban 20 évvel ezelőtt. A fejlett országokban szabályozták a halogénezett szerves vegyületek forgalmazását, kezelését, sőt egyes vegyületek gyártását és forgalmazását be is tiltották (Markóné, 2001).

A halogénezett szerves vegyületek vízben általában rosszul oldódnak, ez az egyik oka annak, hogy biológiai úton nehezen bomlanak le, ezért a természetes tisztulásuk igen lassú. Ennek a következménye, hogy az évtizedekkel ezelőtti szennyeződések a mai napig kimutathatók, többnyire az eredetileg szennyezett területnél szélesebb környezetben (Kueper et al., 2003). Emberi beavatkozás nélkül még igen hosszú ideig várhatnánk e környezeti szennyezők természetes eltűnésére. A szennyeződés mennyiségének csökkentése érdekében, mind a talaj- és talajvíz-helyreállítási feladatnak két alapvető megoldása alkalmazható:

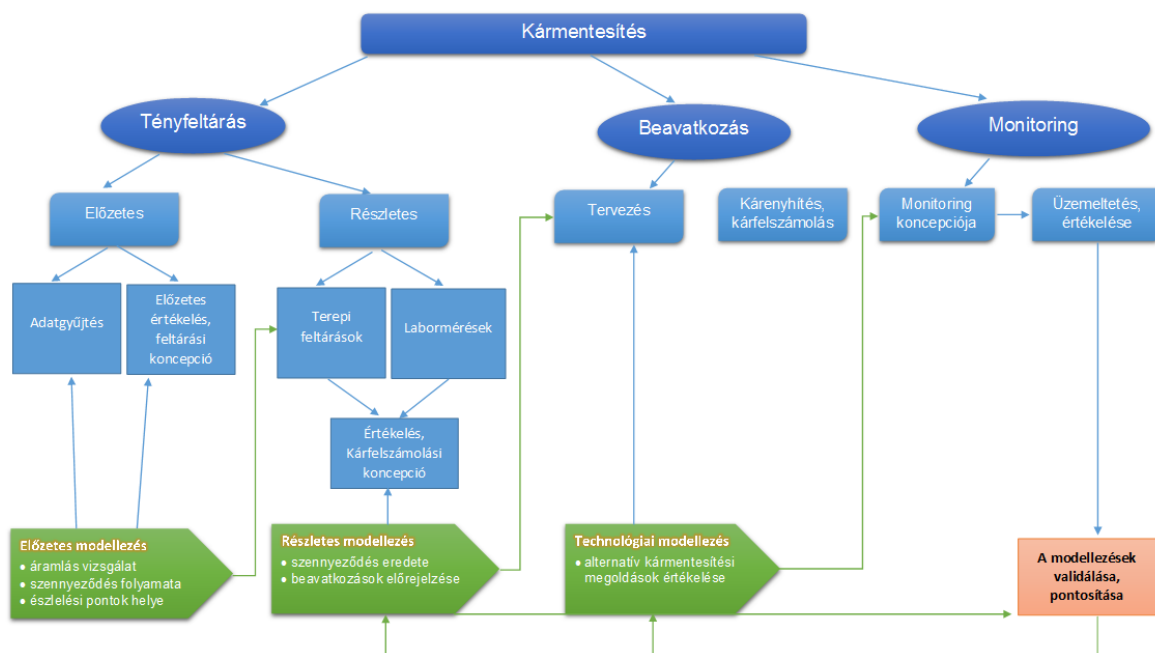
- a talaj kitermelése után a helyszínen (on-site) vagy attól távolabb (ex-situ) végzett ártalmatlanítást és tisztított közeg visszatáplálását, továbbá
- a helyben (in-situ), tehát a talaj felszíne alatt végzett kezelést (Markóné, 2001; Filep et al., 2002).

Az utóbbi két évtizedben egyre több korszerű in-situ kármentesítési technológia kerül/t alkalmazásra, illetve egyre több tapasztalat áll rendelkezésre ezekkel kapcsolatban. Az in-situ technológiák előnye a kisebb költség, hátránya, hogy nehezebben ellenőrizhetők és sokkal jobban függenek a helyi adottságoktól. Ezek ellenére a nemzetközi trendek azt mutatják, hogy ezeknél a speciális szennyezőanyagoknál a helyszíni beavatkozások kerülnek előtérbe. Tekintettel a felszín alatti rétegek heterogenitására és komplex hidrogeológiai viszonyaira, a talaj és a talajvíz megtisztítására alkalmas módszer kiválasztása, a technológia megtervezése a helyszínen igen gondos geológiai feltérképezése, az áramlási viszonyok ismeretét, a szennyezők koncentrációinak mérését, a különböző szempontok egyeztetését és minden esetben előzetes laboratóriumi és kísérleti üzemi vizsgálatok elvégzését igényli (Halmóczy, Gondi, 2010).

Hazánkban, az Észak-Magyarországi Régióban jelenleg is jelentős működő vegyipari vállalatok helyezkednek el. Emellett számos múltbeli és jelenleg zajló nehézipari és ipari tevékenység környezeti hatásai komoly kockázatokat jelentenek a környezeti

elemekre, így a felszín alatti vízkészletekre is. Például a klórozott szénhidrogénekkal szennyezett területeken (több százra tehető ezek száma) a sekély felszín alatti víz (talajvíz) mellett mélyebb víztartók elszennyeződésével is számolni kell (pl. Tiszaújváros), ami esetenként vízbázisok vízminőségét is veszélyeztetheti, amint azt az elmúlt évtizedek tapasztalatai megerősítenek. A környezeti elemeket érintő megörökölt ipari és bányászati eredetű szennyezések feltárása és felszámolása még napjainkban is tart.

Ehhez a súlyos örökséghez kötődően kezdtem el kutatásaimat a speciális, felszín alatti vizekbe jutó szennyező anyagok (Dense Non-Aqueous Phase Liquid /továbbiakban DNAPL/, klórozott szénhidrogének stb.) transzport folyamatainak vizsgálata és szimulációk megbízhatóságának növelésére vonatkozóan. A vizsgálataim eredményeképpen pontosabbá váló hidrogeológiai modellezésnek továbbra is igen jelentős szerepe lesz a felszín alatti környezetszennyeződések felszámolását megcélzó újszerű kármentesítési eljárások tervezésében, méretezésében és e rendszerek működésének nyomon követésében (**1. ábra**). A numerikus szimulációk alkalmazása ma már elengedhetetlen kelléke a hidrogeológiai kutatásoknak, illetve a szakmai döntéshozatalnak.



1. ábra A hidrodinamikai- és transzport-modellezés szerepe a kármentesítés folyamatán.

Mindezeket figyelembe véve fontos feladatnak tartom ezeknek a módszereknek a folyamatos fejlesztését, javítását. Továbbá jelentős kérdéseket vet fel a többfázisú áramlások numerikus szimulációjának telített közegekben történő megoldása, hiszen

ebben a kérdéskörben jelenleg kevés program kínálkozik és a meglévők alkalmazása is nehézségekbe ütközik.

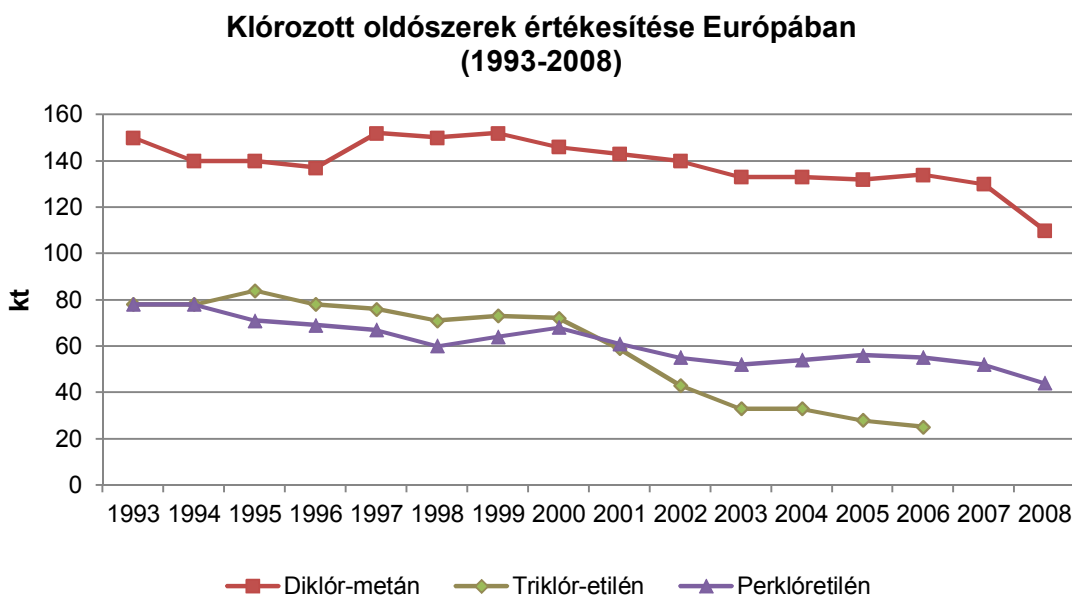
A fentiek kapcsán kutatásom fő célkitűzései a következők:

1. A víztől nehezebb önálló fázisú szennyezők (koncentrálva a klórozott szénhidrogénekre) legfontosabb fizikai-kémiai tulajdonságainak összefoglalása, melyek a transzport-modellezéséhez nélkülözhetetlenek.
2. A víznél nagyobb sűrűségű szennyezőanyagok viselkedésének és terjedésük fontosabb jellemzőinek összefoglalását a felszín alatti közegben, továbbá tényfeltárásuk jelentőségének, a felmerülő nehézségeknek és kihívásoknak az összefoglalása. Néhány olyan feltárási technológia ismertetése, amelyek mára már nélkülözhetetlen eszközzé nőttek ki magukat az ilyen típusú szennyezőanyagoknál külföldön és használatuk egyre elterjedtebb hazánkban is.
3. Az alkalmazott Groundwater Modeling System (GMS) szimulációs program bemutatása, kiemelve ebből azokat a modulokat (UTCHEM, SEAM3D), amelyekkel lehetséges a speciális szennyezőanyagok felszín alatti mozgásának modellezése. A többfázisú áramlás transzport folyamatainak analitikus leírása, illetve esettanulmányokon keresztül a modellezési programok által leginkább alkalmazott két numerikus módszer ismertetése:
 - a. Több szinten szűrőzött kutak hidraulikai viszonyainak vizsgálata véges differencia módszerrel, a transzport modellezések megbízhatóságának növelése érdekében.
 - b. Gátak, töltések vizsgálata vízre és víztől nehezebb önálló fázisú szennyezőanyagok (pl. zagyártározók) tárolásánál, végeselemes numerikus eljárást alkalmazó modul segítségével.
4. A DNAPL típusú szennyezőanyagok transzport folyamatainak megbízhatóbb megismerése érdekében végzett szimulációk eredményeinek bemutatása.
 - a. Agyag lencsék visszatartási határfokának meghatározása.
 - b. Laboratóriumi permeabilitás görbék beépítése az UTCHEM modulba.
 - c. Sztochasztikus modellezés alkalmazása speciális szennyezőanyagok modellezésénél.
5. Végezetül az elvégzett kutatások fő megállapításainak és a jövőbeli célkitűzések ismertetése.

2. A talaj- és talajvíz szennyező halogéntartalmú szerves vegyületek tulajdonságai

Az Iparban hosszú ideje, igen sokféle célra használnak fel halogénezett szerves vegyületeket: halogénezett szénhidrogéneket és származékaikat, így pl. olajok és zsírok oldószereként, a vegyiparban aktív reagensként, fakonzerváló anyagként vagy elektromos szigetelőanyagként (Kueper et al., 2003). A halogénezett származékok, elsősorban a klórtartalmú szerves vegyületek (Polychlorinated Organic Compounds, PCOC) számos tagjának használata különösen a XX. század 60-as és 70-es éveiben terjedt el (Markóné, 2001), és a mai napig használják őket különböző iparágak, bár a termelés intenzitása csökken, amelyre példát az **2. ábra** mutat.

A használt, szennyezett oldószereket nem egy esetben hulladéklerakón deponálták, onnan az idők folyamán a talajba és a talajvízbe szivárogtak. Nem kellő gondoskodás, kezelés mellett vagy balesetek folytán még ma is fennáll a veszélye annak, hogy halogénezett szerves vegyületek kerülnek a környezetbe (Markóné, 2001). A DNAPL típusú szennyezőanyagokat az **1. táblázatban** feltüntetett csoportokba kategorizálhatjuk.



2. ábra. Európában termelt diklór-metán, triklór-etilén és perklóretilén 1993-2008 között. (Internet_1 adatai alapján)

Számos szerves halogénszármazékról kiderült időközben, hogy az élővilágra nézve ártalmas. Némelyik bizonyítottan karcinogén, másoknál fennáll ennek gyanúja. Toxicitásuk folytán kipszűthetjék vagy megváltoztathatják a talaj faunáját, mikroflóráját és káros hatással lehetnek az élővilágra (Kueper et al., 2003).

1. táblázat A szerves DNAPL szennyezőanyagok csoportosítása.

Csoport	Vegyület
Klórozott oldószerek	tetraklór-etilén (PCE), triklór-etilén (TCE), diklór-metán, 1,1,1-triklór-etán (TCA), kloroform, diklór-benzol, szén-tetraklorid, 1,2-diklór-benzol, 1,3-diklór-benzol, 1,2-dibrométán (EDB), 1,1,2-triklór-benzol, 1,2,4- triklór-benzol
Kőszénkátrány és Kreozot	A kőszénkátrány, a kőszén levegő nélküli hevítésével képződő terméke. Ennek további párlata a kreozot.
PCBs (Poliklórozott-bifenil) mixek	Aroclor 1221, Aroclor 1232, Aroclor 1242, Aroclor 1248, Aroclor 1254
Egyéb halogénezett szerves vegyületek	benzil-klorid, bróm-benzol, brómklor-metán, brómdiklor-metán, brómoform, 4-bróm-fenil-fenil-éter, bisz (2-klór-etil)-éter, 2-klór-etil-vinil-éter, 1-klór-1-nitro-propán, 4-klór-fenil-fenil-éter, dibrom-klórmetán, 1,1-diklór-metán, 1,2-difluór-tetraklór-etán, 1-jód-propánt, hexaklorid-butadién, pentaklór, 1,1,2,2-tetrabrométán, 1,1,2,2-tetraklór-etán, 1,2,3-triklór-etán, 1,1,2-triklór-1,2,2-trifluor-etán
Szubsztituált aromás-, ftalát-, és egyéb szerves-vegyületek	klór-anilinek, klórtoluolok, nitrotoluolok, nitrobenzol benzil-butil-ftalát, di-n-butil-ftalát, dietil-ftalát, o-anizidin, fenil-éter, tri-o-krezol-foszfát
Peszticidek	klórdán, klórpikrin, 1,2-dibrom-3-klór-propán, 1,2-dikloropropán, 1,2-dikloropropilén, diklórfosz, diszulfoton, etion, etilén-dibromid, malation, paration

A halogénezett szénhidrogéneket telített vagy telítetlen szénhidrogénekből származtatjuk le úgy, hogy egy vagy több hidrogénatomot halogénatommal – fluorral, klórral, brómmal, vagy jóddal – helyettesítünk (*Berecz, 1991*).

A halogénezett szénhidrogének transzport folyamatait a felszín alatti környezetben a földtani közeg sajátosságain kívül az adott vegyi anyag fizikai, kémiai jellemzői befolyásolják, ezek a teljesség igénye nélkül a sűrűség, kinematikai viszkozitás, felületi feszültség, kémiai összetétel, oldhatóság vízben és egyéb oldószerekben, gőznyomás, Henry-állandó, nedvesítő képesség (*Kueper et al., 2003*). A következőkben a klórozott szénhidrogénekre koncentrálva, ezeket a tulajdonságokat veszem sorra, illetve bemutatom az egészségi környezeti hatásukat is.

2.1. Fizikai tulajdonság

Néhány kis molekulatömegű halogénszármazék gáz, a közepes molekulatömegűek folyadék, a nagyobb molekulatömegűek pedig szilárd halmazállapotúak. Éghetőségük a halogéntartalom függvénye: így pl. a metil-klorid (CH_3Cl) még éghető, a metilén-klorid (CH_2Cl_2) már nem, a szén-tetrakloridot (CCl_4) pedig tűzoltó berendezésekben használták (*Furka, 1988*).

Az elektronegativitás és dipólus momentum

A halogének elektronegativitása nagyobb, mint a hidrogéné, amit helyettesítenek, a jód kivételével nagyobb, mint a széné, amelyhez kapcsolódnak, ezért a szén-halogén kötés poláros. A halogén atomon részleges negatív, a szénatomon részleges pozitív töltés van.

A következménye ennek egyrészt az, hogy a halogénezett szénhidrogének reakcióban a halogénatomot hordozó szénatom elektrofil centrumaként viselkednek, másrészt ezzel magyarázható, hogy a szénhidrogének halogénezett származékainak többsége tekintélyes dipólus momentummal rendelkezik (*Furka, 1988*).

Felületi feszültség

A felületi feszültség a felszín alatti többfázisú folyadékok migrációját jellemző egyik legfontosabb fizikai-kémiai tulajdonság (*Pankow, Cherry, 1996*).

Két folyadékfázis közötti határfelületen a molekulák között ható kohéziós erők mindkét fázisban kiegyensúlyozatlanok: ezek hozzák létre a határfelületi feszültséget – egy kifeszített membránhoz hasonló – mely a lehető legkisebb területű határfelület létrejöttéhez vezet. Ez a kiegyensúlyozatlan erő a bemutatott határfelületen demonstrálja, hogy a nyomás, a különböző folyadékok esetében eltérő lehet (**3-5. ábrák**) (*Shaw, 1986*).

Ezen felületi erő jelentőségét kiválóan szemléltetik a többfázisú rendszerekben az áramlási egyenletek (*Bear, Cheng, 2010*), hiszen ezek nagyobb mértékű függőséget mutatnak a felületi feszültségtől, mint egyéb fizikai-kémiai tulajdonságoktól (pl.: peremszög, viszkozitás, stb.) (*Pankow, Cherry, 1996*).

Az (1) egyenlet, ezen tulajdonságokat egy kör keresztmetszetű fázisban mutatja meg:

$$\Delta P = \frac{2 \cdot \sigma}{r}, \quad (1)$$

ahol

ΔP = nyomáskülönbség [Pa],

σ = felületi feszültség [Pa·m],

r = a felület görbületi sugara [m].

Nedvesítő képesség

A nedvesítő képesség a folyadékok szilárd részecskékhez való affinitását jellemzi, ahol a két folyadék közül a felületet jobban nedvesítő terül szét a szilárd fázis felületén, kiszorítva a kevésbé nedvesítőt onnan (*Shaw, 1986*).

A nedvesedés a peremszög segítségével ábrázolható, ami a folyadék-folyadék határfelület és a szilárd felület által bezárt szög. A nedvesedés általában nem vizes fázisokra vonatkozik, vizes fázisok esetében az alábbiak szerint mérhető (*Makó, Hernádi, 2012*):

- Általában jellemző, hogy a víznél nagyobb sűrűségű nem vizes fázisú szennyezőanyagok (DNAPL) nem nedvesítik a felületet a vízhez viszonyítva ld. **3. ábra**. Annak ellenére, hogy mindkét folyadék kapcsolatban van a felülettel a víznek jóval nagyobb az affinitása (nedvesít). Ezen esetekben a

peremszög kisebb, mint 90° (a DNAPL globuláris formája eltűzött, a peremszög helyes ábrázolása érdekében.)



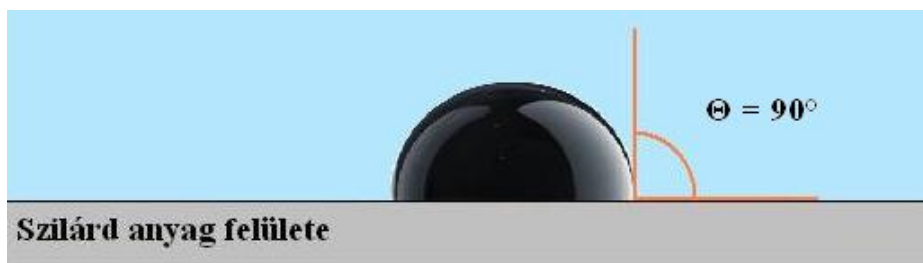
3. ábra. A DNAPL szennyeződésekre jellemző nem nedvesítő alak.

- A következő esetben a DNAPL affinitása nagyobb a felülethez (nedvesít), mint a víznek (nem nedvesít). Ekkor a peremszög nagyobb 90° .



4. ábra A nagyobb affinitású DNAPL szennyezőanyagok kontakt szöge.

- Az előző esetekből következik, hogy lehetséges olyan eset, amikor a peremszög éppen 90° . Ekkor semleges körülmények jellemzők, mint pl. kőolaj-víz és kőszénkátrány-víz elegyekben semlegesen nedvesedő DNAPL típusú szennyezőanyagoknál (Pankow, Cherry, 1996).



5. ábra. Semleges körülmények között lévő DNAPL szennyeződés.

A DNAPL szennyezők jelentős mennyisége a földtani közegben nem nedvesít, így a kisebb pórusokban lévő helyeket a víz tölti ki és terjed szét a felületeken, míg a DNAPL szennyezőket kiszorítja a nagyobb nyílásokba (Bedient et al., 1999).

A nedvesítés a folyadékok és a szilárd felület tulajdonságaitól függ. A legtöbb problémát okozó víznél nagyobb sűrűségű nem vizes fázisú szennyezőanyagok nem nedvesítik a szilárd felületet, azonban figyelembe véve a talajvíz összetételét, a DNAPL alkotóit és a szilárd felületek jellemzőit, az egyes területeken az anyagok komplex nedvesedését kell figyelembe venni (*Pankow, Cherry, 1996*).

Kapilláris nyomás

Miután a DNAPL típusú szennyezők a vízhez viszonyítva nem nedvesítenek (ld. fent) így a nyomásuk általában nagyobb. Két folyadékfázis (DNAPL-víz) közötti határfelület a nedvesítő-nem nedvesítő fluidum között nyomáskülönbség alakul ki, ezt az eltérést a kapilláris nyomás okozza (P_c), mely a következő formában írható le:

$$P_c = \Delta P = P_{nw} - P_w, \quad (2)$$

ahol

P_{nw} = a nem nedvesítő folyadék fázis nyomása [Pa],

P_w = a nedvesítő folyadék fázis nyomása [Pa] (*Mercer, Cohen, 1996*).

A kapilláris nyomás a felületi feszültséggel, a pórusmérettel és a peremszöggel van összefüggésben (*Mercer, Cohen, 1996*).

Illékonyág, oldhatóság, sűrűség

A halogénezett szénhidrogének illékonyága közelítőleg azonos az ugyanolyan molekulatömegű szénhidrogénekével. A sűrűség nő a halogén rendszámával (*Furka, 1988*). A szénhidrogének halogénezett származékai vízben kevéssé oldódnak, csak szerves oldószerekben. Lipofil tulajdonságuk teszi őket alkalmassá zsírok és olajok oldására- (*Markóné, 2001*) (elterjedten használják erre a világon, bár mennyiségüket próbálják csökkenteni).

Olvas és forráspont

Olvas és forráspontjuk jóval magasabb az azonos szénatomszámú szénhidrogénekénél, de ezt jóval nagyobb moláris tömegükkel, így a molekulák közt kialakuló erősebb diszperziós kölcsönhatással is megmagyarázhatjuk (*Furka, 1988*).

Viszkozitás

Az abszolút vagy dinamikai viszkozitás a folyadékoknak azt a tulajdonságát fejezi ki, hogy bennük a szomszédos rétegek közötti lamináris elmozdulást mekkora ellenállás (belső súrlódás) akadályozza. Általában a szerves folyadékok abszolút viszkozitása növekszik a növekvő molekulamérettel, a molekulák összetettségével és a polaritással, ugyanakkor csökken a hőmérséklet emelkedésével, a halogénezettség fokának a növekedésével (*Makó, Hernádi, 2012*).

A folyadékok dinamikai viszkozitásának és fajlagos tömegének hányadosaként származtathatjuk az ún. kinematikai viszkozitást. A vizes fázistól elváló halogénezett szénhidrogének mozgékonyágát a dinamikai viszkozitástól jobban jellemzi, hiszen a folyadék viszkozitásának és fajlagos tömegének együttes hatását fejezi ki (Makó, Hernádi, 2012).

2.2. Kémiai tulajdonságok

A halogénatom okozta polaritás jelentősen nem befolyásolja a vegyület fizikai sajátságait. A kémiai sajátságok túlnyomó többsége viszont a poláris kötésekkel van kapcsolatban (Markóné, 2001).

A halogénezett szénhidrogének elméleti és gyakorlati szempontból egyaránt fontosak. Mivel reakcióképes vegyületek, egyrészt kiterjedt alkalmazást nyernek kiindulási anyagként laboratóriumi és ipari szintézisekben, másrészt ez a tulajdonság okozza a legnagyobb problémát a földtani közegben vagy felszín alatti vízben, hiszen ha több ilyen szennyeződés van jelen akár egymással is reakcióba léphetnek új vegyületet alkotva (Furka, 1988).

Legfontosabb reakcióik a következők:

Szubsztitúciós reakciók: A halogénezett szénhidrogének jellemző csoportját ezen reakciók képezik, amelyek során a halogénatom egy másik atomra vagy atomcsoportra cserélődik ki. Az ilyen reakciónál, amelyekben a támadó reagens szolgáltatja az új kötéshez az elektronpárt, az ún. távozó csoport pedig magával viszi kötő elektronpárját, nukleofil szubsztitúciós reakciónak nevezzük (Furka, 1988., Atkins, 2002).

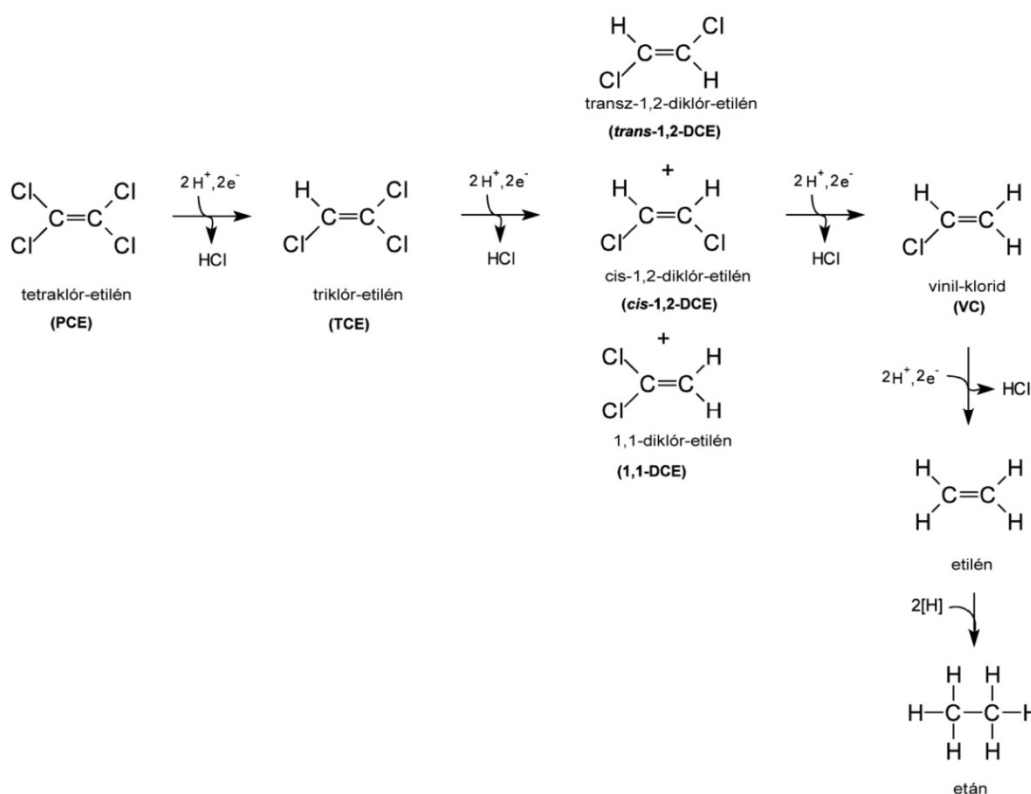
Eliminációs reakciók: A halogénezett szénhidrogének erős bázis (vagy erős hevítés) hatására olyan reakció is végbemehet, amelyek során lehasad a halogénatom és vele a szomszédos (ritkábban az azonos vagy a szomszédosnál távolabbi) szénatomról egy hidrogénatom. Az ilyen átalakulásokat, amelyek során egy szerves vegyületből két atom vagy atomcsoport hasad le (anélkül, hogy helyükre más szubsztituensek lépnének), eliminációs reakciónak nevezzük (Furka, 1988).

A klórozott szerves vegyületek lebomlása

A klórozott szerves vegyületek által okozott környezeti károk a felszín alatti víz szennyeződését okozzák. Mikrobiológiai úton elvileg lebonthatók. Például a klóretilének közül a tetraklór-etilén aerob viszonyok között, oxigén jelenlétében nem, vagy alig lebontható. A klóretilén lebomlásához anaerob körülmények szükségesek (KvVM, 2010).

Az klórozott szerves vegyületek átalakulása anaerob körülmények között leginkább a metanogenezis feltételei mellett megy végbe. A tetraklór-etilén (PCE) egymást követő

lebomlási lépéseit a **6. ábra** mutatja be. A PCE anaerob deklórozható etilénné, amely tovább redukálódik etánná. Ebben a lebomlási folyamatsorban azonban nem ugyanolyan sebességgel mennek végbe az egyes átalakulások. Erre vonatkozóan leginkább az a közelítő szabály érvényes, hogy egy adott redoxpotenciál mellett minden egyes rákövetkező átalakulási lépés lassabban megy végbe, mint a megelőző. Ez eredményezi azt a helyzetet, hogy anaerob feltételek mellett először a kismértékben klórozott cDCE és/vagy vinil-klorid (VC) anyagcsere termékek felhalmozódnak, majd nagyon lassan bomlanak le tovább.



6. ábra A PCE lebomlási sora anaerob körülmények között (KvVM, 2010).

Szorpció

A szorpció magában foglal két folyamatot:

- az elsőnél a szennyeződés a szilárd anyag felületén kötődik meg (adszorpció),
- míg a másodiknál a talaj belsejében oldódik (abszorpció).

A halogénezett szénhidrogének, mint döntően apoláros vegyületek, elsősorban a talaj szerves anyagaihoz kötődnek. E szennyezők talaj és víz közti megoszlása függ az apolaritás mértékétől, amelyet az oktanol/víz dimenzió nélküli megoszlási hányadossal (K_{ow}) szoktak jellemezni. Minél nagyobb ez a szám, annál rosszabbul oldódik az illető vegyület vízben (Markóné, 2001, Atkins, 2002; Montgomery, 2007).

A talaj összes szerves széntartalmára vonatkoztatott adszorpciós koefficiens (K_{oc} [l/kg]) számítására a következő összefüggés ismeretes (US EPA, 1996, Montgomery, 2007):

$$\log K_{oc} = 0.00028 + (0.983 \cdot \log K_{ow}). \quad (4)$$

Az illékony szerves vegyületeknél (VOC) laboratóriumi mérések alapján az US EPA (1996) a következő képletet ajánlja:

$$\log K_{oc} = 0.0784 + (0.7919 \cdot \log K_{ow}). \quad (5)$$

A K_{oc} értéke a bifenil poliklór-származékaira (PCB) és a policiklikus aromás szénhidrogénekre (PAH) tipikusan 10^4 - 10^7 ($\log K_{oc}=4$ -7). A talaj/víz egyensúlyi állandó értéke (K_d [l/kg]) ebből a talaj széntartalma ismeretében (f_{oc} [kg/kg]) számítható (Montgomery, 2007; Makó, Hernádi, 2012):

$$K_d = f_{oc} \cdot K_{oc}. \quad (6)$$

Kiszámítható, hogy az egyensúly még igen kis széntartalom mellett is erősen a talajszemcsék irányába tolódik el (pl. 1% szén esetén $K_d=10^2$ - 10^5 [l/kg] nagyságrendű).

Az általam elvégzett numerikus számításoknál ezeknek a paramétereknek az ismerete nagyon fontos, hisz ezek nélkül a modellezési eredmények nem közelítik a valóságot, és így az esetleges kármentesítésekhez készített szimulációk rossz következtetések levonáshoz vezethetnek.

A klórozott szénhidrogének néhány fizikai-kémiai paraméterét, amelyeket a bemutatott modellezési szimulációk során is alkalmazok (pl. oldhatóság vízben, sűrűség, gőznyomás, viszkozitás, $\log K_{ow}$, $\log K_{oc}$ stb.) az **1. melléklet** mutatja.

2.3. Emberi egészségre, környezetre gyakorolt hatások

A halogéntartalmú szerves vegyületek kedvezőtlen élettani hatásokat váltanak ki a környezetben:

- a talajban megakadályozzák az ott jelen lévő szervezetek szaporodását, ezzel megváltoztatva a mikroorganizmusok eredeti összetételét, mindez kihat a magasabb rendű élőlények életfeltételeinek alakulására is (Montgomery, 2007),
- nagyobb koncentrációban utóbbiakra toxikusak (idegmérgek) lehetnek,

- a talajvíz közvetítésével e vegyületek az élővizekbe is bekerülhetnek, ahol a vízi ökoszisztémát károsíthatják, sőt bekerülhetnek a táplálékláncba (*U.S. Department of Health and Human Services, 2000*).

Az emberi szervezetre gyakorolt hatások szempontjából különös jelentősége van egyes klórozott szénhidrogének rákkeltő hatásának, az örökítő anyag károsításának, és a magzat veszélyeztetésének. Mint azt fentebb említettem az eddigi tényfeltérési tapasztalatok azt mutatják, hogy a klórozott szénhidrogének illetve azok bomlástermékei nem csak a felszín alatti környezetben, hanem nagyon sok helyen kimutathatók. A klórozott szénhidrogénnel szennyezett területeken a sekély felszín alatti víz (talajvíz) mellett mélyebb víztartók elszennyeződésével is számolni kell (*Montgomery, 2007*).

Oda kell figyelni, hogy nem csak az oldószerekkel szennyezett víz, hanem a felszín alatt jelenlévő oldószergőzök épületekbe bepárolgva is veszélyeztethetik az emberi egészséget (*ATSDR, 2011*).

A poliklórozott-bifenilek (PCB) és ezekből létrehozott PCB mixek, több bizonyított emberi egészség károsítást okoztak a múltban (pl. Yusho incidens Japán – olajjal szennyezett rizs és feldolgozása, és Yu Cheng incidens Tajvan – hal és étel szennyeződése, feldolgozása) és okozhatnak a jelenben és a jövőben is:

- Bizonyított, hogy a PCB-k különböző daganatos megbetegedéseket (pl. lymphómákat, prosztatata- és vér-rákot) (*De Roos et al. 2005, Hardell et al. 2006*);
- Súlyos légúti fertőzéseket és krónikus bronchitist (*Kuratsune, 1989; Rogan, 1989*);
- A PCB 153 és a 2-es típusú cukorbetegség kialakulásának összefüggését bizonyította svéd halászokon *Rignell-Hydbom és szerzőtársai (2007)*;
- A nőknél okozhatnak a PCB-k neurodegeneratív (pl. Parkinson-kor) betegségeket (*Steenland et al., 2006*);
- Gyerekeknél megfigyelték azt is, hogy a poliklórozott-bifenilek fogszuvasodást és vesztést is okoztak (*Jan and Vrdic, 2000; Jan et al. 2007*).

3. A halogéntartalmú szerves vegyületek viselkedése és terjedése a felszín alatti környezetben

A szennyező anyagok egy része a felszín alatti vizek mozgását követi és a hidrodinamika törvényszerűségeinek felhasználásával vizsgálhatjuk, ezért ezeket konzervatív szennyezőanyagoknak nevezzük. Másik típusú szennyezőanyag csoport az úgy nevezett nem konzervatív szennyezőanyagok, ezek más fizikai törvényszerűségeknek engedelmeskednek (Kovács, 1998). A nem konzervatív szennyezőanyagokat szokás nem vízfázisú folyadékoknak angol Non Aqueous Phase Liquid (továbbiakban NAPL) vegyületeknek nevezni. Az NAPL vegyületek mozgását a viszkozitás mellett uralkodóan a sűrűségük határozza meg, ennek megfelelően víznél könnyebb és nehezebb nem vízfázisú vegyületekről vagy az angol nevezéktant átvéve LNAPL és DNAPL vegyületekről (L = light, D = dense) beszélhetünk attól függően, hogy a külön fázis sűrűsége kisebb vagy nagyobb-e a víznél (Pankow, Cherry, 1996; Poehls, Smith, 2009; Makó, Hernádi, 2012).

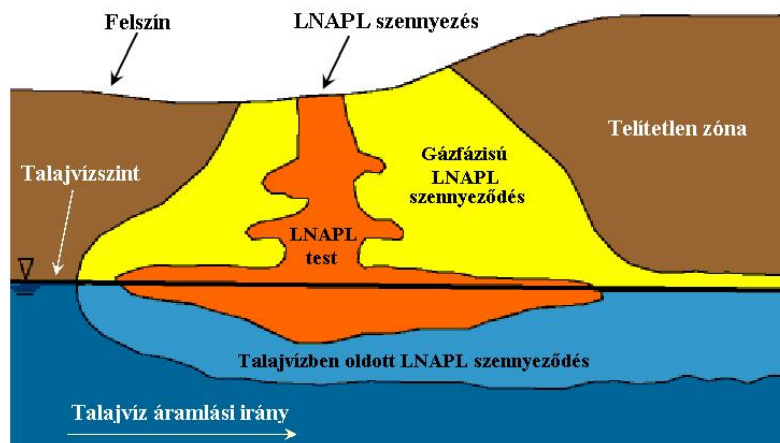
Először, röviden, a víznél könnyebb szennyezőanyagok mozgását mutatom be.

3.1. LNAPL típusú szennyezőanyagok

LNAPL szennyeződés (mint pl. különböző kőolajszármazékok – benzin, gázolaj, egyes olajfajták, benzol stb.) talajba kerülése után, a nehézségi erő hatására lefelé húzódik és olajtest alakul ki a telítetlen zónában (7. ábra), amelynek alakja és nagysága a talaj és az alatta elhelyezkedő képződmények nemétől és szerkezetétől, valamint a szennyeződés mennyiségétől és fizikai tulajdonságaitól függ (Laurer, 2007; Berkowitz, 2008).

A beszivárgó szennyezés alakja szimmetrikus, közel hengeres homogén talajban, inhomogén talajban a kisebb áteresztőképességű réteg a szivárgási keresztmetszet növekedését (LNAPL szétterülését) okozhatja (Berkowitz, 2008). A jobb áteresztőképességű rétegbe való átmenetnél lényegében azonos marad a szivárgási keresztmetszet (Barótfi, 2000).

Ha a beszivárgott LNAPL szennyezőanyag - pl. olaj - mennyisége meghaladja a szivárgási tartomány olajvisszatartó képességét, akkor az olaj egészen a talajvízig hatol (Filep et al, 1999). Elegendő mennyiség esetén az elszivárgási hely alatt behatolhat a talajvízbe (7. ábra). Ha az olaj nyomása miatt közvetlenül behatol a talajvíztartó rétegbe, akkor a nyomás kiegyenlítése után gyorsan felemelkedik annak felszínéig, és egyensúlyi helyzetet vesz fel, majd a kapilláris sávban a talajvízáramlás irányában fog elmozdulni (Newell et al., 1995; Makó, Hernádi, 2012).



7. ábra Az LNAPL szennyezők mozgásának sematikus rajza (*Delin et al., 1998 alapján*).

A szétterülés egy többé-kevésbé vastag, kifelé vékonyodó alakzatban történik. A szétterülés befejezésekor keletkező lapos olajtest – amelyet olajlencsének is neveznek – olajtartalma változó, de átlagosan arányos a szétterülési zóna befogadó kőzetének olajvisszatartó-képességével (*Laurer, 2007*). Közvetlenül a beszivárgási tartomány környezetében sokkal nagyobb az olajtartalom, mint a lencse felett. Az olajlencsének tehát van „magja” és „szegélye” (*Berkowitz, 2008; Makó, Hernádi, 2012*). A fázisban található olaj felett gázfázisban lévő szénhidrogéneket is találhatunk (*Poehls, Smith, 2009*). Ha felülnézetből tudnánk szemlélni az olajlencse elterjedési alakját, akkor a talajvíz esésének megfelelően ovális alak jön létre, ahol, az ovális alakzat nagy tengelye a felszín alatti vízáramlás irányával párhuzamos. Igen kis esések mellett az olajlencse elterjedése, különösen a kezdeti időben még inkább kör alakú (*Laurer, 2007*).

Az olajlencse kialakulásának ideje több évet is jelenthet, éppen ezért a talajvíz szintjének évi ingadozása mindenképpen megakadályozza, hogy az előzőekben vázolt olajlencse-forma kialakuljon (*Berkowitz, 2008*).

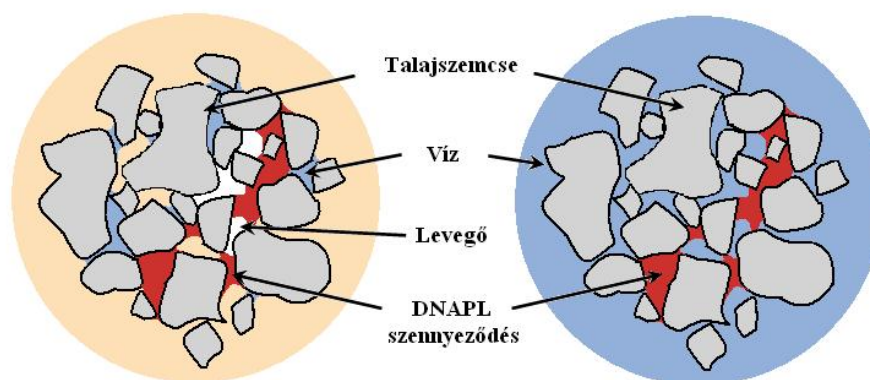
Az olajtestből a szivárgó víz, vagy az áramló talajvíz anyagot old ki, amely elsősorban a talajvízáramlás irányában a hidrodinamikai és a mechanikai diszperzió hatására szétterülve, egyre szélesedő csóva alakjában, tehát egyre kisebb koncentrációval halad előre (*Laurer, 2007*).

3.2. DNAPL típusú szennyezőanyagok

A felszín alatti környezetbe került vízzel nem elegyedő, és a víznél nagyobb sűrűségű anyagok (pl. klórozott szénhidrogének) a gravitáció hatása alatt a földtani közeg áteresztőképessége és szerkezeti sajátosságai által meghatározott irányokban terjednek, és kiszorítják a pórustérből, repedésekből a levegőt és a vizet (*Poehls, Smith, 2009*). A

szerves fázis tovább mozogva már csak részlegesen tölti ki a pórusteret, repedéseket, és szerves visszamaradó fázisú cseppeket, ereket (az angol nyelvű irodalomban residual DNAPL) hagy hátra maga után (**9. ábra**). Ezeket a kapilláris erő tapasztja a szemcsékhez, repedések falához, mert a víz és szerves folyadék fázisok, illetve a gáz és szerves folyadék fázisok közt kialakul a felületi feszültség (*Pankow, Cherry, 1996*). A szerves fázis alkotta cseppek és erek átmérője általában a törmelékes üledék szemcseméretének 1-10-szerese és a pórustér 5-20 %-át tölti ki. Az ilyen típusú szerves fázist a szilárd szemcsékhez, felületekhez tapasztó kapilláris erők miatt még jelentős hidraulikus gradiens hatására sem képes elmozdítani, és szivattyúzás hatására a kútba beszívni (*Kueper et al., 2003*).

A nem összefüggő cseppek és erek hálózata előfordulhat a vízszint felett és alatt is. A **8. ábra** szemlélteti a maradék telítettséget képező elkülönülő szerves fázis elhelyezkedését porózus földtani közegben, telítetlen és telített zónában.

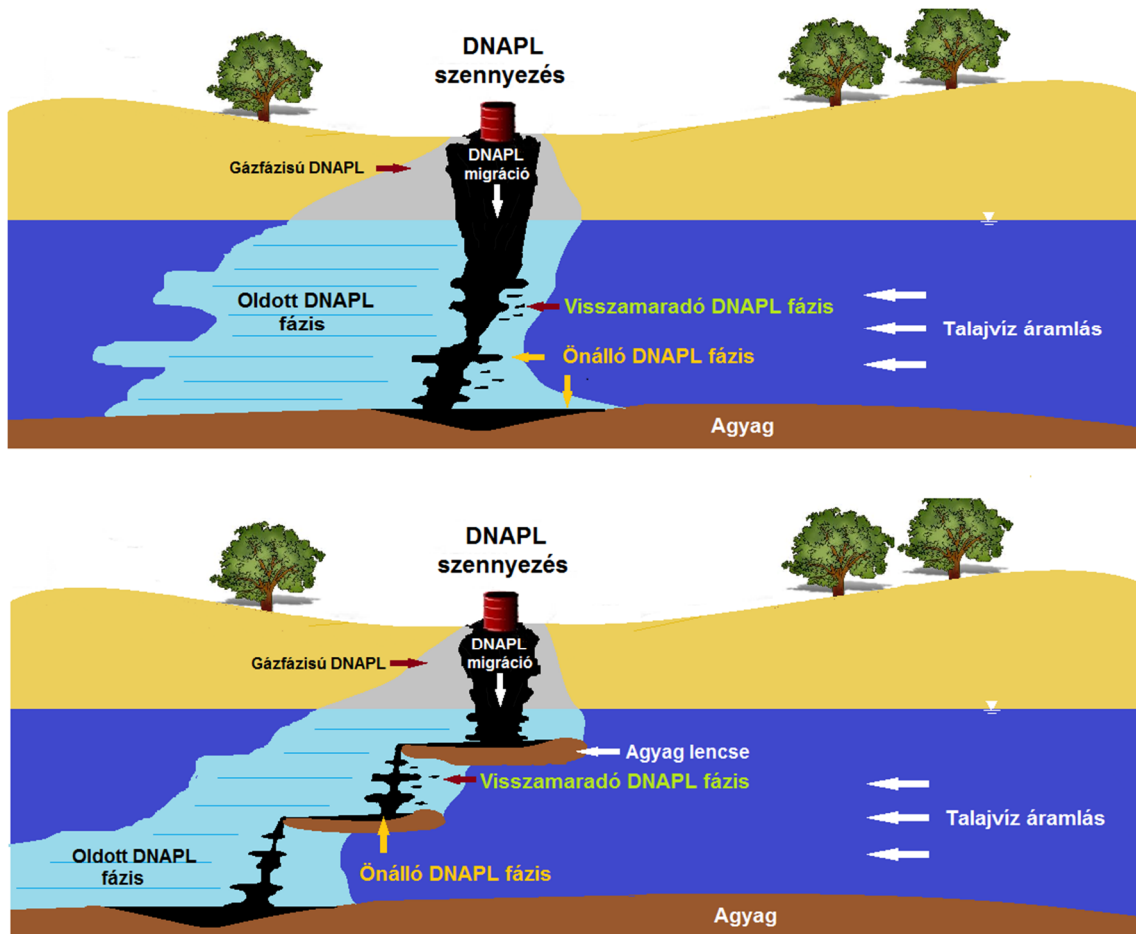


8. ábra A nem elkülönülő DNAPL szennyeződés telítetlen és telített térészben
(*Kueper et al., 2003 alapján*).

Az elkülönülő szerves fázis összefüggő önálló folyadéktestként is megjelenhet (az angol nyelvű szakirodalomban pooled DNAPL) (*Kueper et al., 2003; Kueper, Davies, 2009*), ez általában elegendő utánpótlás esetén alacsony áteresztőképességű, szivárgásllassító képződmények felszínén valószínű.

Ahol az önálló szerves fázis jelen van akár maradék telítettségként, akár összefüggő folyadékfázisként, ott létrejöhet az oldószerek beoldódása a felszín alatti vízbe, kipárolgása a póruslevegőbe, és megkötődése (adszorpció) a szilárd szemcsék felületén (*Berkowitz, 2008*). Tehát a klórozott szénhidrogének felszín alatti környezetbe kerülése során az önálló szerves fázis mellett létrejönnek a vízben oldott, a gázfázisú és a talajszemcsék felszínén megkötött szennyezett-típusok.

A földtani közeg heterogenitása miatt az áteresztőképessége is térben különböző mértékű. A **8. ábra** a DNAPL szennyezés mozgását mutatja homogén és inhomogén porózus közegben.



9. ábra DNAPL szennyeződés terjedése kisebb és nagyobb heterogenitású rendszerekben.

Az elkülönülő szerves fázis cseppekből, erekből, összefüggő folyadéktestekből lassan oldódnak be a klórozott szénhidrogén vegyületek a felszín alatti vízbe, majd kialakul az oldott csóva. A klórozott oldószerek oldhatósága általában viszonylag alacsony, a felszín alatti víz szivárgási sebessége kicsi, ezért természetes körülmények közt hosszú évtizedekig, évszázadokig tarthat az önálló fázis teljes beoldódása (Kueper, Davies, 2009). A telítetlen zónában az elkülönülő szerves fázisból a gázfázisba (párolgás) vagy a pórusteret csak részlegesen kitöltő vízfázisba lép ki a klórozott szénhidrogén vegyület (Berkowitz, 2008). Ez utóbbi a gravitáció hatására beszívároghat az összefüggő felszín alatti víztérbe. A klórozott szénhidrogén vegyületek gőznyomása viszonylag nagy, ezért az elkülönülő szerves fázis tartóssága a telítetlen zónában kisebb lehet, mint a vízzel telített zónában. Ettől függetlenül a telítetlen zónában előfordulhat klórozott

szénhidrogén gázfázisban, és a szilárd szemcsékhez kötött formában (*Pankow, Cherry, 1996*). Az elkülönülő szerves fázis hiánya a telítetlen zónában tehát nem jelenti azt, hogy ne érte volna el a vízszintet korábban a szennyezőanyag.

A szerves fázis összefüggő folyadéktesteket is alkothat finomabb szemcsés törmelékes üledékes képződmények (agyag, iszap, homokliszt, finomhomok képződmények, vagy ezek keverékei) felett, a pórusok telítettsége ilyenkor akár 70 % is lehet. A víznél nehezebb elkülönülő szerves fázis („nehézfázis”) vastagsága egy szivárgáslassító réteg felett fordítottan arányos az áteresztőképességgel, tehát az agyag felett vastagabb lehet, mint egy iszapos finomhomok réteg felett (*Kueper et al., 2003; Berkowitz, 2008*). Az összefüggő folyadéktest vastagsága annál nagyobb, minél nagyobb a szerves fázis-víz közötti felületi feszültség, minél kisebb a szerves fázis sűrűsége, és minél kisebb a kapilláris ellenállás (szemcsemérettől függ). Az összefüggő szerves fázis folyadéktest viszonylag könnyen elmozdulhat a hidraulikus gradiens növekedése esetén, szemben a nem összefüggő cseppek, erek hálózatával (a vízzel elárasztás ezért hatékony módszer a kőolajtermelésnél) (*Kueper et al., 2003*). Fentiek miatt különös elővigyázatossággal kell eljárni a gócterületeken a mélyebb felszín alatti vizet megcsapoló fúrások, kutak tervezése és kivitelezése során, és ezért kell a tényfeltárás során követni a kívülről befelé haladás elvét.

Kísérleti eredményekből ismeretes, hogy a klórozott oldószer kis térfogatáramú, hosszú ideig tartó beszivárgása esetén valószínűbb az elkülönülő szerves fázis mélyebbre jutása, mint egyszeri, nagy hozamú betáplálás esetén (*Berkowitz, 2008*).

A porózus földtani közeg átlagos szerves fázis visszatartó képességét 0.5-3.0 %-ra becsülik (*Schwille, 1981; Compère, 2001; Kueper et al., 2003*). Ez alacsonyabb érték, mint a pórusok mérettartományában megfigyelhető 5-20 % maradék telítettség. Ez azért van így, mert nem minden zónába képes behatolni a szerves fázis, és a nagyobb áteresztőképességű zónákon keresztül valószínűbb a szivárgása (*Compère, 2001*). Minél kisebb sűrűségű, nagyobb viszkozitású, nagyobb szerves fázis-víz felületi feszültségű a szerves fázis, annál hajlamosabb oldalirányú szétterülésre (*Filep et al, 1999*), azonban a bebocsátás helyétől számítva általában nem nagyobb néhány tíz vagy száz méternél a szerves fázis oldalirányú migrációja (*Kueper et al., 2003*).

Az elkülönülő szerves fázis szeszélyes térbeli eloszlásának a következménye, hogy a belőle kilépő egyedi oldott csóvák zónájában a felszín alatti vízben oldott klórozott szénhidrogén koncentrációk térben igen változékonyak.

Általánosan elfogadott gyakorlat szerint, ha a felszín alatti vízben mért koncentráció meghaladja az adott klórozott szénhidrogén effektív oldhatóságának 1 %-át, akkor az áramlási iránnyal szemben elkülönülő szerves fázis lehet jelen (*Kueper et al., 2003; US*

EPA, 2004). Természetesen a szerves fázis jelenlétét bizonyítékokra kell alapozni, de a fenti szabály azért jó, mert körültekintésre int a fúrásos feltárások, kutak tervezése során.

Ha az elkülönülő szerves fázist több vegyület alkotja, akkor az egyes vegyületek vízben mért koncentrációja alacsonyabb lesz, mint egyedi vegyületként való oldhatósági koncentrációjuk. A vegyületek „versenyeznek” az oldatba belépésért, Raoult-törvénye írja le az egyes vegyületek oldhatóságát többkomponensű fázisban (*Berecz, 1980, Atkins, 2002*), amely szerint egy alkotó vegyület effektív oldhatósága megegyezik a keverékben meglévő mól aránya és egyedi vegyületként való oldhatósága szorzatával:

$$C_i = M_i \cdot S_i, \quad (7)$$

ahol

C_i az i jelű vegyület effektív oldhatósága [mg/l],

M_i az i jelű vegyület mól aránya a keverékben,

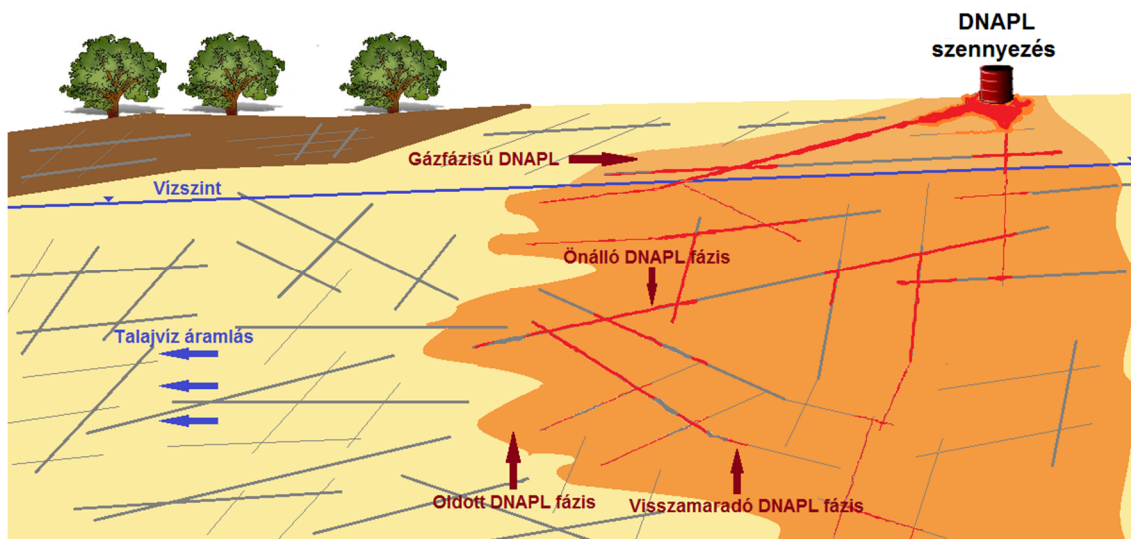
S_i az i jelű vegyület oldhatósága vízben [mg/l].

A fenti törvény egyik lényeges gyakorlati vonatkozása, hogy a legmagasabb effektív oldhatóságú vegyületek oldódnak ki először, ezek koncentrációja idővel csökken a göcök közelében. Ezzel egyidőben az egyre kisebb effektív oldhatóságú vegyületek koncentrációja egyre növekszik az idő előrehaladtával, amint a nagy effektív oldhatóságú vegyületek mól aránya csökken a szerves fázisban. A keverék szerves fázisból kilépő oldott anyagok összesített koncentrációja azonban idővel csökkenni fog, mert az egyre kevésbé oldható vegyületek kezdenek kilépni nagyobb tömegárammal az elkülönülő fázisból (*Kueper et al., 2003*). Belátható, hogy a göctől alvízi irányban mérhető összesített oldott szennyezőanyag koncentrációk csökkenése nem jelenti feltétlenül az elkülönülő szerves fázis hiányát, vagy elfogyását, csak annyit, hogy bizonyos nagyobb effektív oldhatóságú vegyületek korábban már kioldódtak (*Berkowitz, 2008*).

Raoult törvénye érvényét veszti, ha koszolvens, például kis molekulatömegű alkohol van jelen a szerves fázisban, és jelentősen megnő a klórozott szénhidrogének oldott koncentrációja a vízben való oldhatóságukhoz képest (*Atkins, 2002; Kueper et al., 2003*).

Repedezett kőzetekben is megjelenhet az elkülönülő szerves fázis folyadéktestként és cseppek, erek formájában is (*Longino, Kueper, 1999*) (**10. ábra**).

Az a nyomás, amely a szerves fázis, repedésbe való belépéshez szükséges, egyenesen arányos a felületi feszültséggel, és fordítottan arányos a repedés, rés szélességével. Tehát valószínűbb az elkülönülő szerves fázis belépése a szélesebb résekbe, ezért a repedésrendszeren belül a szélesebb rések csapása és dőlése határozza meg az elkülönülő szerves fázis mozgásának irányát. Természetesen a repedésbe belépés valószínűsége nő a szerves fázis sűrűségének növekedésével (*Wolfe et al., 1997*).



10. ábra Repedezett kőzetekben a DNAPL szennyezés mozgása. (Kueper et al., 2003 alapján)

Modellszámítások eredményei és a gyakorlat (Kueper, McWhorter, 1991, Kueper et al., 2003) azt mutatják, hogy néhány vagy néhány tíz mikrométer széles vízzel telített résekbe képesek belépni a klórozott szénhidrogének elkülönülő fázisban és ott elmozdulni. Ebből következően fel kell készülni arra, hogy az elkülönülő szerves fázis repedezett kőzetekben a kibocsátás helyétől igen távolra is eljuthatott.

A repedezett kőzetek szerves fázis visszatartó képessége általában kicsi, repedezettségéből eredő porozitásuk 0.001-0.01 közötti tartományban valószínű. 200 liter szerves fázis 20 % telítettséget feltételezve 100-1000 m³ repedezett kőzetben képes az elkülönülő szerves fázis megjeleníteni, azaz viszonylag kis oldószermennyiség hatalmas közettérfogatokat szennyez el (Kueper, McWhorter, 1991). Ezért a repedezett kőzetek, vízadók feletti gócterületeken különös gondossággal kell megtervezni a fúrásos feltárásokat, nehogy maga a feltárás mélyebb víztartók elszennyeződését okozza.

Hasonlóan a porózus képződményekhez a repedezett képződményekben is létrejönnek a felszín alatti vízben oldott, a kőzetbe diffundált, a repedés falán megkötött, valamint a telítetlen zónában gázfázisban jelenlévő szennyezési formák. A kőzetmátrixba diffúzió útján bejutott szennyező vegyületek a repedésrendszerben lévő víz megtisztulását követően a kis áteresztőképességű szemcsés laza üledékekhez hasonlóan hosszú ideig képesek a repedésekbe diffúzió útján visszaoldódni a repedésrendszert kitöltő felszín alatti vízbe (Kueper et al., 2003).

4. A DNAPL szennyező anyagok terjedésének meghatározása és monitorozása a földtani közegben és a vizekben

Az alábbi fejezetben a DNAPL szennyezőanyagok esetében alkalmazható feltérési módokat, mintavételi eljárásokat tárgyalom.

Egyes ipari területek szennyezettségének feltérképezését általában konkrét céllal, kisebb körzetekre koncentrálva készítik el (*Filep et al., 2002*). A szennyezett talaj és talajvíz megtisztítása, eredeti állapotának helyreállítása előtt ugyanis minden esetben tájékozódni kell a jelen lévő szennyezőkről és azok koncentrációiról (*Gondi et al., 2003*). Igen fontos feladat emellett megismerni a szennyeződés kiterjedését, valamint tovaterjedésének sebességét (*Kueper et al., 2003*). Mindez a terület hidrogeológiai viszonyainak ismeretét is igényli. Csak ezen tényezők meghatározása után, mérhetők fel a helyreállítási alternatívák esélyei.

A DNAPL szennyező anyagok biológiai stabilitása folytán e vegyületek a szennyező forrás megszűnése után még évtizedekkel is kimutathatók a talajban és talajvízben. Mivel azonban bizonyos mértékű természetes lebomlás a környezetben többnyire még is végbemegy, továbbá a különböző származékok rezisztenciája egymástól eltérő, a szennyezők együttes koncentrációja és az egyedi vegyületek egymáshoz viszonyított aránya is változhat az idő folyamán. Ez hosszabb ideig tartó mérésorozattal (monitorozással) követhető nyomon (*Nielsen, 2006*).

A szennyezőanyagok térbeli kiterjedéséről és eloszlásáról hagyományos fúrásos feltérások, mintavételi, és kémiai analitikai eljárások segítségével nyert kép hiányos és pontatlan, mert általában csak pontszerű, vagy éppen integrált jellegű (pl. hosszan szűrőzött kutak) kémiai ismeretek gyűjtésére kerül sor (*Halmóczy, Gondi, 2010*). A hagyományos monitoring kutak elsősorban a nagyobb áteresztőképességű rétegek vízminőségéről szolgáltatnak ismereteket, és nem tájékoztatnak a kis áteresztőképességű képződményekben jelenlévő szennyezőanyagok koncentrációjáról, mennyiségéről, és nem adnak közvetlen ismereteket az önálló szerves fázis és gázfázis jelenlétéről, eloszlásáról (*ITRC, 2003*).

A felszín alatti víz kitermelése és kezelése, mint a szennyezettség gócterületein sok helyen alkalmazott kármentesítési eljárás gyakori sikertelensége jól megvilágítja, hogy a feltérások során a monitoring kutakkal elsősorban a nagy áteresztőképességű rétegekből nyert vízkémiai ismeretekre alapozott műszaki beavatkozás általában nem éri el belátható időtávon a célját (*Halmóczy, Gondi, 2010*). Ennek fő oka, hogy csak a nagy áteresztőképességű rétegekben kimutatott oldott szennyezőanyagok koncentrációit vették figyelembe a tervezéskor, az egyéb fázisokban (önálló szerves fázis, adszorbeált fázis, gázfázis) és az alacsony áteresztőképességű rétegekben tározódott szennyezőanyagok jelenlétével pedig nem számoltak.

Mindezeket összegezve megállapítható, hogy a DNAPL szennyezőanyaggal szennyezett területek feltárása, monitorozása minden esetben egy jól végiggondolt stratégiát igényel. Ez természetesen magában foglalja azt is, hogy ezekhez a lehető legmodernebb és legjobb felbontást adó mérési, feltérési eszközöket alkalmazzuk.

4.1. DNAPL szennyezők kiterjedésének meghatározása

4.1.1. A telítetlen zónában lévő szennyezőanyag fontossága

A klórozott szénhidrogének megjelenhetnek a vízszint felett a földtani közeg pórusaiban, repedéseiben gáz halmazállapotban, elkülönülő szerves fázisban, a talajszemcsékhez kötötten és oldott fázisban (Kueper et al., 2003). A vízszint feletti környezetből képesek egyfelől beszivárogni vagy a gázfázis diffúziója útján bejutni a telített zónába, másfelől a gázfázisú szennyezők a talajgáz mozgásával (advekción) vagy diffúzió útján képesek kipárologni, és zárt terekben, épületekben felhalmozódni. Az illékony szennyezők kipárologása természetesen magából a szennyezett felszín alatti vízből is történhet, nem csak a telítetlen zónából (Gondi et al., 2003; Nielsen, Nielsen, 2007).

A gázra vonatkozó diffúziós együtthatók négy nagyságrenddel magasabbak levegőben, mint vízben. Ezért kis víztartalmú közegben a diffúzió révén rövid idő alatt nagy távolságokra eljuthat az illékony vegyi anyag, szemben a vízben történő diffúzióval (Pankow, Cherry, 1996).

A víztartalom növekedésével a gázfázisú szennyezők terjedése egyre nehezebb, mozgásuk lelassul, mert a levegővel kitöltött pórustér csökkenésével a terjedési útvonalak hossza megnő (tortuozitás), és a pórusvízben is kezdenek dúsulni a szennyezők. Idővel beléphetnek a szennyezők a vízfázisba és megkötődhetnek a szilárd szemcsék felületén, létrehozva így a szennyezettség további tartós, harmadlagos forrásait, hasonlóképpen a diffúzió útján elszennyeződött vízszint alatti kis áteresztőképességű rétegekhez (Cohen, Mercer, 1993).

Matematikai összefüggésekkel megkísérelhető a szennyezett felszín alatti környezet feletti zárt térben kialakuló szennyező anyag koncentrációk becslése, azonban ezek megbízhatósága kérdéses. Ennek okai, hogy

- az épületekben a klórozott szennyezők háttérértékei eleve magasabbak lehetnek (háztartási vegyszerek, bútorok kipárologásai, stb.), és ezért nehéz elkülöníteni a felszín alatti és felszín feletti forrásokból származó vegyi anyagokat;
- a felszín alatti és a felszín feletti környezetben, időben, és térben változókéonyak a szennyező anyag koncentrációk;

- természetes és emberi eredetű inhomogenitások (pl. bolygatott talaj a közművek környezetében) hatással vannak a szennyező anyagok terjedésére (ITCR, 2004).

4.1.2. A kis átteresztőképességű rétegek jelentősége a DNAPL szennyezőanyagok esetében

A kis átteresztőképességű ($k \leq 10^{-6}$ m/s) képződményekbe lejutott szennyezők hosszú ideig képesek elszennyezni a felszín alatti vizet. A kis átteresztőképességű képződményekben jelenlevő szennyezőanyagok mennyisége függ a kis és nagy átteresztőképességű képződmények térfogatainak arányától, a szennyező kémiai jellemzőitől és koncentrációjától, a szennyező anyag természetes bomlásának mértékétől, a vízszivárgás sebességétől, a talajvízjárástól, a szerves széntartalomtól, és a szennyezőanyag jelenlétének időtartamától a felszín alatti környezetben (Kueper et al., 2003; Nielsen, Nielsen, 2007). A kis átteresztőképességű rétegekben tározódó szennyezőanyagok miatt olyan helyszíneken is tartósan fennmaradhat az oldott csóva, ahol nincs jelen elkülönülő szerves fázis. A góc tökéletes elszigetelése vagy felszámolása ellenére szintén sokáig megmaradhat az oldott csóva, mert a csóva területén a kis átteresztőképességű rétegekből diffúzió útján belép a nagyobb átteresztőképességű rétegekbe a szennyező anyag. A fenti jelenségek arra hívják fel a figyelmet, hogy nem elegendő felszámolni az elkülönülő szerves fázist vagy az oldott fázisú szennyezőket csak a nagy átteresztőképességű rétegekben, hanem a kis átteresztőképességű rétegekben tárolt szennyezőanyagokkal és azok visszajutásával a nagyobb átteresztőképességű rétegekbe is számolni kell (Kueper et al., 2003; ITCR, 2004).

4.1.3. A gócterületek lehatárolása

Az esetek többségében a gócterületek lehatárolása nem történik meg vagy nem kielégítő pontosságú. Az elkülönülő szerves fázis és szennyező anyag többi fázisa szeszélyes térbeli eloszlású, ezért nehéz az azonosítása, és mennyiségük megadása (Kueper et al., 2003, Halmóczy, Gondi, 2010).

A méter vagy annál hosszabb szűrőjű és nagy átteresztőképességű rétegeket megcsapoló monitoring kutak vízkémiai eredményei alapján nem tudható, hogy milyen a megoszlás a szennyező anyag fázisai (elkülönülő fázis, oldott, kötött, kis átteresztőképességű rétegbe diffundált) között (Nielsen, 2006). A régebben történt szennyezéseknél a szennyező anyag többsége már oldatba mehetett, és nem vizsgáljuk a kis átteresztőképességű rétegek szennyezőanyag tartalmát, holott ez elsődleges forrása

lehet az oldott csóvának. Nehéz pontosan elhatárolni egymástól a gócterületet és a csóvát, megállapítani azt, hol végződik a góc. Előfordulhat, hogy nagy mennyiségű szennyező anyagot tárolhat a korábbi elkülönülő fázis kis áteresztőképességű környezete (ITRC, 2004).

4.1.4. A térbeli lehatároláshoz használható eszközök, eljárások

A hagyományos fúrásos feltárások a DNAPL típusú szennyezőanyagok esetében háttérbe szorulnak, mert nem képesek a szennyeződésről pontos képet adni a felszín alatti közegben. Ebben a fejezetben olyan feltárásokat és eszközöket gyűjtöttem össze, amelyek a speciális szennyezőanyagok térbeli lehatárolásához jól használhatók:

- nyomó (statikus) szondázás (CPT),
- szónikus fúrással történő feltárások.

A nyomó (statikus) szondázás (CPT)

A statikus kúpbehatolási vizsgálatok (CPT, cone penetration test) - hazánkban statikus szondázásnak is szokták nevezni - a talajok, földtani közeg azonosítására a világ számos részén már évtizedek óta elfogadott és előszeretettel alkalmazott vizsgálati módszer (Nielsen, 2006). Köszönheti ezt a rendelkezésre álló széles szakirodalomnak, a folyamatos, gyors, megbízható és megismételhető mérési adatoknak és nem utolsósorban költséghatékonyságának. A szondát elsősorban a geotechnikában az alapozások tervezéséhez használják, azonban alkalmazása kiegészítő szondákkal felszerelve a környezetvédelemben is egyre elterjedtebb (US EPA, 2004).

A statikus kúpbehatolási vizsgálat tökéletes módszer a felszín alatti rétegváltások, vízáadó és szivárgáslassító rétegek, vékony rétegek kimutatására, miután a mérési adatok akár cm-enként gyűjthetők. Nagy előnye még, hogy rendkívül gyors, akár azonnali nagy felbontású többszörös adatgyűjtésre van lehetőség, és így mód nyílik a mérnökgeológia és környezeti paraméterek jobb és megbízhatóbb értelmezésére, amely létfontosságú a DNAPL szennyeződések esetében. Mindezen túl a CPT szonda alkalmas a földtani közeg szemcseösszetétel szerinti típusainak (agyag, iszap, homok, kavics, szerves üledék) közelítő meghatározására is, amelyhez kapcsolódóan számos szakirodalmi adat áll rendelkezésre. Általános ajánlasként fogalmazható meg, hogy a CPT szondázások mellett készüljön legalább egy magfúrás is, melynek rétegsorát fel lehet használni a CPT szondák által meghatározott rétegsor kalibrációjára (US EPA, 2004).

A CPT szondázás módosított, továbbfejlesztett változata az úgynevezett mérnökgeofizikai szondázás, ahol a mechanikai ellenállásmérést kiegészítve fajlagos ellenállás, természetes gamma, gamma-gamma aktivitás és sűrűség, neutron-neutron

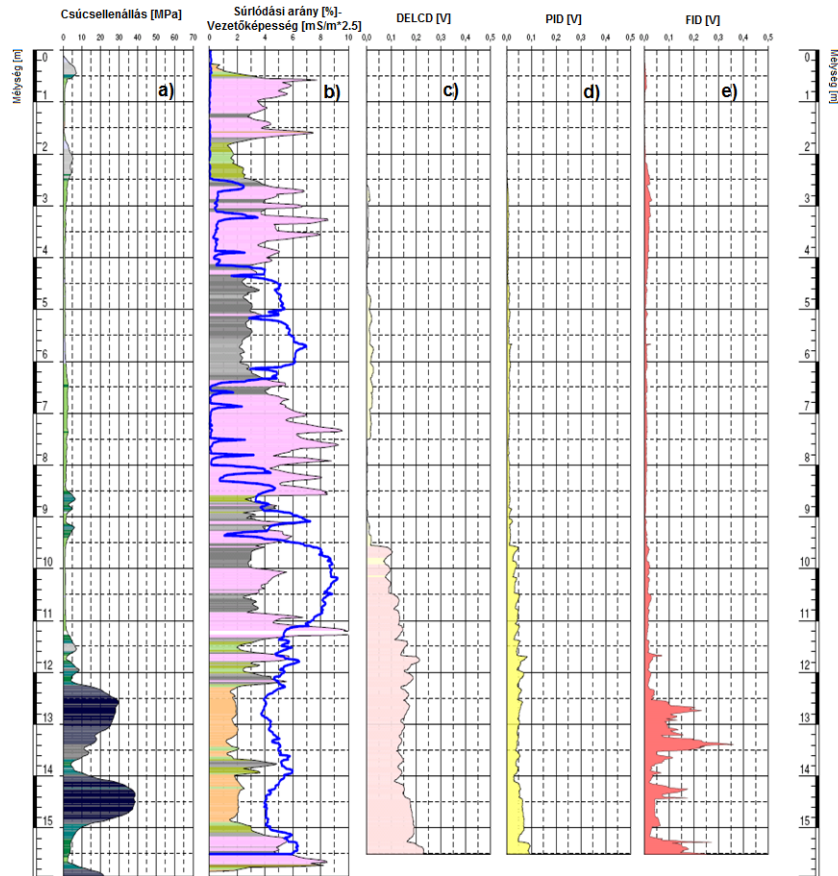
aktivitás és neutron porozitás méréssel további kőzetfizikai paraméterek (víztartalom, porozitás) nyerhetők (Faur, Szabó, 2011). A módszer nagyon jól alkalmazható szennyezett területek vizsgálata során is. Újabban speciális, a CPT szondafej felé helyezhető mérőeszközöket fejlesztettek ki, amelyek alkalmasak például a klórozott szénhidrogének in-situ, szemi-kvantitatív, valós idejű feltárására is (Robertson, Cabel, 2010). A módszer előnyös tulajdonsága, hogy a földtani felépítés és a klórozott szénhidrogén típusú szennyező anyagok vizsgálata egy lépésben történik, míg a hagyományos tényfeltárás során a fúrás, a mintavétel, a minták kémiai analitikai vizsgálata elkülönülő munkafázisok. Az alábbiakban egy DNAPL típusú szennyezőanyagok feltárására használható eszközt mutatom be. Ez a kiegészítő rendszer az úgynevezett, MIP (Membrane Interface Probe) szonda feltét, mely több detektor azonos időben történő alkalmazását teszi lehetővé. Az MIP diagnosztika főbb elemei a következők:

- CPT szonda a palástsúrlódás és csúcsnyomás méréséhez,
- inklinométer, amely a függőlegestől történő elhajlási szöveget méri,
- pórusnyomás érzékelő,
- MIP szonda DELCD (Dry Electrolytic Conductivity Detector), PID (Photoionization Detector) és FID (Flame Ionization Detector) detektorokkal, amely egyes szerves vegyi anyagok szemikvantitatív észlelésére alkalmas felszín alatti környezetben,
- elektromos vezetőképesség mérésére alkalmas szonda (EC), amely a MIP szondával összeépíthető (Gondi, Halmóczy, 2008).

A regisztrátumok nyomon követése (**11. ábra**) a szondázás folyamán a berendezésekkel összeköttetésben lévő számítógép képernyőjén lehetséges (Robertson, Cabel, 2010).

A MIP mérőrendszer felszín alatti része a CPT szondafej felett elhelyezkedő 100-120°C-ra felfűthető fém betétet és egy féligáteresztő membránt tartalmazó részből, a szondához kapcsolódó rudazatból, a rudazatban húzódó elektromos kábelekből, és egy kapilláris csőből áll. A felfűtött szondarész környezetében gázhalmazállapotba kerülő illékony szénhidrogének a membránon keresztül a rudazatban lévő vékony kapilláris nitrogén gázáramába kerülve a hordozó tehergépjármű zárt rakterébe telepített érzékelőkbe jutnak (Nielsen, 2006). A PID (10.6 eV), FID, DELCD detektorok jelei alapján az illékony szerves szennyezők koncentrációja megfelelő kalibrálást követően szemikvantitatív módon megadható (Gondi, Halmóczy, 2008). A nyomószondázás során a szondafej, a mérőfej (MIP) és a hozzá csatlakoztatott rudazat statikusan kerül lesajtolásra. Eközben az érzékelők mérik a felszín alatti környezet elektromos vezetőképességét, a MIP rendszer felszíni detektorai mérik a felszín alatti illékony szerves szennyezők koncentrációjával arányos jeleket, továbbá a hagyományos CPT rendszer

által szolgáltatott csúcstellenállás, palástsúrlódás és pórusvíz nyomás értékeket (Gondi, Halmóczy, 2008; Robertson, Cabel, 2010).



11. ábra MIP szondafejvel készített regisztrátum (c, d, e) egy CPT szondázás során.

A módszer előnyei az alábbiak:

- a NAPL szennyezettség ténye és mértéke már a szondázás során ismertté válik, a mérőberendezéshez csatlakoztatott számítógép képernyőjén megjeleníthető, ennek ismeretében a tényfeltárási program szükség szerint módosítható,
- a terepi és laboratóriumi tényfeltárási munkák időtartama nagyságrendileg lerövidül,
- az előírt kritériumrendszernek meg nem felelő környezetminőségi paraméterek esetén a szondázás leállítható, ezzel elkerülhető a víznél nehezebb szennyezőanyag fázisok átfejtődése mélyebb víztartókba,
- rövidebb ideig szükséges a terepi személyzet jelenléte, lerövidül a területhasználat időtartama, ami költségmegtakarítást eredményezhet,
- nem keletkezik hulladék, veszélyes hulladék (szennyezett furadék, felszín alatti víz, mintavételhez szükséges egyszer használatos eszközök, öblítővíz,

stb.) a diagnosztika során, ezek kezeléséről nem kell gondoskodni (*Nielsen, 2006;Gondi, Halmóczy, 2008;Robertson, Cabel, 2010*).

A szónikus fúrás

A szónikus fúrás alapötlete az 1910-es években született meg, de a mai modern fúróeszközök a 2000-es évektől vannak jelen a világon. Magyarországon az első – és azóta is egyedüli ilyen – fúróberendezés 2008-tól működik. Nagy előnye, hogy alkalmazása gyors és mély fúrások elkészítésére ad lehetőséget viszonylag könnyű fúróberendezéssel. A szónikus fúrási technológiát egyesek a lesajtolásos (direct-push) módszerek közé sorolják, mások azonban külön típusként határozzák meg. Valójában mindkét megközelítésnek van igazság tartalma, hiszen a szónikus fúrógép működése egyedül álló mechanikai elven alapszik, azonban mindkét technológiára minimális különbséggel ugyanazon mintavételi sajátosságok vonatkoznak és a mintavételi eszközök is gyakorlatilag csereszabatosak (*Nielsen, 2006*).

A szónikus fúróberendezés alapját a fúrófejbe épített, nagy sebességgel forgó és mechanikusan szinkronizált excenterek jelentik, melyeket egy nagyteljesítményű hidromotor hajt. Az excenterek által keltett nagy frekvenciájú vibráció közvetlenül a fúrórudazatra (mintavevőre) adódik át, melynek köszönhetően a talaj a fúrórudazat körül kb. 1.0 mm vastag rétegben megfolyósodik. A szónikus fúrógépeket többféle kialakítással és teljesítménnyel gyártják és rendszerint forgatófejrel is rendelkeznek, a nagyobb teljesítményű gépek ugyanis a vibrálással együtt forgatnak is, s így kemény kőzetekben is használhatók. Kőzetben való fúrásakor rendszerint lég vagy vízöblítést kell alkalmazni a furadék kihozatalára, ill. a fúrófej hűtésére. Lehetőség van kemény kőzetben való száraz magfúrásra is azonban ebben az esetben lassabb előrehaladásra és a fúrófej fokozott elhasználódására kell számítani (*Nielsen, 2006*).

Összességében elmondható, hogy nagy előnye ennek a feltérési módnak a gyorsasága, könnyű magminta vételi lehetőség még kavicsos összetettségű talajból is, továbbá az, hogy sekély mélységű feltérásoknál nincs szükség fúróiszapra, nem keletkezik fúrési hulladék (szennyezett talaj). A fúróberendezéssel végezhető CPT szondázás is, ehhez azonban megfelelő rudazat szükséges.

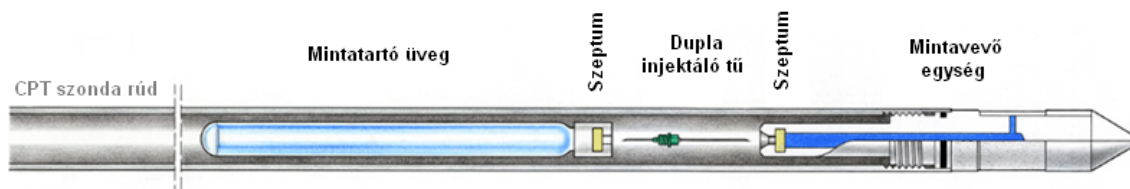
4.2. DNAPL szennyezőanyagok mintavételezésének speciális eszközei

A következőkben olyan egyszeri pontminta vételi eljárásokat mutatok be, amelyek lesajtolásos feltérásokkal együtt végezhetők. Ezek az eszközök és eljárások lehetővé teszik az egyszeri tetszőleges mélységű mintavételezést talajból és felszín alatti vízből ideiglenes vagy állandó monitoring kutak kialakítása nélkül. Segítségükkel lehetőség van a szennyezettség vertikális kiterjedésének gyors feltérképezésére is.

Az egyszeri mintavevők előnye az állandó monitoring kutakkal szemben, hogy gyors és olcsó mélység szelektív mintavételezést tesznek lehetővé (Nielsen, 2006). Az eljárás hátránya, hogy nincs lehetőség a vertikális hidraulikus gradiens meghatározására, ami elengedhetetlen a hatékony műszaki beavatkozás és monitoring tevékenység megtervezéséhez, valamint csak egyszeri mintavételezést tesz lehetővé. Ezért ha az adott helyen újabb mintavételek, mérések elvégzése válik szükségessé (pl. a műszaki beavatkozás hatékonyságának ellenőrzésére), újra mobilizálni kell a mintavevő berendezést és a kezelő személyzetet, ami növeli a költségeket (US EPA, 2004).

GeoNordic gáz- és vízmintavételi módszer

A GeoNordic (korábbi neve BAT) vízmintavételi eljárás/eszköz (12. ábra) kvázi pontszerű reprezentatív vízmintavételt tesz lehetővé a felszín alatti környezetből folyadék- és gázfázisból (Gondi et al., 2003).



12. ábra A GeoNordic mintavételi eszköz vázlata (Internet_8 alapján).

A mintavevő eszköz statikusan vagy dinamikusan kerül lesajtolásra a kívánt mélységbe. Előnye hogy nincs szükség a felszín alatti víz szivattyúzására, és nem keletkeznek a hagyományos vízmintavételnél szokásos hulladékok. Hátránya, hogy viszonylag kis mintamennyiség nyerhető (néhány 100 ml), és a mintavételi mélység pontos meghatározásához egyéb feltárások is szükségesek (CPT, hagyományos fúrás) (US EPA, 2004).

ConeSipper vízmintavételi módszer

A ConeSipper nevű mintavételi eszköz (13. ábra) gázkiszorításos elven működő vízmintavételt tesz lehetővé meghatározott mélységből. Két fő egységből áll, az egyik a mintavevő szondafej, a másik az úgynevezett controller. A controllerrel a felszínről irányítható a mintavétel folyamata olyképpen, hogy a mintavevő szondában lévő vízmintát gáznyomás segítségével juttatják a felszínre (Nielsen, 2006).

Előnye, hogy lehetőség van a mintavétel után az eszköz tisztítására is, oly módon, hogy a mintacsövön keresztül desztillált vizet nyomnak a rendszerbe, ezáltal a mintavevő szonda kihúzása nélkül akár több mélységből is egyaránt reprezentatív minta vehető (Nielsen, 2006).



13. ábra A ConeSipper mintavevő két fő egysége (*Internet_9*).

Az eszköz hátránya, hogy gyenge vízadó képességű képződményekből nagyon lassan lehet vízmintát venni, ill. kötött üledékekben (iszap, agyag) való áthaladáskor fennáll a külső szűrők eltömődésének veszélye. További hátránya, hogy a mintavétel után nincs mód a mintavételi lyuk szakszerű eltömődékelésére (*Nielsen, 2006*).

Waterloo profiler vízmintavételi módszer

A kanadai Waterloo Egyetemen kifejlesztett mintavevő (**14. ábra**) berendezés az egyik első olyan direct-push technikával lehajtható eszköz volt, mely lehetővé tette a folyamatos, több mélységből való vízmintavételt.

A mintavevő nem kombinálható CPT szondával, ill. egyéb más szondával, tehát a használata előtt a terület földtani viszonyait fel kell tártani. Iszap és agyag képződményekből való mintavételre nem ajánlatos használni a mintavevőt, mert a mintavétel nagyon időigényes (*Nielsen, 2006*).



14. ábra A Waterloo típusú vízmintavételi eszköz.

A mintavevő fej egy rozsdamentes acélból készült ún. elvesző csúcsból és a felette lévő hüvelyben körben elhelyezett 6 db mintavevő nyílásból áll. A mintavételi nyílásokat rozsdamentes acélszűrő védi az eltömődéstől (*Pitkin et al., 1999*).

A vízminta felszínre juttatására a leggyakrabban perisztaltikus szivattyút alkalmaznak, de mélyebb nyugalmi vízszintek esetén gázkiszorítású szivattyúkat használható (US EPA, 2004).

A mintavétel(ek) végeztével az elvesző csúcs leválasztható a mintavevő fejről és a mintavételi lyukba a mintavevő kihúzása közben bentonit zagy injektálható, megszüntetve ezzel a rétegek keresztzennyezésének kockázatát (Pitkin et al., 1999).

A Waterloo Egyetemen kifejlesztett mintavevőt időközben már több cég is átalakította/továbbfejlesztette, így a piacon ma több hasonló elven működő, de különböző márkanev alatt futó mintavételi eszköz is megtalálható.

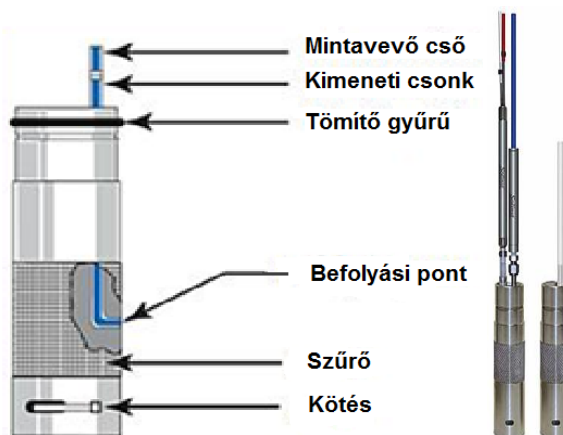
4.3. DNAPL szennyező anyagok monitorozásának speciális eszközei

A speciális szennyezőanyagok monitoringjához használhatók a hagyományos, kis átmérőjű egymáshoz közel telepített különböző mélységben lévő fúrt kutak. Ezen technológiák hátránya, hogy minden mintavételi zóna kialakításához külön fúróllyukat kell készíteni, ami jelentősen drágítja a telepítési költségeket. A monitoring kutakat a közelmúltig szinte kivétel nélkül fúrásos módszerrel létesítették, azonban az elmúlt 10-20 évben a jelentős költség és időmegtakarításnak köszönhetően nyomva, ütve vagy vibrálva (szónikus fúrógépek) juttatják le a rudazatot és az esetlegesen hozzá kapcsolt mintavételi eszközt, geotechnikai szondát, vagy analitikai érzékelőt a felszín alatti környezetbe. Ekkor a telepítés során a földtani közeget nem kell kitermelni, mert az kitér a rudazat elől (Nielsen, Nielsen, 2007), ugyanakkor tömörödés lép fel, ami miatt a közeg szivárgási tényezője csökkenhet. A következőkben olyan monitoring kutakat mutatok be, amelyek egy fúrójukban több szinten szűrőzhetők. Az ilyen típusú kutak telepítése hazánkban még nem túl gyakori, azonban külföldön (Kanada, USA, Svédország) egyre nagyobb a térhódításuk.

Waterloo típusú kutak

A Waterloo típusú kutak használatával több mélységből nyílik lehetőség mintavételre a felszín alatti vízből és vízszintmérésre egy furaton belül (Nielsen, 2006).

Az ilyen típusú kutakkal kevesebb furat kialakításával, és kevesebb időráfordítással háromdimenziós kép kapható a felszín alatti szennyezettségről és a felszín alatti víz szivárgási viszonyairól. A Waterloo típusú kút különálló, egymáshoz vízzáró kötésekkel kapcsolható elemekből áll (15. ábra), így minden alkalmazáshoz igény szerint alakítható. A rendszer több rozsdamentes acél mintavevő egységet tartalmazhat, ami tetszőleges távolságokban 2"-os PVC csövekhez csatlakozatható (US EPA, 2004).



15. ábra A Waterloo típusú kút egy szűrője.

A több mélységben elhelyezhető mintavevő egységeket (ideiglenes vagy állandó) kitérítendő elválasztó elemekkel (pakkerekkel), vagy homok és bentonit rétegzésével lehet elkülöníteni egymástól. Az elválasztó elemek gumiborítású táguló anyagból készülnek, amelyek a telepítés után benyomott víz hatására kitérülnek és biztosítják a megfelelő vízzárást (Pitkin et al., 1999).

A mintavételi egységek tetején egy, vagy két kimeneti csomk található. A kimeneti csomkokhoz vízmintavevő csövek, dupla szelepes szivattyúk, hólyag szivattyúk, vagy nyomás jelátalakítók csatlakoztathatók. A nyomás jelátalakítókat adatgyűjtő egységekkel (data logger) lehet összekötni a rendszeres automatikus mérések érdekében (Pitkin et al., 1999; Nielsen, 2006). A mintavevő csövek és kábelek rendszerezésére, elkülönítésére és azonosítására a felszínen található speciális kútfaj szolgál.

Az adatgyűjtés módjától függően a megfigyelt zónák száma 2 és 24 között változhat.

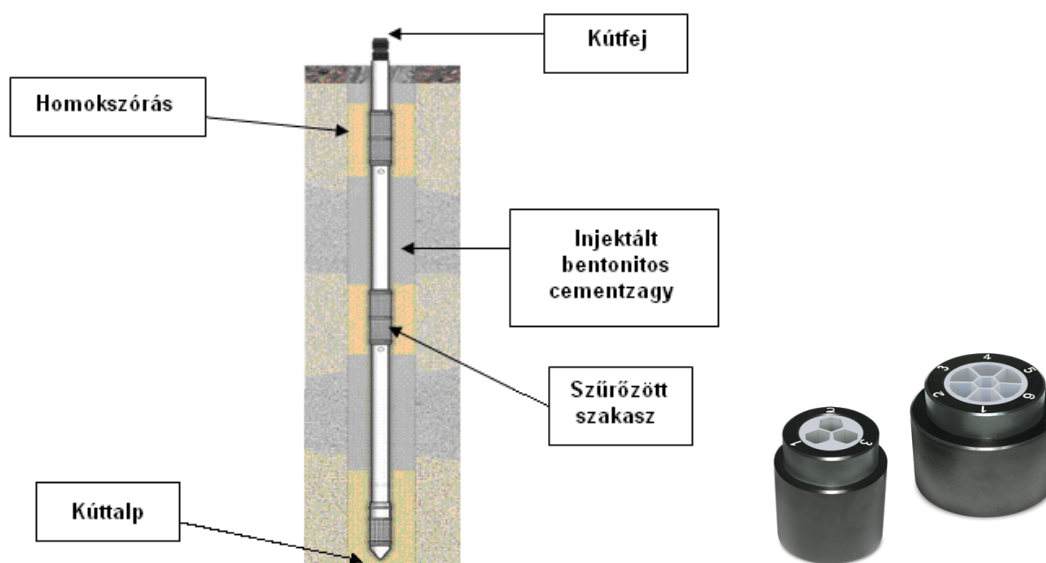
CMT (Continuous Multichannel Tubing) típusú kutak

A CMT típusú kutakból egy fúrólukon belül többcsatornás csőből történhet mintavételezés akár hét különböző, egymástól elszigetelt mélységből. A kutat egy speciális kútfajjal kiegészítve talajlevegő mintavételre is lehetőség nyílik (US EPA, 2004).

Kétféle CMT rendszer létezik, a háromcsatornás és a hétcsatornás (16. ábra) (Einarson, Cherry, 2002). A CMT kutak telepítése gyors és költséghatékony, mivel három vagy hét fúróluk helyett elegendő egy kialakítása. Egy hét csatornás rendszer telepítését két ember 3 óra alatt elvégezheti, a három csatornás rendszer pedig még gyorsabban telepíthető (Nielsen, 2006).

A mintavételi pontok rozsdamentes acél szűrővel védettek, a központosításról pedig a meghatározott szakaszonként alkalmazott központosítók gondoskodnak. A CMT rendszert teljes egészében a felszínen kell összeszerelni, majd a készre szerelt csőszakaszt a védőcsőbe kell behelyezni. A védőcső folyamatos visszahúzása közben a gyűrűstér homokkal illetve injektált bentonittal kerül feltöltésre, ezen kitöltések száma attól

függ, hogy hány csatornát akarnak mintázni. A telepítés utolsó fázisa lényegesen meggyorsítható előregyártott homok illetve bentonit betétek alkalmazásával (Nielsen, 2006).



16. ábra A 3 csatornás kút vázlata és a 3 illetve 7 csatornás CMT kútfejek.

A CMT kutakban a csatornák kis átmérője miatt csak kis átmérőjű mintavételi eszközök (inerciaszivattyú, perisztaltikus szivattyú, dupla szelepes szivattyú) használhatók, melyek azonban ma már könnyen beszerezhetők. Ezek méretüknél fogva csak alacsony vízhozammal képesek dolgozni, azonban a kishozamú (low-flow) mintavétel manapság egyre szélesebb körben elfogadott (Einarson, Cherry, 2002).

FLUTe (Flexible Liner Underground Technology) kutak

A FLUTe kutak flexibilis vízálló poliuretán bevonatú nylon anyagú bélésű segítségével több mint 20 különböző mélységű zóna megcsapolására alkalmasak(17. ábra).

A rendszer 2-20" (leggyakrabban 4-10") átmérőjű furatokban alkalmazható (Nielsen, 2006). A kutak csövezése minden esetben egyedi megrendelésre a megbízó előírásai alapján készül. Készítéskor a gyárban a kívánt mélységekben mintavételi pontokat helyeznek el a bélésű falán és ezekhez a mintavételi pontokhoz kis átmérőjű (0.17-0.5"-os) csöveket csatlakoztatnak (Internet_6). Szükség esetén nyomás jelátalakítókat és kábeleket is telepítenek a bélésű belsejébe. Az előregyártott kész rendszert dobra tekerve szállítják a felhasználás helyszínére. A telepítés első fázisaként a bélésű vége rögzítésre kerül a kút pereméhez, majd a flexibilis bélésűvet a dobról engedik le a kút aljáig a mintavételi csövekkel és a nyomás jelátalakító kábelekkel együtt (US EPA, 2004). A FLUTe rendszer alkalmazásával lehetőség van mindegyik mintavételi pont egyidejű mintázására, amivel jelentős idő takarítható meg (Internet_6).



17. ábra A FLUTE rendszer telepítés közben, és a kész kútfejek a felszínen (Internet_6).

A kis átmérőjű (maximum öt mintavételi ponttal) FLUTE rendszerek sajtoló/verő/vibráló technológiával is sikeresen telepíthetőek (Nielsen, 2006).

4.4. A monitoring kutak szűrőhosszainak jelentősége

Az elmúlt évtizedek felismerése, hogy a szerves szennyezőanyagok koncentrációja a térben igen tág határok között változhat, az oldott szerves szennyezőanyagok koncentrációjában már néhány centiméteres függőleges távolságon belül is akár több nagyságrendnyi eltérést lehet kimutatni. Ez a földtani felépítés heterogenitásával és a szennyezőanyagok keveredési folyamataival magyarázható (Nielsen, 2006). Klórozott szénhidrogénnel szennyezett területek esetében különösen fontos a szennyezett felszín alatti víz mélységi lehatárolása, mely több mélységből származó vízmintavételt tesz szükségessé (US EPA, 2004).

A hosszú szűrőzésű kútban a minta az alsó erősen szennyezett és a felső szennyezetlen rész keverékeként áll elő. Ez a mérési eredmény alábecsüli a szennyező anyag koncentrációjának maximumát és eltúlozza a szennyezett zóna mélységét is. A három kútból álló rövidebb szűrőzésű kútcsoport eredményei alapján már jobban megközelíthető a szennyező anyag valós vertikális eloszlása, de a valósághoz legközelebb álló eredményt a több mintavételi ponttal rendelkező monitoring kút szolgáltatja (Kueper et al., 2003; ITRC, 2004).

A szennyező anyagok maximális koncentrációjának meghatározása fontos eleme a hatékony kármentesítés tervezésének, és a hatásviselőknél várható egészségkárosodás kockázat becslésének (Kueper et al., 2003). Ha a hagyományos kutakból vett kevert vízminták alapján alábecsülik a szennyező anyagok maximális koncentrációját, abban az esetben alábecsülik a receptoroknál várható kockázat mértékét és esetleg hibás döntést

hoznak a műszaki beavatkozás szükségességét és technológiáját illetően. Hatékony műszaki beavatkozást csak akkor lehet tervezni, ha pontosan ismerjük a szennyező anyagok térbeli eloszlását (*ITRC, 2004*).

Napjainkban egyre inkább előnyben részesítik a rövidebb szűrőzésű kutakat. A rövid szűrőjű szakasz(ok) nem megfelelő pozícionálása, azonban a szennyező anyagok eloszlásának hibás meghatározását eredményezheti és félre is informálhat. Éppen ezért a szennyező anyagok eloszlásának pontos feltérképezésére nem elegendő egyetlen rövid szűrőzésű kút telepítése, hanem megfelelő számú mélységből történő mintavétel szükséges (*US EPA, 2004*).

5. A szimulációkhoz alkalmazott Groundwater Modeling System háromdimenziós hidrogeológiai modellező rendszer bemutatása

A tényfeltárást követően a legtöbb kármentesítést valamilyen numerikus szimuláció készítésére kerül sor, amelynél vagy a szennyezőanyag eloszlásra és/vagy jövőbeli terjedésére vagyunk kíváncsiak. Ehhez a modellezésekhez kapcsolódik kutatási témám, amely során megkeresem azokat a programokat, amelyek alkalmasak lehetnek a víznél sűrűbb önálló fázisú szennyezőanyagok modellezésére és megpróbálom ezek megbízhatóságát növelni. Ebben a fejezetben bemutatom az általam alkalmazott programot.

A Groundwater Modeling System (GMS) modellező rendszert alkalmazom munkám során, amely kiemelkedik a szakmában használatos programok közül (pl. Visual Modflow, Feflow stb.), mert együttesen megtalálható benne minden olyan lehetőség, ami a hidrodinamikai-, és transzport-modellezéshez szükséges (pl. területjellemzés, modellfelépítés, optimalizálás, utófeldolgozás, és megjelenítés) (Zákányi, 2009). A GMS az egyik legátfogóbb szivárgáshidraulikai modellezési rendszer. A szoftver egy grafikus felhasználói felületről (a GMS program) és egy sor elemző kódból áll, melyek a következők: MODFLOW, MODPATH, MT3DMS/RT3D, SEAM3D, ART3D, MNW, SEAWAT, UTCHEM, FEMWATER, PEST, UCODE, MODAEM, SEEP2D, UTEXAS (Zákányi, 2009; Zákányi, 2011).

A program moduláris felépítése lehetővé teszi, hogy a felhasználó csak azokat a modellezési képességeket használja, amelyekre munkája során szüksége van. Az egyéb GMS modulok bármikor megvásárolhatók, és hozzáadhatók a meglévőkhöz. A program dinamikusan kapcsolódik ezekhez, automatikusan kiegészítve a szoftver lehetőségeit az új modellezési képességekkel (Zákányi, 2009; Internet_7).

GIS (Geographic Information Systems) alapú modell felépítés:

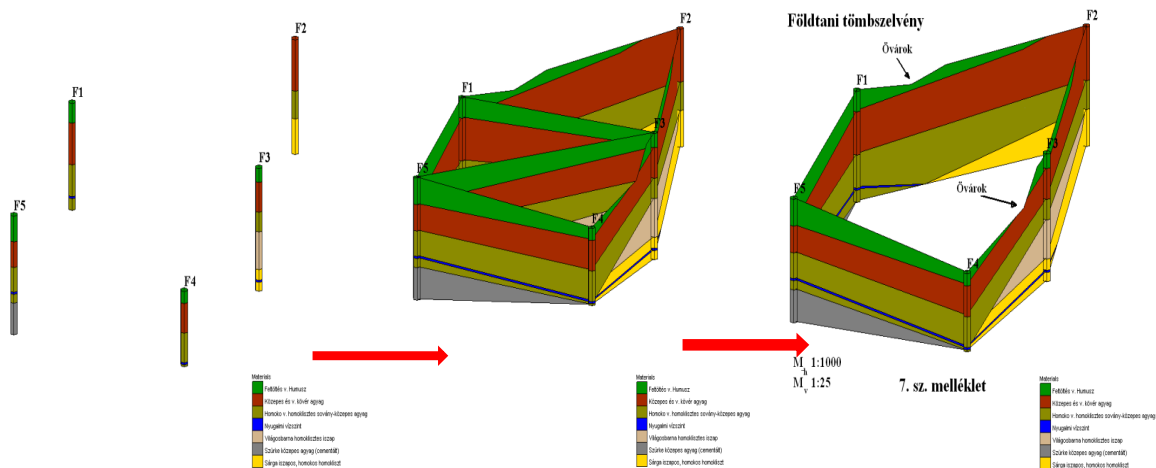
A Map Module (Térkép modul) segítségével GIS objektumok (pontok, ívek és sokszögek) felhasználásával építhető fel a modell, melyben definiálhatók a peremfeltételek, a források/nyelők és az anyag tulajdonságzónák. A modelladatok ezután automatikusan diszkretizálhatók a modellrácshoz vagy a hálózathoz. Ez a megközelítés lehetővé teszi, hogy nagy és komplex területek koncepcionális modelljeit egyszerűen és hatékonyan lehessen megjeleníteni és kezelni (Engineering Computer Graphics Laboratory, 1998).

Akár saját magunk hozzuk létre a GIS adatokat, akár importáljuk azokat valamely külső forrásból a folyamat azonos. A modell GIS objektumok szintjén szerkeszthető, és a GMS végzi a rács és/vagy a hálószerkesztést, valamint a paramétereknek a cellákhoz/elemekhez való hozzárendelésével járó összetett munkát (Zákányi, 2009; Internet_7).

3D modellszerkesztés

A GMS megfelelő eszközöket kínál a komplex 3D sztratigráfiájú modellek létrehozásához, illetve a 3D objektumok véges differencia vagy véges-elem ráccsá/hálóvá alakítására (Zákányi, 2009).

Az ún. "Horizons" módszer lehetővé teszi komplex testek könnyed létrehozását fúrási adatokból és keresztmetszvényekből. Ezek az eszközök képesek olyan testeket alkotni, amelyek bonyolult rétegződéseket, kiékelődéseket, stb. tartalmaznak (18. ábra).



18. ábra Fúrási adatokból készített 3D rétegszelvény a GMS programmal.

A testmodell eredményeit (pl. az anyagtulajdonságokat) közvetlenül átvihetjük egy MODFLOW numerikus rácsba vagy egy FEMWATER hálóra. Továbbá, közvetlenül képezhetők MODFLOW 2000 adatok is (Zákányi, 2009).

Megjelenítés

A GMS grafikus eszközei széles körű lehetőséget kínálnak a modellek létrehozására és az eredmények megjelenítésére. A modellek létrehozhatók digitális térképek és szintmodellek alkalmazásával. A modell felépítése során a grafikus megjelenítés lehetővé teszi a probléma gyors áttekintését és a munka bemutatását. A kontúrozott és árnyékolt teljes 3D nézetek biztosítják, hogy bárki azonnal lássa és megértse a modellezett területet és a paraméterek eloszlását (Zákányi, 2009).

A modell megjeleníthető felülnézetben, vagy 3D ferde nézetben, és interaktívan forgatható. Tetszés szerint kivághatók keresztmetszvények és kerítésdiagramok a modellből. A takart felületek eltávolítása, a szín és fényforrás árnyékolás révén fotorealisztikus képek hozhatók létre. Az input adatok és a számított eredmények változását kontúr és szín szegélyekkel jeleníthetjük meg. Létrehozhatók keresztmetszvények és izo-felületek a 3D hálóból, rácsokból és testekből, lehetővé téve a 3D modell gyors megjelenítését (Zákányi, 2009).

Vektor, izo-felület, színszegély, vagy kontúr-animációt alkalmazva, megjeleníthetők animálva úgy a permanens, mint a nem-permanens eredmények. Például, egy nem-permanens megoldás animált megjelenítése, lehetővé teszi a vízszintek, a leszívások, a sebességek és a szennyeződéscsónák időbeli változásának megfigyelését. Továbbá, a GMS képes arra, hogy egy izo-felülettel letapogassa a 3D modellt. Az izo-felület minimum és a maximum értékeket a modell határozza meg, a program pedig lineáris interpolációt végez, és gyors egymásutánisággal több izo-felületet jelenít meg. Ezáltal lehetővé válik például egy szennyeződéscsóva térbeli változásának gyors megértése (Zákányi, 2009).

Automatizált modelloptimalizálás:

A GMS tartalmaz egy sor eszközt a modell kalibrációs folyamatának elvégzéséhez. Amikor beimportálunk egy számított megoldást, a GMS felrajzolja a pont és a fluxus reziduális hibákat, és számos, a kalibrációs statisztikákat ismertető ábra hozható létre. A legtöbb kalibrációs eszköz a GMS minden modelljével használható.

A MODFLOW szimulációkhoz automatikus paraméterbecslés végezhető a MODFLOW PES, a PEST és az UCODE kódokkal. Ezeket a kódokat sokszor ún. inverz kódoknak is nevezik (Internet_7).

Kockázatelemzés (sztochasztikus) modellezés

A program egyik legizgalmasabb képessége egy sor olyan eszköz, amelyek lehetővé teszik a MODFLOW és az azt kísérő modellekkel való sztochasztikus szimulációk futtatását (Zákányi, 2011).

A sztochasztikus szimulációk felépítése során két megközelítés választható: véletlenszerű paraméter és indikátor szimuláció. A paraméter randomizáció "Monte Carlo" vagy "Latin Hypercube" módszerekkel végezhető el. Az indikátor szimuláció, a T-PROGS szoftverrel randomizálja a paraméterzónák térbeli eloszlását. A T-PROGS szoftver átmeneti valószínűségi geostatisztikákat készít furatadatokból. A szoftver kimenete egy N anyagkészletből álló készlet egy 3D rácson. Mindegyik anyagkészletet a furatadatok határozzák meg, a furatok közötti anyag arányok és átmentek pedig a furatokban megfigyelt trendeket követik (Zákányi, 2011).

5.1. DNAPL transzportmodellezési lehetőségek a Groundwater Modelling System programcsomagban

A DNAPL típusú szennyezőanyagok modellezésére a GMS programban két lehetőség kínálkozik (Utchem, SEAM3D), ezeket mutatom be ebben a fejezetben röviden.

Természetesen léteznek más olyan programok, amelyekkel lehet ezeket a speciális szennyeződések modellezni, de ezek alkalmazása nehézségekbe ütközik, mert:

- általában dos alapú programok (pl. NAPL Simulator), így program nyelvek ismeretét igénylik,
- „csak” 2D modellek készíthetők el (pl. MOFAT/MOTRANS),
- NAPL szennyeződések közül csak az LNAPL-re alkalmazhatók (pl. Hydrocarbon Spill Screening Model – HSSM),
- saját fejlesztés, amelyek saját felhasználásra készültek, így nem vásárolhatók vagy tölthetők le (pl. DNAPL-3D).

A GMS programban két lehetőség kínálkozik a NAPL típusú szennyezőanyagok modellezésére, ezek a következők:

- az UTCHEM modul, amely képes a többfázisú rendszerek szimulációjára,
- SEAM3D modul, amely csak az oldott fázis és ennek biológiai lebontásának modellezésére használható (Zakanyi, Szucs, 2012).

A következőkben ezeket a szimulációs kódokat mutatom be röviden.

5.1.1. Az UTCHEM modul

Az UTCHEM programot a Center for Petroleum and Geosystems Engineering The University of Texas fejlesztette ki. Az 1970-es évektől kezdve úttörő kutatások folytak a Texasi Egyetemen annak érdekében, hogy tudományos és mérnöki alapot nyújtsanak a több fázisú áramlási modellezésére vonatkozóan. Ennek oka, hogy egyre elterjedtebb a szénhidrogén származékokkal szennyezett területek (vízadók) kármentesítése, amelyekhez elengedhetetlen szükség volt/van megfelelő transzport modellező szimulátorok fejlesztésére és alkalmazására (Center for Petroleum and Geosystems Engineering, 2000./a). A kutatások eredményeként született meg az UTCHEM szimulátor, amely egy 3D-s, többkomponensű, többfázisú összetett modellje a kémiai áramlási folyamatoknak. Mindez magában foglalja a komplex fázisviselkedés, kémiai és fizikai átalakulások, a heterogén porózus közeg tulajdonságainak vizsgálatát, és fejlett megközelítési módok alkalmazását a numerikus pontosság, a diszperzió eloszlás, a vektor és párhuzamos folyamatok terén.

A programot eredetileg Pope és Nelson 1978-ban arra használta, hogy szimulálja a felületaktív anyagok és polimerek felhasználásával történő szénhidrogén kármentesítések folyamatait. 1990-ben Bhuyan és szerzőtársai kiterjesztették a modellt más kémiai folyamatokra és különböző geokémiai reakciókra a vizes és szilárd fázisok között.

A legújabb 9.1-es UTCHEM modulban az áramlási-, és tömegtranszport-egyenletek megoldást adnak a felhasználó által megadott tetszőleges számú kémiai összetevőre (víz, szerves szennyezők, felületaktív anyagok, alkohol stb.). Ezek összesen 4 fluid

fázisból kerülhetnek ki (levegő-, víz-, olaj- és mikroemulzió-), és tetszőleges számú szilárd ásványi anyagot tartalmazhatnak (*Center for Petroleum and Geosystems Engineering, 2000/a*).

A programmal 3-dimenziós több komponensű, több fázisú véges differencia modellt lehet létrehozni. Nagyon jól használható szennyeződésterjedések, és NAPL szennyeződéseknek felületaktív anyagokkal elősegített kármentesítésének (*Surfactant Enhanced Aquifer Remediation - SAER*) modellezésére (*Center for Petroleum and Geosystems Engineering, 2000/b*). Ideális eszköze az UTCHEM a pump-and-treat rendszerek szimulációjának.

Mielőtt bemutatnám (**lásd 7. fejezet**), hogyan lehet ezzel a szimulációs kóddal a DNAPL típusú szennyezőanyagokat modellezni, érdemes megnézni a program menüjét, amely jól mutatja mennyire széles körben alkalmazható ez a modul. Főmenü:

- Read Solution... → eredmény beolvasás,
- Display Options... → megjelenés beállításai,
- Cell Properties... → cella beállítások,
- General Properties... → fő beállítások,
- Time Options... → idő beállítások,
- Output Control... → eredmények kimentése,
- Reservoir Properties... → víztároló közeg, kőzet beállításai,
- Physical Properties... → ...szennyezőanyag fizikai-kémiai tulajdonságának megadása ,
- Boundaries... → határfeltételek megadása,
- Biodegradation... → biológiai lebontás,
- Wells... → kutak megadása (termelő és injektáló).

A főmenüben lehet beállítani a modellezett térrész, a szennyezőanyag, a biológiai lebontás és a kút(ak) tulajdonságait. A modellezés előtt, ha ezek a paraméterek rendelkezésünkre állnak könnyű a dolgunk, azonban legtöbbször ezek egy része vagy egésze hiányzik.

A fenti felsorolás elemei közül kiemelném a szennyezőanyag paraméterezését, amely a speciális szennyezőanyagok modellezésénél az egyik legfontosabb feladat, és az egyik legnehezebb is. A DNAPL típusú szennyezők fizikai-kémiai paraméterei legtöbbször csak irodalmi adatokból ismertek, mert laboratóriumi mérések nehézkes vagy egyáltalán nem lehetséges. A következő felsorolásban kiemelek néhány paramétert, amelyek leginkább befolyásolják az ilyen szennyezőanyagok felszín alatti transzport folyamatait:

- Interfacial Tension... → határfelületi feszültség,

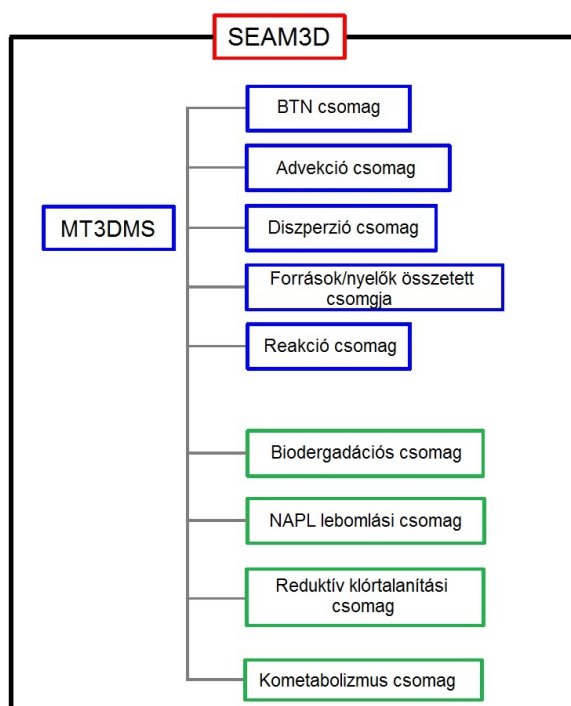
- Organic Mass Transfer... → szerves anyag szállítás tulajdonságainak beállításai,
- Relative Permeability... → relatív átteresztőképesség megadása,
- Viscosity... → viszkozitás beállítása (mikroemulzió, gáz, víz, olaj),
- Component Density... → a szennyezőanyag transzportban résztvevő anyagok sűrűsége,
- Fluid Compressibility... → komponensek nyomásviszonyainak beállításai.

Ezek az almenüpontokon belül még további lehetőségek adódnak a modellező számára a transzportfolyamatok pontosítására.

Mindezek a jellemzők együttesen, de különösen a több fázisú áramlási és transzport modellezés lehetősége, és a Modflow programtól való önállósága teszi a programot egyedivé.

5.1.2. A SEAM3D modul

A SEAM3D Reaktív transzport szimulációs kód, mellyel komplex, több szubsztrátumot és elektron akceptort is figyelembe vevő biodegradációs feladatok modellezhetők (Widdowson, 2002). A modul alapja a MT3DMS kód (lásd 19. ábra).



19. ábra Az MT3DMS transzport-modellező kódra épülő SEAM3D részei (Widdowson, 2002 alapján szerkesztve).

A SEAM3D - az MT3DMS (Modflow transzport-szimulációs kód) modulhoz képest – tartalmaz egy biodegradációs és egy NAPL típusú szennyeződések lebomlást szimuláló

csomagot. Ezt a program kódot Mark Widdowson fejlesztette ki (*Widdowson, 2002*) a Virginia Tech egyetemen.

A redukzív deklórozási csomaggal szimulálhatjuk 3D-ben a klórozott oldószervegyületek transzport folyamatait, ezen anyagok redukzív dehalogénezése révén létrejövő lebomlási termékek (TCE, cisz 1-2-diklór-etén, és vinil-klorid) összetett biológiai folyamatait a vízadókban, mint pl. közvetlen oxidáció, redukzív dehalogénezés és kómetabolizmus. Mindegyik folyamat alkalmazhatósága és mértéke, ami hatással van szennyező anyag összetételére, függenek a véges-differencia rácsháló minden egyes modelcellájában szimulált redox feltételektől.

A NAPL lebomlási csomaggal szimulálhatók az elektron donorok (például szénhidrogén szennyezések) és klórozott etilének (PCE, TCE és / vagy DCE) transzport folyamatai - amelyek lehetnek víznél könnyebb és nehezebb NAPL szennyezők - a vizes fázisban. SEAM3D nem képes szimulálni a többfázisú áramlást, azonban időfüggő NAPL felhalmozódás hozzáadása és / vagy a források eltávolítása meghatározott időpontokban lehetséges a szimulációk során.

6. Kihívások a DNAPL szennyezőanyagok transzport folyamatainak szimulációi során

6.1. Több fázisú áramlás

Ahhoz hogy a speciális szennyezőanyagok transzport folyamatainak szimulációs alapelveit megértsük, szükség van a több fázisú áramlások törvényszerűségeinek tanulmányozására. Ezen keresztül kiválóan bemutatathatók a szimulációk során fellépő főbb nehézségek kiváltó okai. Ennek megfelelően a következőkben a többfázisú szennyezőanyag áramlás egyenletét mutatom be.

Tegyük fel, hogy a különböző fázisok a rendelkezésre álló térfogatot teljes mértékben kitöltik. A három fázis (szilárd, folyadék, gáz) számos összetevőből tevődik össze. Az egyes összetevők átléphetnek az egyik fázisból egy szomszédosba, ilyen mechanizmus pl. az oldódás, párolgás és kondenzáció. Az összetevők egy része adszorbeálódhat a talaj részecskéken, de eltekintve ezen heterogén reakcióktól, ezek kémiaailag nem hatnak egymásra és egy folyékony fázist alkotnak. Az összetételi modell meghatározást eredetileg a rezervoár mérnökök alkalmazták (*Bear, Cheng, 2010*).

Tekintsük át a szilárd, folyékony és gáz fázisokat:

- A nem vizes fázist (pl. DNAPL) 'N' betűvel jelöljük. Tartalmazza az illékony összetevőt (d) - amely oldódhat a vizes és kipárolgathat a gáz fázisba -, a vízben oldottat (w) és a többi fázist (r) – amely a nem illékony összetevőt tartalmazza. Feltételezzük, hogy a 'd' összetevő elpárolog mind a vizes és nem vizes fázisból, és a gáz fázisban eggyé válnak.
- A vizes fázist (pl. víz) jelöljük 'A' betűvel. Ez tartalmazza a „tisza vizet” (w), mint összetevőt, a 'd' összetevőt, mint oldatot, és az oldott gázt (a).
- A gáz fázis (pl. levegő) 'g' betűvel jelöljük. Két részből áll: a „száraz levegőből” (a), az illékony 'd' összetevőből és gőzből (w).
- A szilárd mozdulatlan talaj 's', amely nem oldódik és a 'd' komponensből áll, amely adszorbeálódni tud rá, de csak az 'A' fázisból (*Bear, Cheng, 2010*).

A három fázis ezen komponenseit és a különböző fázisok közötti transzfereket mutatja a **20. ábra**.

Az egyszerűsítés kedvéért bevezetjük az úgynevezett egyensúlyi operátort (\mathcal{E}), amit a következőképpen definiálhatunk (*Bear, Cheng, 2010*):

$$\mathcal{E}(c) = \frac{\partial}{\partial t} \theta c + \nabla \cdot \theta (cV - D_h \cdot \nabla c), \quad (8)$$

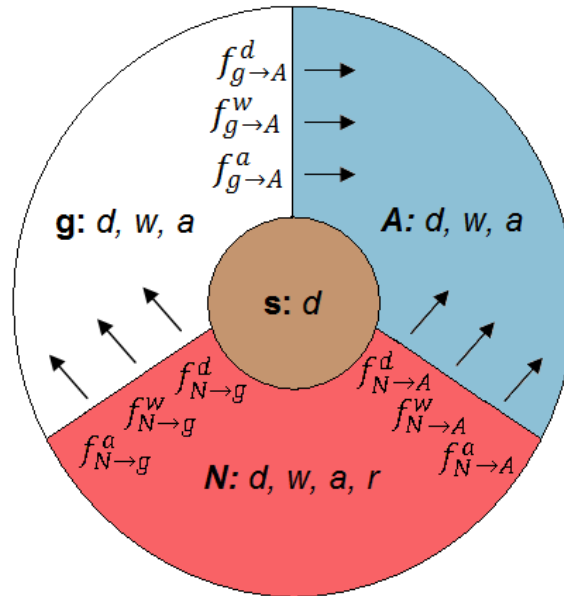
ahol

θ – súlyzó tényező a Crank-Nicolson rendszerben,

c – koncentráció [mg/l],

V – folyadék fázis sebessége [m/s],

D_h – horizontális diszperzió [m].



20. ábra Transzport folyamat vázlatos ábrája három-fázisú áramlási rendszerben (Bear, Cheng, 2010 alapján).

Egy α fázisra vonatkozó transzport egyenlet:

$$\mathcal{E}_\alpha^\gamma(\omega_\alpha^\gamma) \equiv \frac{\partial}{\partial t} (\theta_\alpha \omega_\alpha^\gamma \rho_\alpha + \nabla \cdot \theta_\alpha [(\omega_\alpha^\gamma \rho_\alpha V_\alpha - \rho_\alpha \mathcal{D}_\alpha^{*\gamma} \cdot \nabla \omega_\alpha^\gamma - D_\alpha \cdot \nabla \omega_\alpha^\gamma \rho_\alpha]). \quad (9)$$

A fenti egyenletben a tömeg frakciót, ω_α^γ , használjuk, a szokásos tömeg koncentráció helyett, c_α^γ . Ennek oka, hogy a folyadék fázis sűrűségfüggvénye a következő alakban adható meg $\rho_\alpha = \rho_\alpha(p, T, \omega_\alpha^\gamma)$. Ha tömegkoncentrációt használjuk akkor egy körkörös megoldást kapunk, amely bonyolítja tovább az egyenletet, $\rho_\alpha = \rho_\alpha(p, T, c_\alpha^\gamma / \rho_\alpha)$. A 9. egyenletben lévő molekuláris diffúzió fluxust helyettesítjük a következő egyenlettel:

$$j^\delta = -\sum_{\gamma(\neq\delta)} j^\gamma = \sum_{\gamma(\neq\delta)} \rho \mathcal{D}^{\gamma\delta} \nabla \omega^\gamma, \quad (10)$$

amely csak akkor teljesül, ha $\sum_{(\gamma)} j^\gamma = 0$. Erre azért van szükség, hogy a több összetevő kölcsönhatását figyelembe tudjuk venni (Bear, Cheng, 2010).

Feltételezzük, hogy a fázisokban és összetevőkben nincs külső forrás és nyelő, nincs csökkenés és növekedés és nincs kémiai kölcsönhatás. A komponensek egyetlen

forrása és nyelője a vizsgált fázisban az adszorpció, az oldódás és a párolgás (Bear, Cheng, 2010).

A tömegmegmaradás egyenletének összetevői a folyadék fázisban (A):

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_A^w(\omega_A^w) &= f_{N \rightarrow A}^w + f_{g \rightarrow A}^w, & \mathcal{E}_A^a(\omega_A^a) &= f_{N \rightarrow A}^a + f_{g \rightarrow A}^a, \\ \mathcal{E}_A^d(\omega_A^d) &= f_{N \rightarrow A}^d + f_{g \rightarrow A}^d + f_{s \rightarrow A}^d.\end{aligned}\quad (11)$$

A gáz fázisra (g) ugyanezek az egyenletek:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_g^w(\omega_g^w) &= f_{N \rightarrow g}^w - f_{g \rightarrow A}^w, & \mathcal{E}_g^a(\omega_g^a) &= f_{N \rightarrow g}^a - f_{g \rightarrow A}^a, \\ \mathcal{E}_g^d(\omega_g^d) &= f_{N \rightarrow g}^d - f_{g \rightarrow A}^d.\end{aligned}\quad (12)$$

A nem vizes fázisra (N) vonatkozó tömegmegmaradás egyenletek pedig:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_N^w(\omega_N^w) &= -f_{N \rightarrow A}^w - f_{N \rightarrow g}^w, & \mathcal{E}_N^a(\omega_N^a) &= -f_{N \rightarrow A}^a - f_{N \rightarrow g}^a, \\ \mathcal{E}_N^d(\omega_N^d) &= -f_{N \rightarrow A}^d - f_{N \rightarrow g}^d.\end{aligned}\quad (13)$$

A tömegmegmaradás egyenlete a talajba adszorbeálódott 'd' összetevőre:

$$\mathcal{E}_{adsz}^d(c_{adsz}^d) = -f_{s \rightarrow A}^d, \quad c_{adsz}^d \equiv (1 - \phi)\rho_s F^d, \quad (14)$$

ahol az egyensúlyi operátort a következőképpen definiálhatjuk:

$$\mathcal{E}_{adsz}^d(c_{adsz}^d) \equiv \frac{\partial c_{adsz}^d}{\partial t}. \quad (15)$$

Annak érdekében, hogy megszüntessük a fázishatár transzfereket, összesítjük a tömegmegmaradás egyenletek 'd' komponenseit minden fázisból:

$$\mathcal{E}_A^d(\omega_A^d) + \mathcal{E}_N^d(\omega_N^d) + \mathcal{E}_g^d(\omega_g^d) + \mathcal{E}_{adsz}^d + (c_{adsz}^d) = 0. \quad (16)$$

Ezután kapjuk az N fázisra a következő egyenletet:

$$\begin{aligned}& \frac{\partial}{\partial t} [\theta_A \omega_A^d \rho_A + \theta_N \omega_N^d \rho_N + \theta_g \omega_g^d \rho_g + (1 - \phi) \rho_s F^d] \\ & + \nabla \cdot (\theta_A \omega_A^d \rho_A V_A + \theta_N \omega_N^d \rho_N V_N + \theta_g \omega_g^d \rho_g V_g) \\ & - \nabla \cdot (\theta_A \rho_A \mathcal{D}_A^{*d} \cdot \nabla \omega_A^d + \theta_N \rho_N \mathcal{D}_N^{*d} \cdot \nabla \omega_N^d + \theta_g \rho_g \mathcal{D}_g^{*d} \cdot \nabla \omega_g^d) \\ & - \nabla \cdot (\theta_A D_A \cdot \nabla \omega_A^d \rho_A + \theta_N D_N \cdot \nabla \omega_N^d \rho_N + \theta_g D_g \cdot \nabla \omega_g^d \rho_g) = 0.\end{aligned}\quad (17)$$

Hasonló úton kapjuk meg a tömegmegmaradás egyenletét a vizes:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} [\theta_A \omega_A^w \rho_A + \theta_N \omega_N^w \rho_N + \theta_g \omega_g^w \rho_g] \\
& + \nabla \cdot (\theta_A \omega_A^w \rho_A V_A + \theta_N \omega_N^w \rho_N V_N + \theta_g \omega_g^w \rho_g V_g) \\
& - \nabla \cdot (\theta_A \rho_A \mathcal{D}_A^{*w} \cdot \nabla \omega_A^w + \theta_N \rho_N \mathcal{D}_N^{*w} \cdot \nabla \omega_N^w + \theta_g \rho_g \mathcal{D}_g^{*w} \cdot \nabla \omega_g^w) \\
& - \nabla \cdot (\theta_A D_A \cdot \nabla \omega_A^w \rho_A + \theta_N D_N \cdot \nabla \omega_N^w \rho_N + \theta_g D_g \cdot \nabla \omega_g^w \rho_g) = 0,
\end{aligned} \tag{18}$$

és a levegő (gáz)fázisokra:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} [\theta_A \omega_A^a \rho_A + \theta_N \omega_N^a \rho_N + \theta_g \omega_g^a \rho_g] \\
& + \nabla \cdot (\theta_A \omega_A^a \rho_A V_A + \theta_N \omega_N^a \rho_N V_N + \theta_g \omega_g^a \rho_g V_g) \\
& - \nabla \cdot (\theta_A \rho_A \mathcal{D}_A^{*a} \cdot \nabla \omega_A^a + \theta_N \rho_N \mathcal{D}_N^{*a} \cdot \nabla \omega_N^a + \theta_g \rho_g \mathcal{D}_g^{*a} \cdot \nabla \omega_g^a) \\
& - \nabla \cdot (\theta_A D_A \cdot \nabla \omega_A^a \rho_A + \theta_N D_N \cdot \nabla \omega_N^a \rho_N + \theta_g D_g \cdot \nabla \omega_g^a \rho_g) = 0.
\end{aligned} \tag{19}$$

A tömegmegmaradás egyenletében szereplő többi tag egy általános γ komponensre felírva:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left[\sum_{\alpha=A,N,g} \theta_\alpha \omega_\alpha^\gamma \rho_\alpha + (1 - \phi) \rho_s F_s^\gamma \right] + \nabla \cdot \left[\sum_{\alpha=A,N,g} \theta_\alpha \omega_\alpha^\gamma \rho_\alpha V_\alpha \right] \\
& - \nabla \cdot \left[\sum_{\alpha=A,N,g} \theta_\alpha \rho_\alpha \mathcal{D}_\alpha^{*\gamma} \cdot \nabla \omega_\alpha^\gamma \right] - \nabla \cdot \left[\sum_{\alpha=A,N,g} \theta_\alpha D_\alpha \cdot \nabla \omega_\alpha^\gamma \rho_\alpha \right] = 0, \\
& \gamma = d, w, a; \quad F_s^w = F_s^a = 0.
\end{aligned} \tag{20}$$

Ebben az egyenletben az advektív fluxust, $\theta_A V_A$, $\theta_N V_N$ és $\theta_g V_g$, a mozgás-egyenlet adja, amely elhanyagolja a lendületet a szomszédos folyadék fázisok között, ez a következő:

$$\theta_\alpha V_\alpha = -\frac{k_\alpha}{\mu_\alpha} \cdot (\nabla p_\alpha + \rho_\alpha \nabla z), \quad \alpha = A, N, g. \tag{21}$$

Azt feltételezzük, hogy az egyensúlyi egyenletekből ismert változók a következők:

$$\phi, \rho_s, \rho_A, \rho_g, \rho_N, \mu_A, \mu_g, \mu_N, k_A, k_g, k_N, \mathcal{D}_A^{*d}, \mathcal{D}_g^{*d}, \mathcal{D}_N^{*d}, D_A, D_g, D_N,$$

ezek vagy állandók, vagy a termodinamika függvényei, amit meghatároz a nyomás, hőmérséklet és a tömeg rész a megfelelő fázisban. A megmaradt változók vagy ismeretlenek a következők:

$$p_A, p_g, p_N, \theta_A, \theta_g, \theta_N, c_s^d, \omega_A^d, \omega_g^d, \omega_N^d, \omega_A^w, \omega_g^w, \omega_N^w, \omega_A^a, \omega_g^a, \omega_N^a.$$

A következő feltétel a térfogat frakciókra:

$$\theta_A + \theta_g + \theta_N = \phi, \quad (22)$$

és a fázis nyomás és a kapilláris nyomás kapcsolatára:

$$p_g - p_N = p_{cgN}(\theta_g), \quad p_N - p_A = p_{cNA}(\theta_A), \quad (23)$$

ezekkel kiküszöbölhető néhány változó. Így miután a fenti ismeretleneket kifejeztük, marad még tizenhárom változó:

$$p_g, \theta_A, \theta_g, c_s^d, \omega_A^d, \omega_g^d, \omega_N^d, \omega_A^w, \omega_g^w, \omega_N^w, \omega_A^a, \omega_g^a, \omega_N^a.$$

Az ismeretlen változók számának csökkentése érdekében egyensúlyi állapotot feltételezünk a fázisok között, és megfelelő termodinamikai összefüggéseket alkalmazunk a komponensek koncentrációinak vonatkozásában a szomszédos fázisokkal együtt. Például, ha a lineáris izotermával vesszük figyelembe a talajba történő adszorpciót:

$$K_d^d = \frac{F^d}{\omega_A^d \rho_A}, \quad (24)$$

ezzel megszüntetjük a c_s^d változót, és így marad tizenkettő. A folyékony összetevőkre, ha az oldat hígul, alkalmazhatjuk a Henry törvényt:

$$\mathcal{H}_{g,A}^d = \frac{\omega_g^d}{\omega_A^d}, \quad \mathcal{H}_{g,N}^d = \frac{\omega_g^d}{\omega_N^d}, \quad \gamma = d, w, a, \quad (25)$$

amelyben $\mathcal{H}_{g,A}^d$ és $\mathcal{H}_{g,N}^d$ a Henry együttható, megfelelően átalakíthatjuk a tömegfrakciók arányaival. A Henry törvénynek más formáit is használhatjuk, mint pl. a mól frakciót (m_α^γ). Ez a hat összefüggés lehetővé teszi, hogy gyorsan megkapjunk hat tömeg frakciót, így már csak hat ismeretlen változó marad a listán. Ugyanakkor a tömeg frakciónak is meg kell felelni a következő feltételnek:

$$\omega_A^d + \omega_A^w + \omega_A^a = 1, \quad \omega_g^d + \omega_g^w + \omega_g^a = 1, \quad \omega_N^d + \omega_N^w + \omega_N^a = 1. \quad (26)$$

Annak érdekében, hogy ezek a korlátozások teljesüljenek, kiválasztunk egyes komponenseket a tömeg frakciókból néhány konkrét fázisban, amelyek hozzá tartoznak

az alap fázishoz. Például, tegyük fel, hogy a gáz fázist választjuk az alap fázisból az összes komponensével (bár általában az alap fázisból nem kell az összes komponens), így megkapjuk az alap tömeg frakciókat, amik ω_g^d , ω_g^w és ω_g^a . Ezután alkalmazzuk a Henry törvényt a többi tömegrész tekintetében és behelyettesítjük a 26-os egyenletbe, ezzel megadjuk a következő három lineáris egyenletből álló rendszert:

$$\omega_g^d + \omega_g^w + \omega_g^a = 1, \quad (27)$$

$$\mathcal{R}_{g,A}^d \omega_g^d + \mathcal{R}_{g,A}^w \omega_g^w + \mathcal{R}_{g,A}^a \omega_g^a = 1, \quad (28)$$

$$\mathcal{R}_{g,N}^d \omega_g^d + \mathcal{R}_{g,N}^w \omega_g^w + \mathcal{R}_{g,N}^a \omega_g^a = 1, \quad (29)$$

amelyet megoldva ω_g^d , ω_g^w és ω_g^a -t; ezek persze függvényei a nyomásnak és hőmérsékletnek (Bear, Cheng, 2010).

Így marad a következő három ismeretlen (elsődleges változók):

$$p_g, \theta_A, \theta_g,$$

amiket meghatározhatunk a három egyensúlyi egyenletből (20).

Az a helyzet állt elő, hogy a vizsgált területen, ahol eredetileg is csak két fázis van - levegő és víz - a terület egyik részében és három fázis – levegő, víz és NAPL – a fennmaradó részben, a két fázis közötti határ úgy viselkedik, mint egy mozgó front. Hasonlóan az idő múlásával – mondjuk a NAPL – a vizsgált területen eltűnik. Mindkét esetben mi átváltunk a két-fázisú rendszerről három-fázisúra és fordítva (Bear, Cheng, 2010.).

Általában bizonyos funkciókat be kell vonni a számítógépes programba annak érdekében, hogy megoldja ezeket a lehetőségeket. Továbbá több kezdeti és határfeltételt kell bevezetni azért, hogy a többfázisú transzportegyenleteket oly mértékben egyszerűsítsük, hogy a számítógépes szimuláció elvégezhető legyen.

6.2. Numerikus megoldások bemutatása

A hidrodinamikai- és transzport-folyamatokat szimuláló matematikai modellek a vizsgálni kívánt rendszert jellemző paraméterek és változók számszerűsített összefüggésén alapulnak. Ezek a modellek numerikus megoldásokat alkalmaznak a szivárgás alapegyenletének közelítő megoldására. A matematikai értelemben vett közelítés azt jelenteni, hogy a megoldás nem egzakt. Tehát, ha a megoldás közelítő, akkor hibákkal terhelt, amelyeket numerikus hibáknak hívunk (Kovács, 2004, Szűcs et al., 2009).

A numerikus módszereket alkalmazó megoldások, úgy közelíthetik a valós folyamatokat, hogy mind időben, mind térben szakaszolják a lezajló folyamatokat. A számításhoz szükséges peremfeltételeket az egyes szakaszokon belül állandónak tekintik, és ezzel válik lehetővé a megoldás (Kovács, 2004).

Az adott probléma megoldásánál a térbeli szakaszolást a numerikus módszerekkel történő elemekre bontást értjük. A vizsgált térrészt olyan elemekre bontjuk melyeken belül az egyes közegjellemzők (pl. porozitás, szivárgási tényező, tárolási tényező stb.) állandónak tekinthetők (Kovács, 2004).

A térrész szakaszolás tetszőleges, mivel elvileg az elemek száma korlátlan. A vizsgált folyamatot minél több elemre bontjuk, annál pontosabban tudjuk a tér változásait követni. Azonban érdemes megjegyezni, hogy a térbeli szakaszolás növelésével egyes numerikus hibák is nőnek és a probléma számításigénye is exponenciálisan növekszik. Ezt figyelembe véve a feladat térbeli szakaszolásának van egy optimuma, ahol a numerikus módszerrel közelített probléma már megfelelő mértékben követi a valós folyamatokat a térben, ugyanakkor a számítási igénye és a numerikus hibák nagysága még elhanyagolható (Kovács, 2004; Bear, Cheng, 2010).

A víz porózus közegbeli szivárgásának jellemzői a következő numerikus módszerekkel vizsgálhatók (Bear, Cheng, 2010):

- véges differencia módszer,
- véges térfogat módszer,
- végeelem módszer,
- peremelem módszer,
- radiális bázis függvény rendezésen alapuló módszer,
- Euler-Lagrange módszerek.

A legtöbb kereskedelemben kapható program, illetve a szakmában elterjedt modellező rendszerek - így a GMS is - legnagyobb része a véges differencia és a végeelem módszereket alkalmazza, ezért csak ezt a két numerikus módszert mutatom be részletesen.

Véges differencia módszer

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

- A vizsgált térrészt tetszőleges számú síkban tetszőleges darabszámú, de azonos eloszlású, egymással hézagmentesen érintkező, téglatest alakú elemre bontjuk, egyenletes vagy változó osztású rácsháló segítségével.
- Differencia-egyenletté alakítjuk a szivárgás alapegyenletét (a differenciál-egyenletet).

- A Darcy-törvény és a kontinuitási tétel felhasználásával, meghatározzuk az egyes hasábelemek és az azokkal közvetlenül érintkező elemek közötti vízhozamokat.
- Figyelembe vesszük az egyes kutak, galériák, és egyéb létesítmények (pl. szivárgók) által az egyes elemekbe táplált vagy onnan kivett hozamokat, valamint a rendszer vízmérlegét befolyásoló egyéb objektumokat (pl. felszíni vizek és vízáradók kommunikációjából eredő hozamok) vízmérlegre gyakorolt hatását.
- A következő lépés összegezni minden egyes elemre a vízmérleg-elemeit. A modellezett térrész szélein a hiányzó elemek pótlására peremfeltételeket alkalmazunk. Az összes elemre felírva a vízmérleg elemeket, felállítjuk a modellezett tér vízforgalmát az adott időlépcsőben leíró lineáris egyenletrendszert, majd ezt numerikus iteratív eljárásokkal megoldjuk.
- Az elemekben tárolt vízkészlet növekedése vagy csökkenése alapján meghatározzuk az elemekben bekövetkező vízszint (nyílt tükrű rendszer) vagy nyomásszint (zárt tükrű rendszer) változásokat.
- Időben nem állandó rendszerben a következő időlépcsőre ismét felírjuk a Darcy-törvényen alapuló, elemek közötti vízhozamokat és a számítás fázisait – a különböző időlépcsőkre – megismételjük (Kovács, 2004).

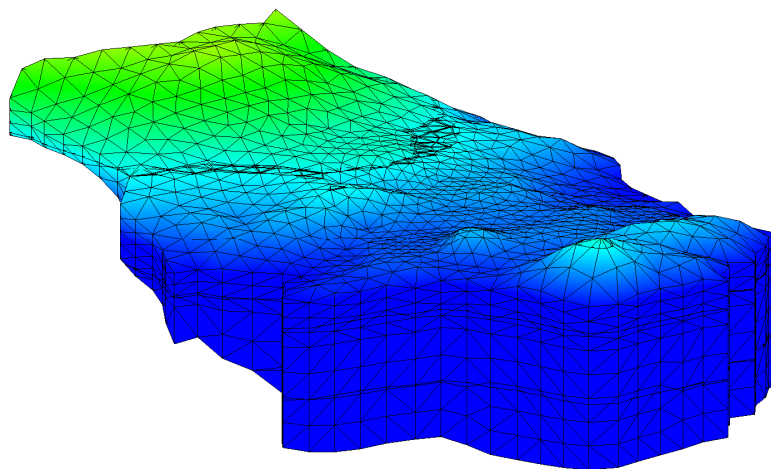
A bemutatott megoldással abszolút nyomásszinteket nem tudunk számítani, mindössze a nyomásszintek változásait, éppen ezért szükséges a számításhoz egy kiindulási állapot meghatározása, egy alaphelyzet, amit a számítás kezdeti feltételének nevezünk. A hidrodinamika (szivárgás) alapegyenletének megoldásához szükséges kezdeti feltétel egy tetszőleges, de ismert kezdeti időpontban a nyugalmi nyomásszint-eloszlás (Kovács, 2004).

Végeselem módszer

A módszer alapját az integrációs technikák adják, míg a véges differencia módszer alapja a differenciálistechnikák alkalmazása az áramlás egyenletének megoldására (Poehls, Smith, 2009).

A hidrodinamikai-, és transzport-folyamatok alapegyenletének végeselem módszerrel történő megoldása megköveteli a modellezett térrész tetszőleges számú csomópontra, és az azokat összekötő vonalak által határolt elemekre történő felosztását. Az elmúlt években történő fejlesztések révén a véges differencia módszer már rugalmas diszkretizációra is alkalmas és ezzel megközelíti a tetszőleges számú elemekre bontást, azonban még mindig elmarad a végeselem módszertől, amely lehetővé teszi az adott tartomány tetszőleges számú és alakú elemekre való felbontását (21. ábra). Mindezeket figyelembe véve megállapíthatjuk, hogy az elemkiosztás a rendelkezésre álló

információkhoz és geometriához sokkal inkább hozzá igazítható, mint a véges differencia módszernél.



21. ábra A GMS Femwater moduljában készített végeelem-háló egy modellezésem során.

A számítási eljárás alkalmazásának lépései:

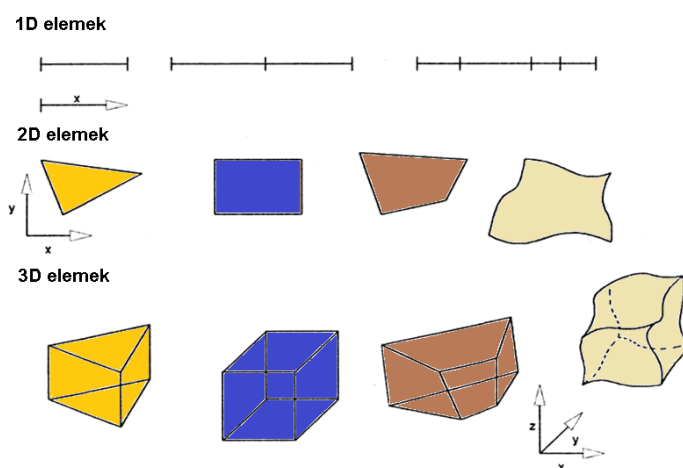
- A vizsgált térést mozaikszerűen elemekre bontjuk.
- Az egyes, felvett elemek mentén a keresett mezőt vagy mezőket előre felvett paramétereket tartalmazó függvényekkel közelítjük, ami tulajdonképpen a lokális approximáció (lokális közelítés) elve.
- A lokálisan felvett approximációs függvényeket ezután 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 (Kovács, 2004).
- A megoldandó egyenletrendszer mátrixa bonyolultabb szerkezetű, mint a véges differencia módszer esetében, emiatt a megoldás folyamata több erőforrást igényelhet.

Az említett alapelv a hidrodinamikai-, és transzport-modellezésnél a következőképpen valósul meg. Az elemek a végeelem módszer esetén, nem oldalaikon, hanem az elemek csomópontjaikon keresztül illeszkednek egymáshoz. Emiatt az elemek vízmérlege helyett a csomópontok vízmérlegét kell felírunk és nem az elemek átlagos nyomásszintjeit, hanem a csomóponti nyomásszinteket számítjuk. A térbeli folytonosság

azáltal valósul meg, hogy egy adott csomópontban a potenciál értékeknek egyformának kell lennie függetlenül attól, hogy melyik elem felől közelítjük is meg.

A végeelem-háló egy-, két- vagy háromdimenziós elemekből épülhet fel, a megoldandó feladattól függően (**22. ábra**). Leggyakrabban egy dimenzióban a vonal, két dimenzióban a háromszög és négyszög, illetve három dimenzióban a háromszög alapú hasáb elemtípusokat alkalmazzák (Istok, 1989.).

A kereskedelemben kapható modellezőcsomagok tipikusan integrált végeelem generációs algoritmusok.



22. ábra A végeelem módszernél alkalmazott elemtípusok (Istok, 1989; Kovács, 2004 alapján).

6.3. A speciális szennyeződések transzport folyamatainak szempontjából fontos szerepet játszó numerikus közelítő módszerek bemutatása esettanulmányokon keresztül

Ebben a fejezetben olyan esettanulmányokat mutatok be, amelyek szimulációjához véges differencia és végeelemes módszert alkalmazó GMS modult alkalmaztam. Ezen szimulációk segítségével, lehetőség nyílik arra, hogy a speciális szennyezőanyagok transzport-folyamatainak tanulmányozásának alapját képző numerikus módszereket részletesen bemutassam.

6.3.1. Több szinten szűrőzött kutak hidraulikai viszonyainak vizsgálata véges differencia módszerrel, a transzport modellezések megbízhatóságának növelése érdekében

Számos példa mutatja Magyarországon (pl. Tiszaújváros, Jászberény), hogy a felszín közelében lévő vízzáró rétegen átjutott víznél könnyebb és nehezebb klórozott

szénhidrogén az alatta lévő vízáadó rétegeket elszennyezi és ezek itt meg is rekednek (mivel a vízáadó alján szintén egy agyag réteg található), illetve az áramlás irányába elmozdulnak. Az elszennyeződés egyes esetekben úgy történik, hogy egy felszín alá süllyesztett tartályba gyűjtötték a különböző szennyező anyagokat, amely feltehetőleg korrodálódott és kilyukadt. Más esetekben pedig mélyebben lévő víztartó réteget szennyeznek el DNAPL anyagokkal pl. a nem megfelelő feltárások során.

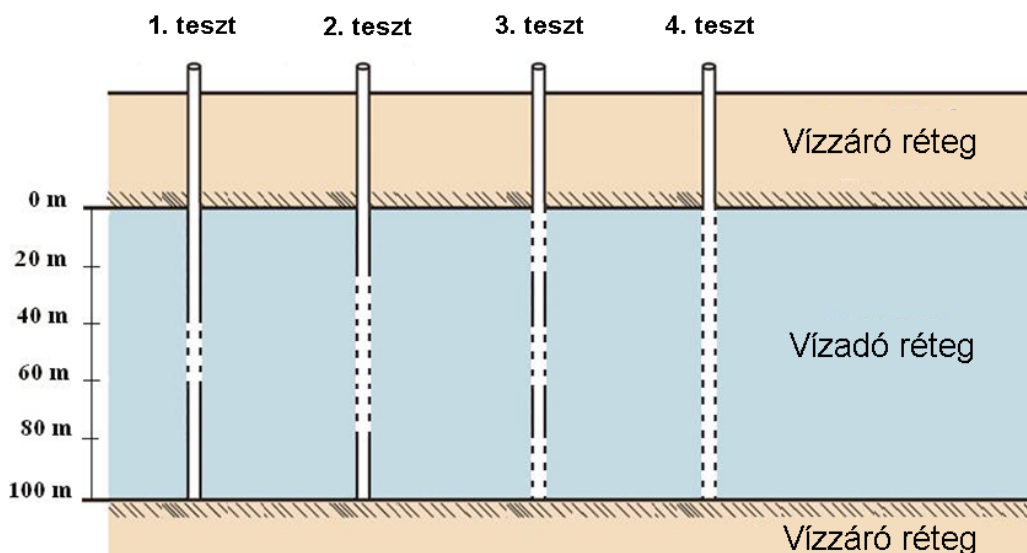
Az első esettanulmányban olyan véges differencia modellezést mutatok be, amely a gyakorlatban sokszor előfordul, az in-situ több szinten szűrőzött kutakkal történő kármentesítések (*Herrling et al., 1990*) transzport folyamatainak szimulációs pontosítására használható.

2011-től kezdtünk el Székely Ferencsel közösen foglalkozni a több szinten szűrőzött kutak hidraulikai modellezésének vizsgálataival, illetve az analitikus és numerikus módszerek alkalmazhatóságának összehasonlításával és ezek megbízhatóságával. Az összehasonlító vizsgálatok során az analitikus megoldáson kívül, két véges differencia módszert alkalmazó programot használtunk a szimulációkra, ezek a következők:

- A GMS programcsomag MODFLOW moduljához kapcsolódó MNW (Multi Node Well) csomagja. Az MNW lehetővé teszi a felhasználók számára, hogy két vagy több szinten szűrőzött kút egy modellcsomópontban (oszlopban) modellezzenek. Szimulációkat tudunk végezni többretegű víztartókra, vagy egy heterogén víztartóra, a részben szűrőzött kút hidraulikaihatásainak vizsgálatára (**23. ábra**), és vízszintes kutakra. Az MNW csomag bevezetése jelentős mértékben növeli a MODFLOW program gyakorlati alkalmazási lehetőségeit a környezeti hidraulika területén (*Szucs et al., 2013*).
- A másik megvizsgált program egy alternatív numerikus több szinten szűrőzött kút szimulátor a FLOW, amelyet Székely Ferenc fejlesztett ki (*Székely et al. 1996, 2000., 2012*). A kútáramlási modul véges differencia módszert alkalmaz a felszín alatti áramlások modellezése során, becsüli a kútban kialakult depressziót és a szűrőnkénti hozamokat a lamináris és turbulensfelületi veszteségek figyelembevételével.

A **23. ábrán** feltüntetett (1 rétegre, három egymást követő rétegre, három különálló rétegre és mind az öt rétegre szűrőzött) tesztekre két analitikus (3D-A és 3D-B) és két numerikus (MODFLOW és FLOW) módszer hasonlítottunk össze a több helyen szűrőzött kutak áramlásának szimulációja során.

Az összehasonlító vizsgálatban négy eltérő teszt elvégzésével mutatom be, hogy az Multi Node Well (MNW) és FLOW csomagok alkalmazása miként befolyásolja a szimuláció során kapott eredményeket.



23. ábra. A teljes hosszban (4. teszt), részlegesen (1. és 2. teszt) és szakaszosan (3. teszt) szűrőzött kutak elhelyezkedése a nyomás alatti rendszerben (Konikow et al., 2009 alapján).

Egy szennyezett terület méretének megfelelő nyomás alatti szimulációs modell, amely öt homogén horizontális réteget foglal magában a következő paraméterekkel:

- vastagság: 20 m,
- kezdeti vízszint: 0 m,
- szivárgási tényező: 0.0001 m/s,
- horizontális és vertikális anizotrópia: 1,
- tárolási tényező: 0.00001 1/m.

A modell terület paraméterei:

- a bal alsó sarok koordinátái: 0 m; 0 m,
- a jobb felső sarok koordinátái: 510 m; 510 m.

A hálórendszer, amelyet a MODFLOW alkalmaz:

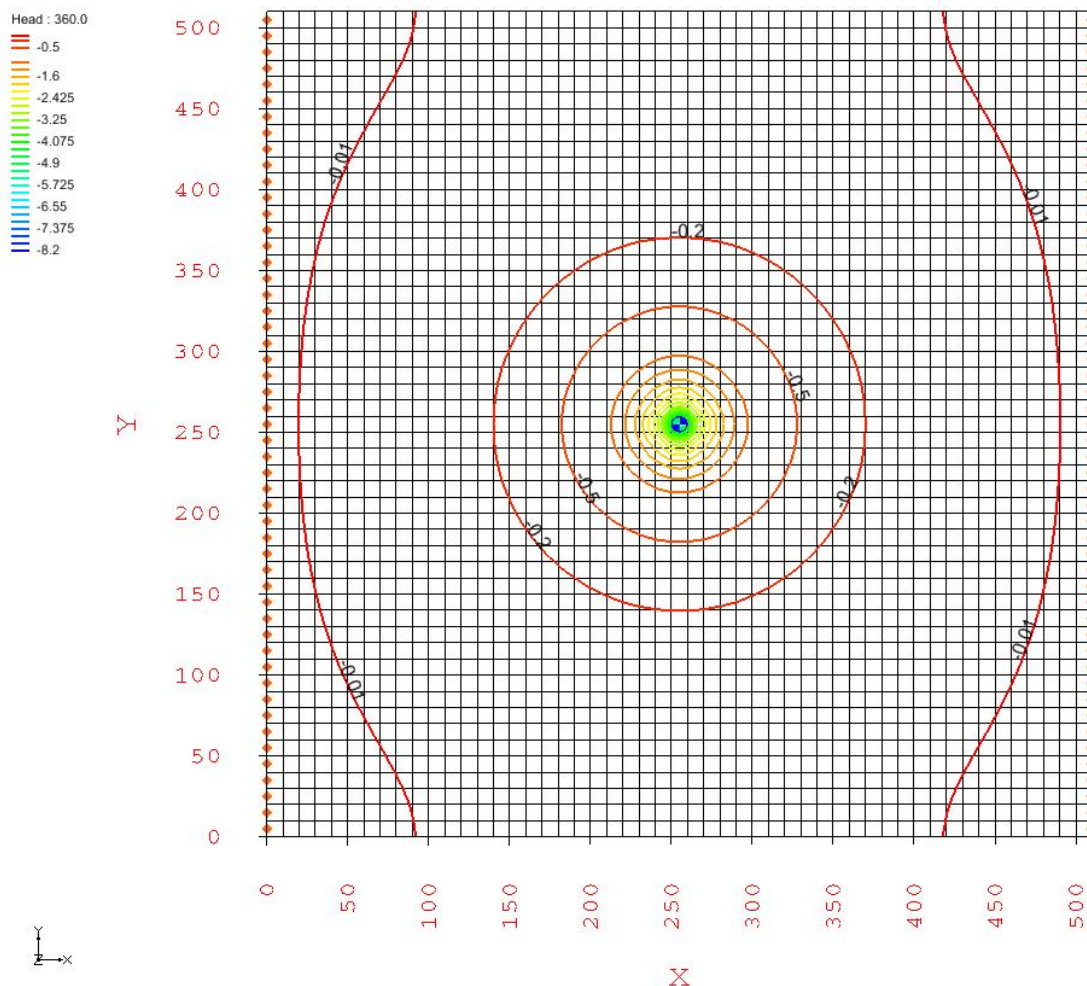
- 51 sor, 51 oszlop,
- általános hálóméret: 10m.

Kút adatok:

- a termelő kút a modellezett terület közepén helyezkedik el, koordinátái (255 m; 255 m),
- a kút sugara 0.2 m,
- hozama: $-0.1 \text{ m}^3/\text{s}$.

A MODFLOW MNW csomagjának alkalmazásához a szóban forgó terület hidrodinamikai modelljének előállításához GMS modellezési rendszert használtam. Az alkalmazott hálórendszert a határfeltételekkel és a kúttal a közepén a **24. ábra** mutatja.

A modellezett terület K-i és Ny-i oldalán állandó vízszint mellett speciális határfeltétel került beállításra. Ezzel a numerikus hibákat csökkentettük. A modellezet terület É-i és D-i oldalán áramlásra vonatkozó határfeltételek nem kerültek beállításra.



24. ábra. Az alkalmazott grid háló a határfeltételekkel, a modellezett terület közepén lévő kúttal és a depresszió kontúrvonalai a 4. tesztben.

Technikai szempontból a talajvizek áramlásának vizsgálata során nagyon fontos, hogy a kitermelő kút helyi depresszióját meghatározzuk (Szűcs *et al.*, 2011). Abban az esetben, ha véges differencia megoldást használunk, mint a MODFLOW, a helyi depresszió (s_{well}) a vizsgált kútban a hálóban lévő (s_{grid}), és a növekménnyel korrigált (ds_{well}) depressziók összegeként értelmezhető. A növekménnyel korrigált depresszió a 30. egyenlet alapján számítható (Szucs *et al.*, 2013):

$$ds_{well} = \frac{Q}{2\pi T} \cdot \ln 0.2 \cdot \frac{\Delta x}{r_w} \quad (30)$$

ahol

Q – a kútból kitermelt hozam [m^3/s],

T – a cella áteresztőképessége, amelyben a kút található [m^2/s],

Δx – a cella mérete, ahol a kút van [m],

r_w – a termelt kút sugara.

A 30. egyenlet tisztán radiális áramlást feltételez a vizsgált háló kútjának szűrőjében. Feltételezhető, hogy ezen szűrők mentén nincs vagy elhanyagolhatóan kicsi a vertikális áramlás a négyzet rácsoktól és vissza. A teljes hosszban szűrőzött kút (4. teszt) (**23. ábra**), amelyeknek alsó és felső része vízzáró réteggel van lezárva, ezt a fajta áramlást jó példaként mutatja. Néhány másfajta szűrőzési formáció esetében - részleges beáramlási felület, nem folyamatos szűrőzés (3. teszt) (**23. ábra**), vagy félig áteresztő fedővel rendelkező vízadó - ettől eltérő tulajdonságok mutatkoznak. Ezek a bemutatott körülmények az adott szűrőzések esetében vertikális áramlást eredményezhetnek és a MODFLOW alkalmazása esetén némely szimulációs eredményt bizonyos mértékben torzíthatják.

A felületi hatás (skin effect) a termelő kút környezetében a hidraulikus vezetőképesség (áteresztőképesség) megváltozásával fejezhetjük ki. Az MNW csomag lehetőséget nyújt a modellező számára a felületi hatás (Skin érték) szimulációkba történő beszámítására. Ez a felületi hatás úgy jelentkezik a kút körül, mint egy áramlás nélküli hengeres rész (r_{skin}), ahol a kút sugarát ismerjük (r_w). A felületi zónában a transzmisszivitás T_{skin} , eltér a közeg normál vízszállító-képességétől (T). A dimenzió nélküli felületi koefficiens a vízszállító-képességek arányából és az r_w és r_{skin} közti véges differenciaként adható meg:

$$Skin = \left(\frac{T}{T_{skin}} - 1 \right) \ln \left(\frac{r_{skin}}{r_w} \right). \quad (31)$$

A legtöbb esetben a Skin pozitív érték. A felületi koefficiens egyenlő 0-val vagy negatív ha T_{skin} egyenlő vagy nagyobb, mint T . A depresszió pozitív vagy negatív értéke is meghatározható (ds_{skin}), amelyet a felületi hatás okoz. Számítása:

$$ds_{skin} = \frac{Q}{2\pi T} \cdot Skin. \quad (32)$$

Az 1, 2, 3 és 4. tesztek esetében egyenlő hozam mellett ($Q=0,1 \text{ m}^3/s$) eltérő szűrőrendszerek hatásai kerültek vizsgálatra az 5 rétegű modellben.

Az 1. esetben mindössze egy rétegben történik szűrőzés (**23. ábra**). Ez a rendszer így 5 lehetséges megoldást foglal magában az 1. rétegben alkalmazott szűréstől az alsó (5.) rétegben alkalmazott szűrőzésig. (A szűrőzés ebben a rendszerben az 5 réteg közül bármelyikben történhet 1-5.) A 2. tesztben a 2., 3. és 4. rétegben történt a kút szűrőzése,

míg a 3. tesztnél az 1. 3. és 5. réteg lett megcsapolva. Végül a 4. tesztnél az összes (5) rétegben egyidejűleg történt szűrőzés.

Konikow és társai (2009) a részlegesen szűrőzött kutakról részletes tanulmányt mutattak be. Kimutatták, hogy a MODFLOW általi depresszió szimulációja megfelelő pontossággal meghatározható. Eredményeiket grafikus formában ismertették. Esetemben összehasonlító vizsgálatot mutatok be a kútban jellemző időben állandó depresszióra és az áramlás mértékének eredményeként számított szűrők hozamának %-ára vonatkozóan, ahol az adatokat az **2. táblázat** összesíti.

2. táblázat A különböző teszteknel kapott eredmények.

Teszt	Szűrőzött rétegek	Adatok	3D_A analitikus eredmények	3D_B analitikus eredmények (referencia adat)	MODFLOW (numerikus eredmények)	FLOW (numerikus eredmények)
1.	1 vagy 5	s (m)	40.648	39.986	42.087	42.030
	2 vagy 4		36.608	35.822	39.274	39.212
	3		36.275	35.486	38.950	38.887
2.	2-3-4	s (m)	16.409	16.253	16.730	16.730
		Q (%) 2 & 4	34.578	34.577	34.872	34.001
		Q (%) 3	30.843	30.846	30.245	31.999
3.	1-3-5	s (m)	15.724	15.507	16.305	16.304
		Q (%) 1 & 5	32.284	32.223	32.071	32.727
		Q (%) 3	35.432	35.554	35.855	34.547
4.	1-2-3-4-5	s (m)	12.053		12.052	12.053

A 4. és 5. oszlop mutatja az analitikus számítási eredményeket. A 3D_A modellezés eredményeinél a szűrők egyenként 1, míg a 3D-B-nél 80 egységre lettek osztva. Az utóbbi esetben ez a fajta szegmensekre történő felosztás a szűrők mentén nagyon részletes fluxus eloszlást tesz lehetővé, melynek hatására „valós” rendszerként viselkedik a teszt probléma, és referenciaként használható fel. Az utolsó két oszlopban a MODFLOW és FLOW szimulációk numerikusan nyert eredményei láthatók végső depressziókkal és a számított fluxus magasabb eltéréssel (Szucs et al., 2013).

A 4. teszt adatai (teljes hosszban szűrőzött kútban) jó illeszkedést mutatnak a depresszió adatokhoz. A három modell eredménye a szűrő beáramlásra vonatkozóan általánosan $Q(\%) = 20$ ebben a tesztben. A többi teszt esetében a numerikus módszerek szűk túlbecslést adnak a kút depressziós adataira. A $Q\%$ -os értékének vizsgálata során kimutatható, hogy a 3D-B áramlások (referencia adat) a numerikus megoldások között foglalnak helyet.

A kút környezetében az áramlási veszteségek jellemezése a „Skin” paraméter használható. Így a „Skin” paraméterek helyes meghatározása a modellben lehetővé teszi

a 3D-B és numerikus szimulációk közötti eltérések csökkentését (megszüntetését). A **3. táblázat** mutatja a „Skin” meghatározásának eredményeit (Szucs *et al.*, 2013.).

Az 1. tesztben a szeparált víztartóknak a „Skin” adatait előzőleg elvégzett számítások alapján adtuk meg, felhasználva a 32. összefüggést, ahol $d_{s_{skin}} = s_{analitikus} - s_{numerikus}$. A 2. és 3. tesztben a „Skin” adat manuálisan (MODFLOW) vagy automatikusan (FLOW) került meghatározásra. A Q%-os adat a feltételezett értékhez illesztése vagy a terepi (áramlási mérés) mérési eredményekhez való rendelése nagy jelentőséggel bír a több szinten szűrőzött kutak transzport modellezésének helyes elvégzése során (Konikow *et al.*, 2009).

3. táblázat A szükséges Skin paraméterek, hogy illeszkedjenek a numerikus s (m) és Q (%) adatok az analitikus modellel (3D-B).

Teszt	Szűrőzött rétegek	Skin [-]	
		MODFLOW	FLOW
1	1 vagy 5	-0.2641	-0.3534
	2 vagy 4	-0.4337	-0.5466
	3	-0.4352	-0.5479
2	2 és 4	-0.1065	-0.2374
	3	0.10624	0.0412
3	1 és 5	0.101	-0.3358
	3	-0.0966	-0.5252

1. tézis Szimulációs vizsgálatok segítségével bebizonyítottam, hogy a MODFLOW programhoz kapcsolódó MNW moduljának alkalmazásával a több szinten szűrőzött kutak hidraulikai sajátosságai elfogadható pontossággal írhatóak le még bonyolult vízföldtani szituációk esetében is. A több szinten szűrőzött kutak hidraulikai viselkedésének pontosításával megbízhatóbban szimulálhatóak a szennyeződés-terjedési és kármentesítési folyamatok. A vizsgálati eredmények alapján az alábbi megállapításokat teszem:

- A DNAPL típusú szennyezőanyagok transzport folyamatainak a szimulációjához a numerikus MODFLOW MNW és FLOW csomagok elfogadható és pontos szimulációs lehetőséget adnak, még komplex hidrogeológiai szimulációs probléma esetében történő, többretegű vízadó jelenléte mellett is.
- Az összehasonlító vizsgálataimmal megmutattam, hogy az áramlási veszteségeket jellemző SKIN paraméter megfelelő beállításával a hidrodinamikai szimulációk pontosítása jelentős mértékben növelhető.

Optimális esetben a legjobb közelítést adó analitikus megoldás eredményei gyakorlatilag elérhetők.

- A több szinten szűrőzött kutak vizsgálatát elvégeztük valós, időben változó esettanulmányon is (Szucs *et al.*, 2013.). A szimulációs eredmények alapján megállítható, hogy a szivattyúzást követő rövid távú hatásokat a vízszint változások tekintetében nem pontosan tudja az MNW modul leírni, de ha a próbaszivattyúzás hossza 1.5 óránál több akkor megbízható eredményeket ad.

6.3.2. Gátak, töltések vizsgálata speciális szennyezőanyagok (pl. zagyártározók) tárolásánál, végeelemes numerikus módszert alkalmazó modul segítségével

A végeelem módszert alkalmazó SEEP2D modul segítségével olyan hidraulikai problémát vizsgáltam, amelynél nagyon fontos az adott geometria elemekkel történő pontos kitöltése. A modellezéshez egy fiktív gát adatait, illetve előző munkáimból kapott eredményeket használtam fel arra, hogy megvizsgáljam a víznél sűrűbb szennyezőanyagok (pl. zagyok), hogyan befolyásolják a gáttestben a hidraulikai viszonyokat. Először a tározó gátjának hidrodinamikai szimulációját mutatom be vízre, majd másodsor víznél sűrűbb szennyezőanyagra végzek vizsgálatokat.

A zagy-, továbbá víztározók gátjainak és árvízvédelmi töltések numerikus modellezésére alkalmazható a SEEP2D modul, amely mind nyílttükrű, mind zárttükrű 2 dimenziós szivárgási (hidraulikai) problémák megoldására használható. A programmal kiszámítható a gáttesten átszivárgó fajlagos hozam, a vízszint alakulása és az áramvonalak a gáttesten belül, a síkszivárgás potenciál vonalai, valamint a sebesség vektorok. Az így kapott eredményeket felhasználhatjuk a program UTEXAS moduljában, ahol gátakra vonatkozóan különböző geotechnikai vizsgálatok elvégzésére nyílik lehetőség. A SEEP2D alkalmas ezen kívül, a gátak hiányzó szivárgáshidraulikai paramétereinek meghatározására is, amelyet a következőkben fogok bemutatni.

Két különböző megoldási lehetőség kínálkozik a programban a nyílttükrű szivárgási problémák megoldására:

1. Az egyik lehetőség, amikor a megoldást mindössze a telített zónára számítjuk, és az elemes rácsháló torzítva van a legfelső szivárgási felületig. A kiszámított megoldás ezután végül egy hálógeometriai és egy megoldás fájlból tevődnek össze.
2. A második esetben a háló nem deformált, és az áramlás alakja mellett a telített és a telítetlen zóna rácshálója is modellezhető.

A továbbiakban csak a második esett nyújtotta megoldási lehetőséggel foglalkoztam.

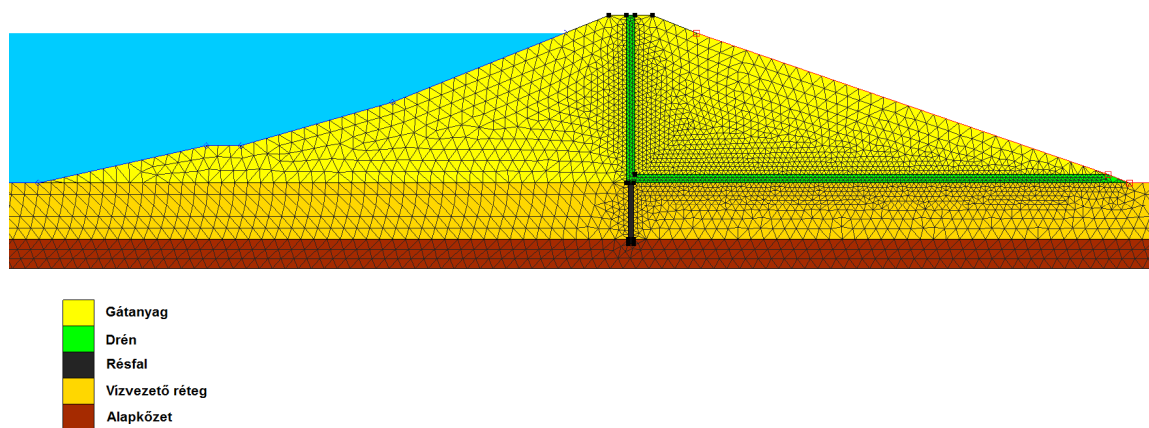
A SEEP2D modul alkalmazhatóságának a bemutatására a következő esettanulmányt mutatom be.

A fiktív gát vizsgálata a SEEP2D modul alkalmazásával

A völgyzárógát egyenes tengelyű földgát. A 250 m hosszú gát legnagyobb magassága 19.3 m legnagyobb talpszélessége 126 m, a gátkorona szélessége 5m. A gát a vízoldalon 192.88 mBf-ig 1:2.5 rézsúvel, ezután 187.88 mBf-ig 1:3.5 rézsúvel, egy 4 m széles padkával, végül 1:8 rézsúfelülettel éri el az építéskori terepszintet. A szárazoldalon 1:2.5 rézsú vezet a terepszintig (Zákányi, Szűcs, 2010).

A gát építésére kijelölt völgyszakasz alapkőzetét karbonkori szürke, fekete agyagpala képzí. Az agyagpala a völgyfenéken közel vízszintes, a déli bekötési oldalon északi irányba lejt, a tereppel közel párhuzamos lefutással. Az agyagpala felső része több deciméter vastagságban repedezett, mállott állapotú. Függőleges szivárgási tényezője $k=10^{-7}$ m/s. Vízszintes rétegei mentén a tényező egy nagyságrenddel nagyobb. A völgyfenéken az alapkőzetet üledék borítja, az alsó rétegben összefüggő vízvezető réteg fekszik, ezt felülről összefüggő kötött fedőréteg takarja. A vízvezető réteg átlagos vastagsága 2.3-2.5 m. A felépítése ingen változatos, vízvezető képessége $k=10^{-3}$ m/s. A réteg feltehetően járatos és így a k tényező változhat (Zákányi, 2006).

A völgyzárógát szerkezetét tekintve homogén földgát, melynek építéséhez a gáttól északra létesített bányából származó agyag (egyéb adat erről nem áll rendelkezésre) szolgált. A gátkorona szárazoldali éle alatt 1 m szélességű függőleges kavicsszivárgó, az alján beton gyűjtőcsővel épült. A függőleges kavicsszivárgó a gáttestet kettéválasztja, és összegyűjti a gát vízfelőli részén átszivárgó vizet. Ezzel megakadályozza a szárazoldali rész átnedvesedését. A gáttest alatti vízvezető réteg lezárása vízzáró betonfallal történt (25. ábra). Az átlagosan 7.1 m mély fal vastagsága 0.6 m, és az alapkőzetbe 0.5 m mélyen köt be (Zákányi, Nyiri, 2011).



25. ábra A fiktív gát szerkezete az elemekkel.

Azonban a gáttestre vonatkozó konkrét szivárgás hidraulikai adatok (pl. szivárgási tényező), ennek az esetnek a szimulációja során nem álltak a rendelkezésemre. Mindössze annyi információ volt, hogy a töltéstest anyaga a gáttól É-ra található bányából származó agyagból készült. A gáttesten átszivárgó mért vízhozamok alapján lehetőségem nyílt a gát szivárgási tényezőjének meghatározására. „Trial and error” módszer alkalmazásával határoztam meg a legjobb kalibrációs eredményt mutató, gátra jellemző szivárgási tényező értéket.

Az első k tényező értékre a program segítségével meghatároztam a q (fajlagos hozam) értéket, majd ezt megszoroztam a gát teljes hosszával (250 m), így megkaptam a gáton átszivárgó hozamot, a Q -t (egy napra vonatkozó hozam). A kapott hozam eredményt a **3. mellékletben** általam meghatározott trendvonalhoz viszonyítottam (értéke $Q_h=49.89$ [m³/d]). Ezeket a lépéseket addig folytattam amíg, vissza nem kaptam $Q_h=49.89$ [m³/d] értéket. Az általam felvett és számított értékeket a következő **4. táblázat** szemlélteti (Zákányi, Szűcs, 2010).

A kapott eredménnyel sikerült a gát anyagára jellemző szivárgási tényező értéket meghatározni. Természetesen a modul segítségével megadható a gáttesten átszivárgó víz fajlagos hozama, a vízszint alakulása és az áramvonalak a gáttesten belül, a síkszivárgás potenciál vonalai, valamint a sebesség vektorok is. A dolgozat ábrákkal történő túlterhelésének elkerülése végett ezeket nem mutatom be, csak eredményeket közlök.

4. táblázat A szivárgási tényezők (k) az egyes esetekben, a modellezéssel kapott fajlagos hozam és hozam értékek eredményei.

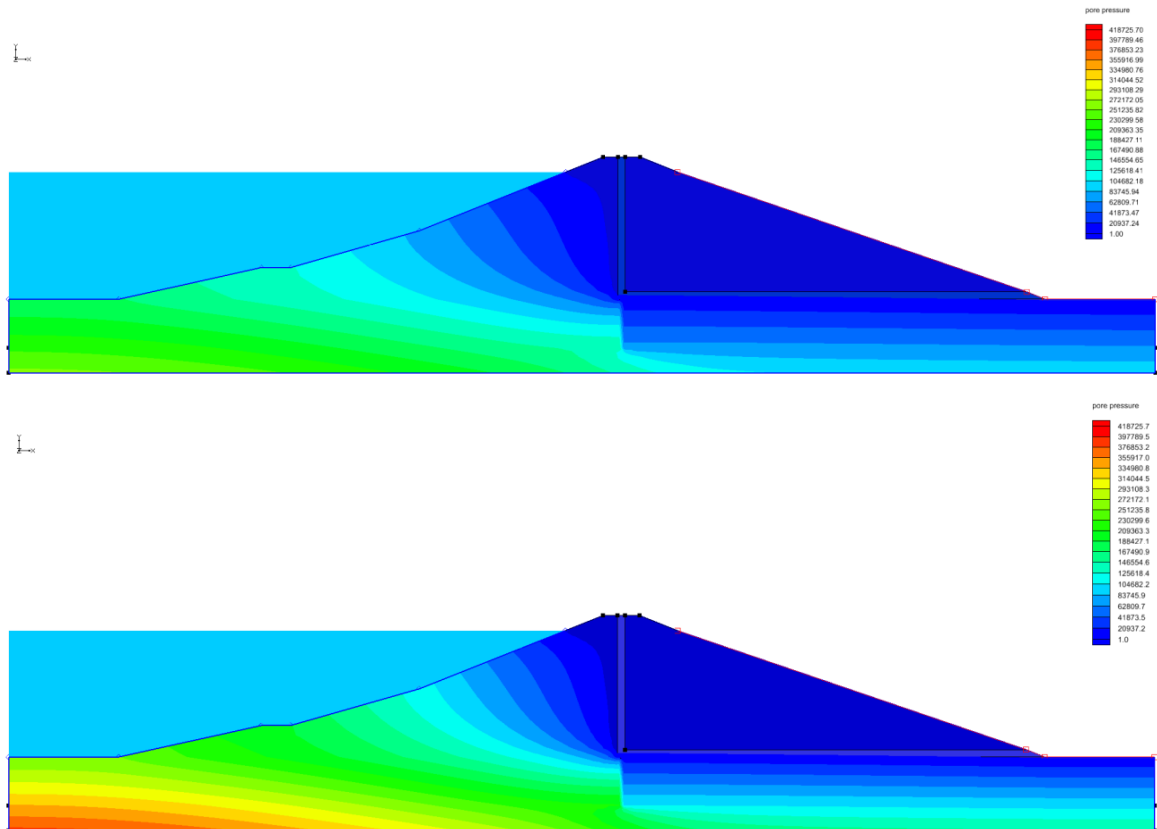
Anyag neve	k (m/d)
Agyag (1. eset)	0.00086
Agyag (2. eset)	0.0864
Agyag (3. eset)	0.0764

	q (m ³ /m·d)	Q (m ³ /d)
1. eset	0.0023	0.575
2. eset	0.2257	56.425
3. eset	0.1996	49.9

Elvégeztem a szimulációt, olyan esetre is, amikor a tározott anyag nem víz, hanem attól sűrűbb szennyezőanyag. A következőkben a kapott szimulációs eredményeket mutatom be.

A víznél sűrűbb anyag ($\rho=1.46$ g/cm³) és a vizes ($\rho_v=1$ g/cm³) szimuláció eredményei között legnagyobb különbség a pórus víznyomásban adódott. Hátránya a

modulnak, hogy nem képes az időbeli változásokat szimulálni, hanem csak egy állandósult esetet (steady state) (pl. egy vízszintet) modellez és így csak a vég állapotokat tudjuk összehasonlítani. A két anyag szimulációja között, ahogy már említettem, a pórus víznyomásban adódik nagyobb különbség (**26. ábra**).



26. ábra A felső ábrán a víz esetében, míg az alsón egy víznél sűrűbb anyag esetében kialakuló pórus víznyomás eloszlása a gáttesten belül.

Természetesen hidraulikai szempontból fontos eredményekhez jutottunk, amiket ezek után fel tudunk használni az Utextas modulban. Itt lehetőség van geotechnikai szempögből vizsgálni a gátakat (pl. állékonyság vizsgálatok).

A víz szimuláció során a gáttestben kialakult maximális pórusvíz nyomás értéke $u_{\max(\text{víz})}=256731.19$ Pa, míg a víznél sűrűbb anyagnál ez az érték $u_{\max(\text{DNAPL})}=418725.7$ Pa adódik. Kiszámítható, hogy a pórus víznyomás a víznél kapott eredményeknek kicsit több mint 1.5 szeresére adódik a víznél sűrűbb anyag esetében.

2. tézis Esettanulmányokon keresztül bebizonyítottam, hogy a SEEP2D modul hatékonyan alkalmazható speciális szennyezőanyagok tárolására alkalmas tározók gátjának, töltésének hidrodinamikai vizsgálatára. A SEEP2D modul lehetővé teszi a víznél nagyobb sűrűségű fluidumok gátszivárgási mechanizmusának leírását is. A kapott új eredményekkel kapcsolatban tett megállapításaim a következők:

- Trial and error kalibrációs módszer alkalmazásával bemutattam, hogy gátak, töltések szivárgási tényező értéke meghatározható, amennyiben a gáton, töltésen átszivárgó hozamot megfelelő rendszerességgel és pontossággal mérik.
- Megmutattam, hogy a víznél nagyobb sűrűségű szennyezőanyagok gáttal történő visszatartása is modellezhető a SEEP2D modullal (pl. a jól ismert Ajkai vörösiszap-tározó gátjának vizsgálatánál is segítséget nyújthatott volna ez a módszer, kiegészítve az altalaj paramétereivel).

7. Lehetőségek a DNAPL transzport szimulációk megbízhatóságának növelésében

7.1. Agyag lencsék visszatartási határfokának meghatározása

7.1.1. Vízzintes fekü esete

Az eddigiekben többször kiemelttem a szennyezet területek feltártságának és a földtani kép pontos ismeretének fontosságát a DNAPL típusú szennyezőanyagok esetében. Ismert ugyanis, hogy a különböző kőzet típusok eltérő mértékben képesek a speciális szennyezőanyagokat visszatartani/megkötni. Éppen, ezért rendkívüli jelentőséggel bír az általunk vizsgálni kívánt terület földtani felépítésének pontos megismerése, hogy ezáltal a modellben, a valósághoz leginkább közelítő képet határozhassunk meg. Ennek a kérdéskörnek a kapcsán *Reynolds és Kueper (2001)* vizsgálták, hogy repedezett kőzetekben homok és agyag lencsék mennyire tartják vissza a víznél sűrűbb önálló fázisú szennyeződések vertikalís irányban. Ezzel szemben az általam végzett, ebben a fejezetben ismertetett vizsgálataim során, a már a vízzáró réteggig eljutott önálló fázisú szennyezőanyag vízszintes irányú mozgását tanulmányoztam homogén anizotróp, telített, nyílttükrű vízádóban különböző vastagságú agyag kiemelkedések (lencsék) jelenléte mellett. Megvizsgáltam azt, hogy egy pár cm vastag agyag réteg jelenléte, hogyan befolyásolja az önálló DNAPL fázisú szennyezőanyagok mozgását a felszín alatti közegben horizontális irányban.

Az ilyen típusú szennyeződés terjedési szimulációk megvalósításához a GMS program UTCHEM modulja jelentheti az egyik legjobb megoldást. Hiszen ez a modul alkalmas a többfázisú rendszerekben lejátszódó transzport-folyamatok modellezésére. Egy felszíni DNAPL szennyezést feltételező szimuláció során használt rácsháló adatait a következő **27. ábra** mutatja be. A felvett rácsháló adatainak megválasztása előzetes modellezési vizsgálatok alapján történt.

A modell terület paraméterei:

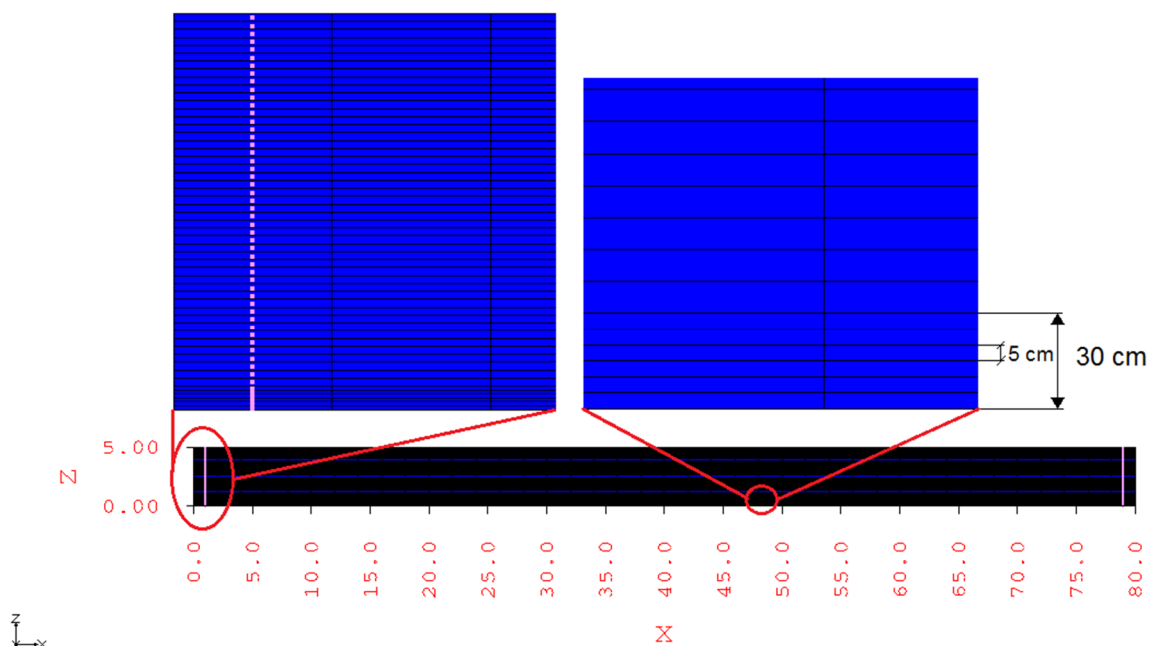
- a bal alsó sarok koordinátái: 0 m; 0 m
- a jobb felső sarok koordinátái: 80 m; 5 m.

A nyílttükrű szimulációs modell a következő paraméterekkel rendelkezik:

- kezdeti vízszint: 5 m,
- szivárgási tényező: $k_{\text{vízádó}}=0.0005$ m/s, $k_{\text{agyag}}=10^{-8}$ m/s,
- horizontális és vertikális anizotrópia: 1.2,
- áramlási irány: bal oldalról a jobb oldal felé, 0.001 hidraulikus gradienssel,
- porozitás: $n_{\text{vízádó}}=0.3$, $n_{\text{agyag}}=0.4$.

A hálórendszer amelyet az UTCHEM modulban alkalmaztam:

- 53 sor (eredetileg 50 volt az alsó három sort viszont tovább osztottam annak érdekében, hogy 5 cm-es agyag kibukkanásokat szimulálni tudjak), 40 oszlop
- cellák száma: 2120.



27. ábra Az agyag kibukkanások DNAPL szennyezőkre gyakorolt hatásának vizsgálatához használt rácsháló.

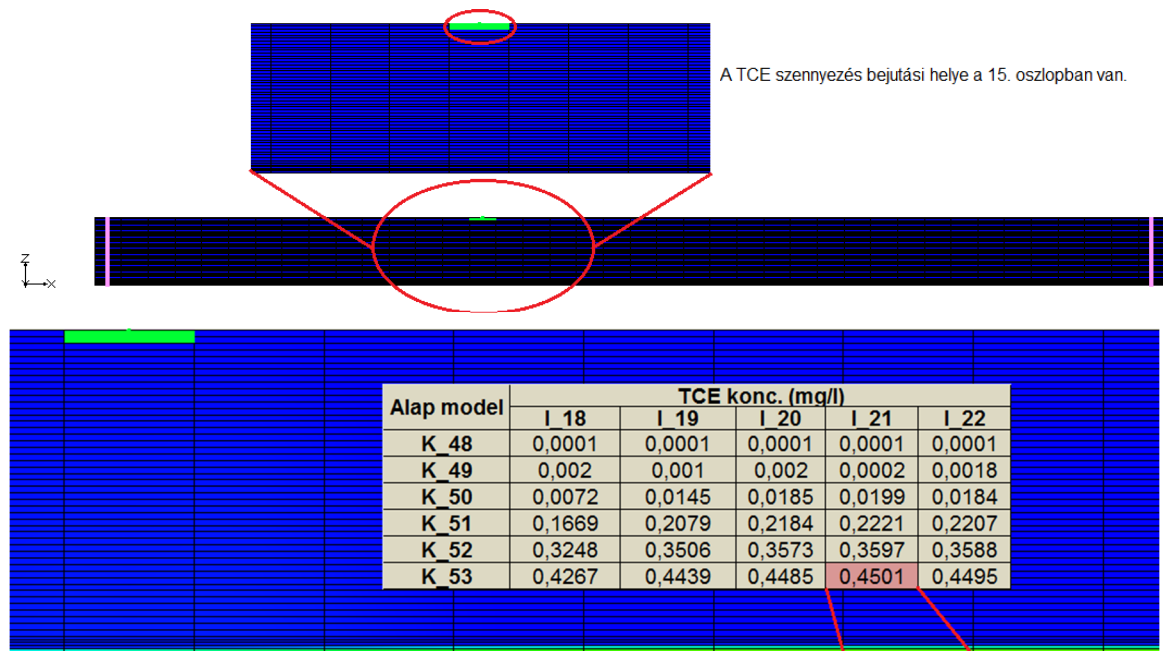
A szennyezőanyag ennél a szimulációnál triklór-etilén (TCE), amely az egyik leggyakrabban előforduló klórozott szénhidrogén szennyező Magyarországon. A TCE transzportmodellezéséhez szükséges bemenő paraméterek nagy részét az irodalmi adatokból általam összegyűjtött **1. melléklet** alapján adtam meg. Azokat az adatokat, amelyek még szükségesek voltak ahhoz, hogy a valóságot megközelítő modellezést készítsek *Dane és szerzőtársai (1994)* által végzett kutatási eredményekből vettem át.

A szimuláció során a szennyezőanyag $0.1 \text{ m}^3/\text{nap}$ hozammal 10 napon keresztül jut be a modellezett területre, 1 mg/l koncentrációval. A modellezés időtartama a bejutás után 180 nap. A kút elhelyezkedését és a kezdeti szennyezőanyag csóva alakját a **28. ábra** szemlélteti.

Az **29. és 30. ábrákon** a szennyezőanyag visszatartás mértékének meghatározása során kapott eredményeket mutatom be a modellezési idő végén.

Az eredmények elemzése kapcsán arra a következtetésre jutottam, hogy célszerű lenne számszerűsíteni a szennyezőanyag agyag lencsék általi visszatartásának mértékét. Ennek érdekében bevezettem az agyag kiemelkedés visszatartási határfokát. Kiválasztottam egy bázis pontot/cellát (21. oszlop 53. sor), amely az agyag lencse után helyezkedik el (*lásd 28. ábrán piros cella*). - Azért ezt a cellát választottam, mert a szimulációk során ebben volt legnagyobb a szennyezőanyag koncentráció. - Ennek a

modellezés során kapott koncentráció értékét $C_{TCE(0 \text{ cm})}$ vettem alapul, majd megvizsgáltam, hogy ehhez az értékhez képest a különböző szimulációs esetekben mekkora TCE koncentráció kapcsolódik ugyanebben a cellában ($C_{TCE(i \text{ cm})}$).



28. ábra A teljes modellben a szennyezőanyag bejutási pontja és az alap eset modellezési eredménye (K az sorok számát mutatja a rácshálóban, I pedig az oszlopok számát).

Az adatok alapján az agyag kiemelkedés visszatartási foka oly módon határozható meg, hogy az adott cellában kapott koncentráció értékét osztjuk a bázisként megjelölt értékkel (TCE koncentráció 0.4501 mg/l), majd szorozzuk százzal, így százalékos viszonyt kapunk. Fontos szempont hogy ezt az értékét 100-ból kivonjuk, amennyiben nem tesszük, úgy az agyaglencsén átjutó szennyezőanyag mennyiségét kapjuk, nem pedig a visszatartást jellemezzük. Az előbbieket alapján a 33. egyenlet segítségével számítottam az agyag lencsék visszatartási fokát (μ).

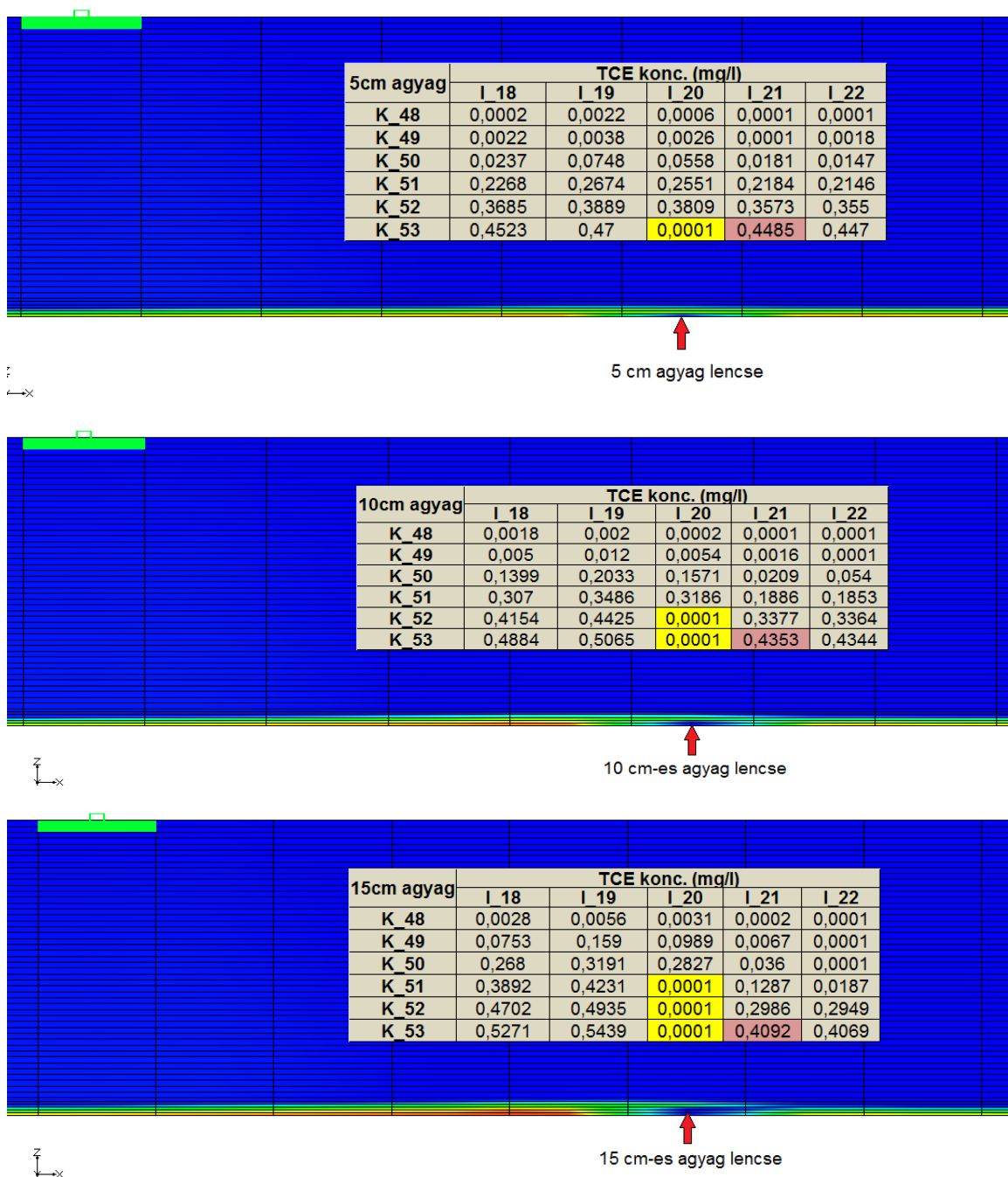
$$\mu = 100 - \left(\frac{C_{TCE(i \text{ cm})}}{C_{TCE(0 \text{ cm})}} \cdot 100 \right), \quad (33)$$

ahol

μ - agyag kiemelkedés visszatartási foka,

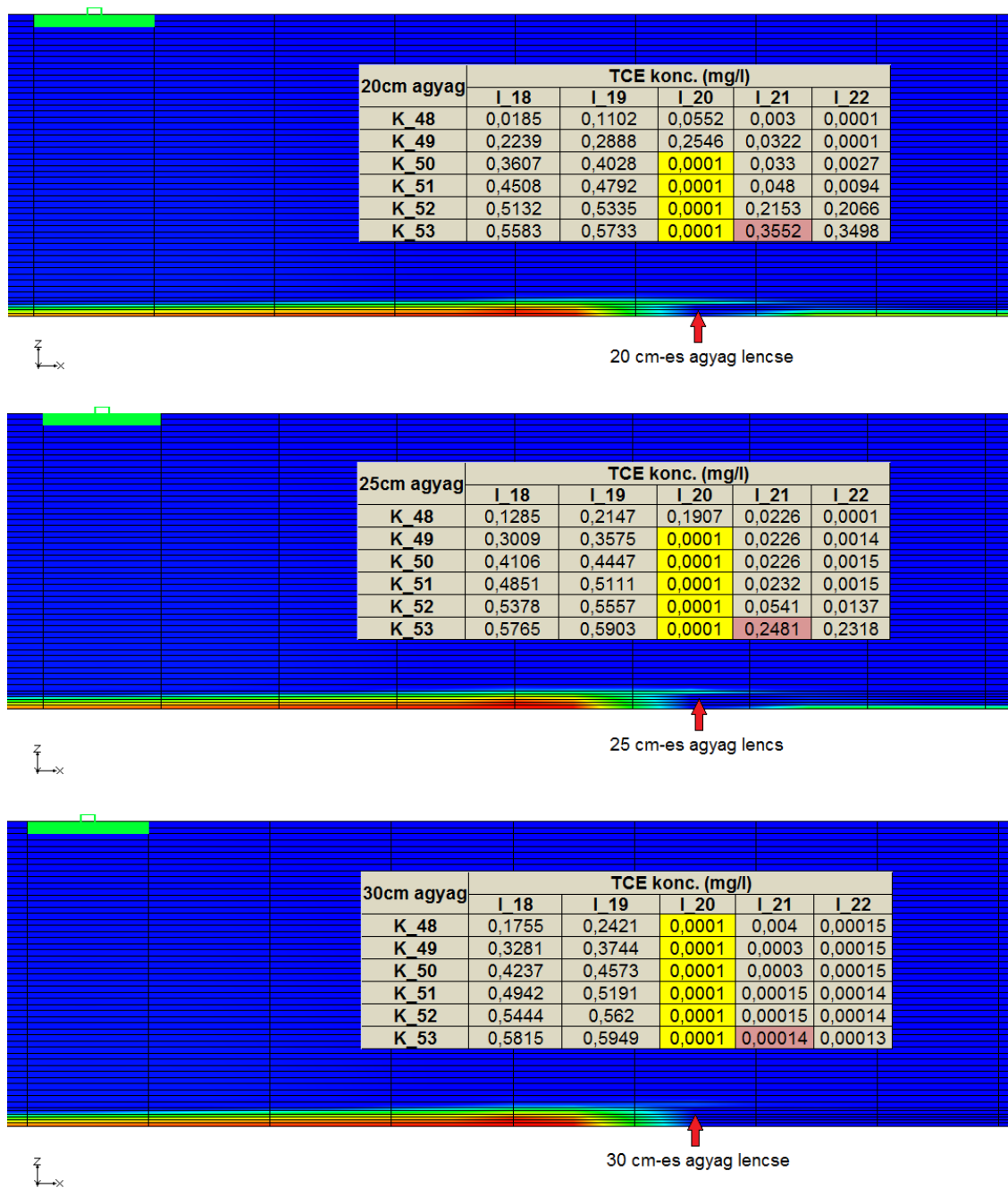
$C_{TCE(i \text{ cm})}$ – a szennyező anyag koncentrációja az i cm vastag agyag kiemelkedés esetében,

$C_{TCE(0 \text{ cm})}$ – az alap esetben kapott TCE koncentráció.



29. ábra Az 5, 10, és 15 cm-es agyag lencse (kiemelkedés) elhelyezkedése, a visszatartás mértéke, és a kialakult TCE koncentrációk a lencse közelében 180 nap elteltével.

Az **5. táblázatban** feltüntettem a különböző szimulációkhoz tartozó visszatartási fokokat. Jól látszik a táblázatból és a **30. ábrából**, hogy a 30 cm-es agyag lencse esetén a visszatartás mértéke majdnem 100%. Így további szimulációkat végeztem annak érdekében, hogy szemléltessem a koncentráció értékének változását a szimulációs idő növelésével (+90 és +180 nappal). A modellezések eredményeként arra a megfigyelésre jutottam, hogy a TCE koncentrációja az agyag kiemelkedés mögötti bázispontban nem változik.

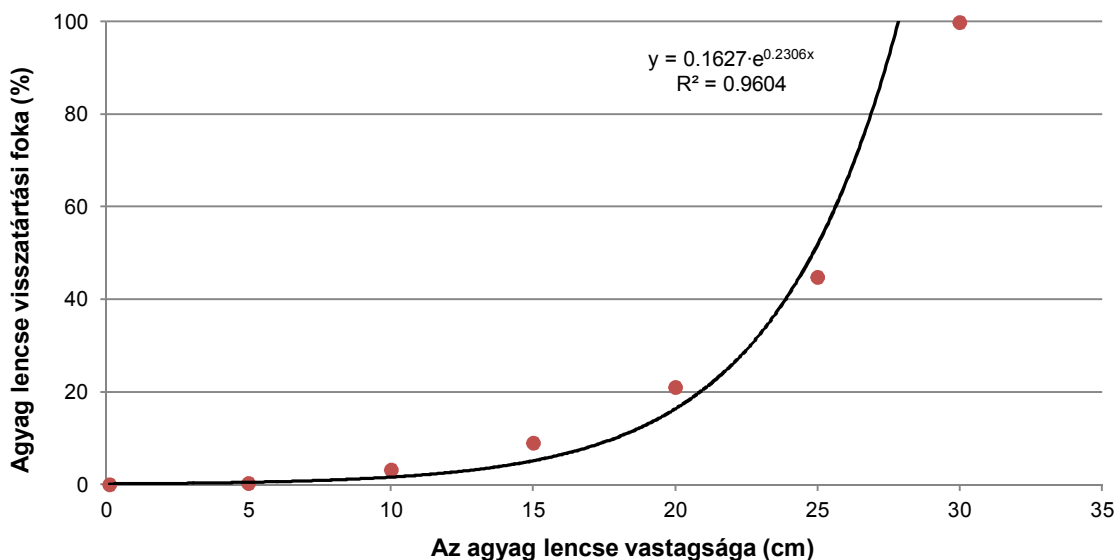


30. ábra A 20, 25, és 30 cm-es agyag lencse elhelyezkedése, visszatartás mértéke és a kialakult TCE koncentrációk a lencse közelében 180 nap elteltével.

5. táblázat A különböző szimulációs esetekhez számolt visszatartási fokok 180 nap elteltével.

Agyag lencse vastagság (cm)	Agyag lencse visszatartási foka (%)
0	0
5	0.36
10	3.29
15	9.09
20	21.08
25	44.88
30	99.97

A **31. ábrán** a kapott eredményeket grafikusán is megjelenítettem és a pontokra trendvonalakat próbáltam illeszteni. A kapott visszatartási fokokra a legjobb illeszkedést biztosító exponenciális egyenletet illesztettem, amelynek illesztési hibája elhanyagolhatónak tekinthető.



31. ábra Az agyag lencse vastagságának változásával a szennyezőanyag visszatartási hatásfoka.

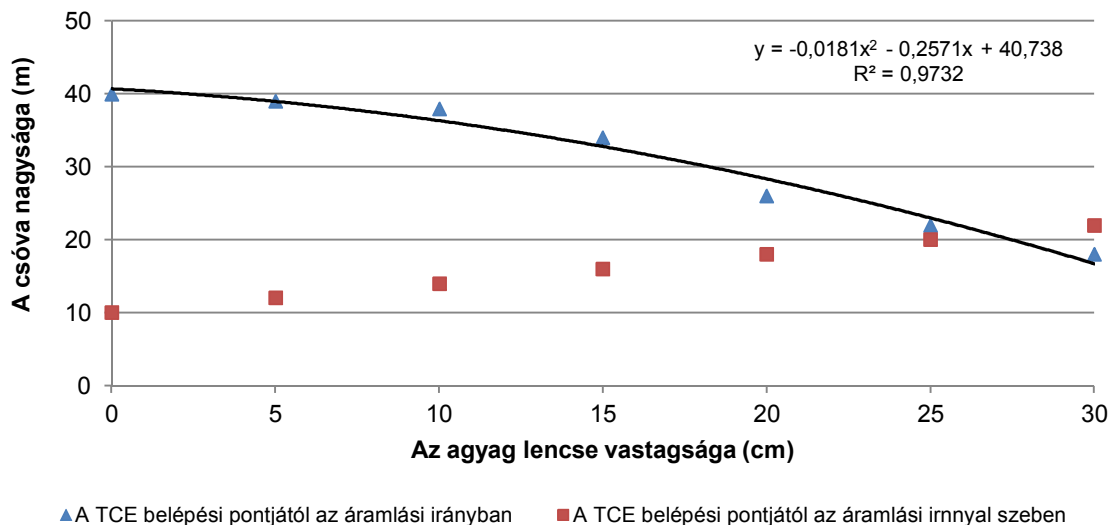
A szimulációs eredmények alapján megvizsgáltam azt is, hogyan változik az önálló fázisú TCE szennyezőanyag csóva az áramlás irányában és azzal ellentétesen, attól függően mekkora az agyag lencse vastagsága. A **6. táblázatban** és a **32. ábrán** ezeket mutatom be.

6. táblázat A TCE csóva szétterülésének változása az agyaglencse méretének növekedésével.

Agyag lencse vastagsága (cm)	Csóva nagysága a TCE belépési helyétől (m)	Csóva nagysága az áramlási iránnyal szemben a TCE belépési helyétől (m)
0	40	10
5	39	12
10	38	14
15	34	16
20	26	18
25	22	20
30	18	22

A TCE csóva nagyság csökken az áramlási irányban a szennyezőanyag belépési pontjától számítva, és másodfokú polinomiális trendet követ. Elvégeztem exponenciális trendvonal felvételét is, de ez esetben az R^2 értéke rosszabbra adódott ($R^2=0.9153$), ezért

választottam a másodfokú illesztést. Az áramlási iránnyal szemben lineárisan növekszik a csóva mérete.



32. ábra A csóva nagyságának változása az agyaglencse magasságának függvényében az áramlási iránnyal és azzal szemben.

3. tézis. A vizsgálataim során a speciális szennyeződések agyaglencsék általi visszatartásának határfokát modelleztem az UTCHEM modullal vízszintes réteg fekvésénél. Kimutattam, hogy a DNAPL típusú szennyező anyagok felszín alatti transzport-folyamatainak szimulációja esetében rendkívüli jelentőséggel bír a földtani felépítés pontos ismerete és annak a modellben való szerepeltetése. Szimulációk segítségével bebizonyítottam, hogy a fekvőből kiemelkedő 30 cm vastag agyag lencse a vizsgált mennyiségű (1 m³) önálló fázisú szennyezőanyag közel 100%-át képes visszatartani. A kapott szimulációs eredmények alapján a következő megállapításokat teszem:

- Az agyaglencsék speciális szennyeződésekkel kapcsolatos visszatartási határfokát homogén anizotróp közegben exponenciális egyenlettel közelítettem.
- Vizsgálataim alapján összefüggést állapítottam meg a szennyeződés visszatartásában szerepet játszó agyaglencse vastagsága és az agyaglencsén túli csóva méret között.

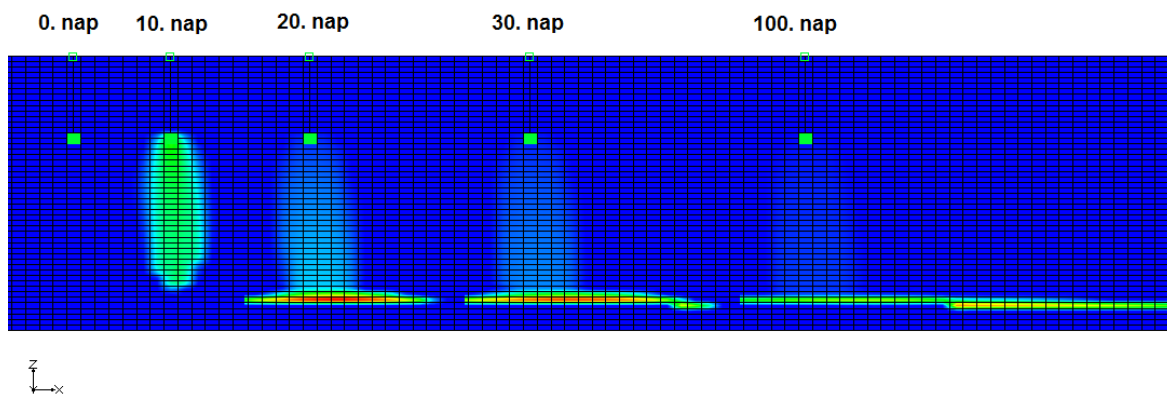
7.1.2. Ferde fekvésű eset

A valóságban, sok esetben a vízszintestől eltérő a fekvés dőlése, ezért célszerű a fenti esethez kapcsolódóan vizsgálni, hogy a ferde fekvésű (1°-os, 3°-os és 5°-os) jelenléte hogyan befolyásolja a TCE csóva nagyságát, mozgásának sebességét, koncentráció eloszlását. Ezért, az alábbi fejezetben az agyag lencsék vastagságának a speciális szennyezőanyagok transzport-folyamataira gyakorolt hatását határoztam meg.

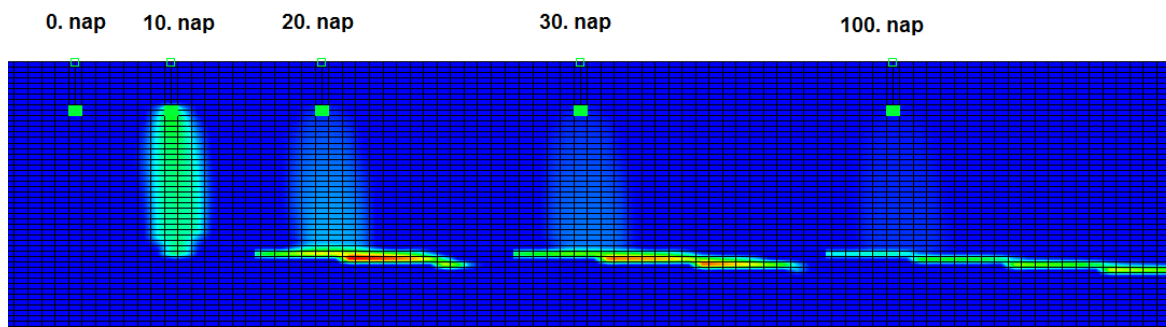
Kiindulásként az előző fejezetben bemutatott modellt vettem alapul, melynek paramétereit közül néhányat megváltoztattam, ezek a következők:

- a modell terület paramétereit:
 - a bal alsó sarok koordinátái: 0 m; 0 m
 - a jobb felső sarok koordinátái: 60 m; 10 m.
- a nyílttükrű szimulációs modell a következő paraméterekkel rendelkezik:
 - kezdeti vízszint: 10 m,
 - szivárgási tényező: $k_{\text{vízadó}}=0.00001$ m/s, $k_{\text{agyag}}=10^{-8}$ m/s,
 - horizontális és vertikális anizotrópia: 1.2,
 - áramlási irány: bal oldalról a jobb oldal felé, 0.001 hidraulikus gradienssel,
 - porozitás: $n_{\text{vízadó}}=0.3$, $n_{\text{agyag}}=0.4$.
- a hálórendszer méretei:
 - 50, majd később 56 sor annak érdekében, hogy az 5 cm-es agyag vastagságokat is szimulálni tudjam, 120 oszlop
 - cellák száma: 6000, illetve 6720.

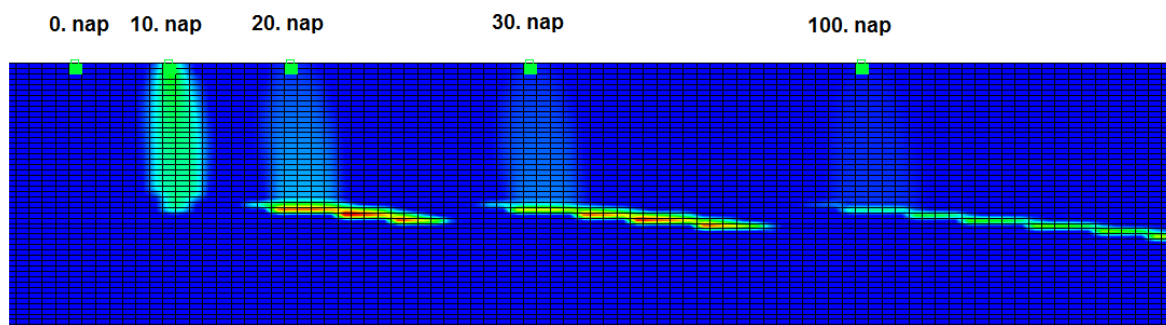
A szimuláció során a szennyezőanyag (TCE) mennyisége, bejutási ideje koncentrációja megegyezik a vízszintes fekvésű esetben alkalmazottakkal (0.1 m³/nap, 10 napon keresztül, 1 mg/l koncentrációban). A szennyezőanyag tulajdonságait az **1. mellékletből**, Dane és szerzőtársai (1994) illetve Putzlocher és szerzőtársai (2006) által írt cikkekből vettem át. A modellezés időtartama a bejutás után ebben az esetben 360 nap. A szennyezés bejutását kúttal szimuláltam, ennek elhelyezkedését úgy alakítottam ki, hogy az 1, 3, és 5°-os fekvésű szimulációja során is, azonos magasságból történjen a TCE beszivárgása, és így összehasonlíthatók legyenek a modellezések. A következő **33-35. ábrák** az agyag záró réteg meredekségének függvényében mutatják a TCE szennyezőanyag csóvát különböző szimulációs időpontokban (0., 10., 20., 30. és 100. napon).



33. ábra Az 1°-os dőlésű agyag záró réteg esetében a TCE szennyező csóva alakulása különböző időpontokban.



34. ábra A 3°-os dőlésű agyag feké esetében a szennyezőanyag transzport-folyamat vizualizációja különböző időpontokban.



35. ábra Az 5°-os dőlésű agyag feké esetében az önálló TCE fázis transzport-folyamata különböző időpontokban.

A modellezések elvégzése után összehasonlítottam a maximális TCE koncentrációt, a csóva nagyságát a belépési ponttól a 370. napon (modell futtatások végén) az áramlási irányban és azzal szemben. Ezek eredményeit a **7. táblázat** mutatja.

7. táblázat A különböző dőlésű vízzáró rétegek esetében a koncentráció, és a csóva nagyság változása.

Agyag záró réteg dőlése	A fellépő maximális TCE koncentráció (mg/l)	Csóva nagysága az áramlási irányban (m)	Csóva nagysága az áramlási iránnyal szemben (m)
1°	0.4334	30.5	7.5
3°	0.4808	36.6	3.5
5°	0.4754	39.7	1.5

A táblázat adatai alapján megfigyelhető, hogy a TCE koncentrációja 3° és 5° esetében közel megegyeznek egymással, amely a véges differencia numerikus módszer egyik hátrányát jelenti, hiszen az adott geometriát nem tudjuk pontosan kitölteni egész elemekkel, így csupán csak közelíteni lehetséges. A csóva méretének megfigyeléseiből

látszik, hogy a fekü dőlésének növekedésével nő annak mérete az áramlási iránnyal és csökken azzal szemben. Ezen eredmények alapján megállapítható, hogy az alap modellezésem az irodalmi adatok alapján vártnak megfelel, és folytathatók a vizsgálatok más szimulációs esetekre is.

Agyag lencsék szennyezőanyag visszatartási szimulációja különböző dőlésű fekük esetében

Ebben a részben azt vizsgáltam meg, hogy különböző magasságú agyag lencsék, hogyan befolyásolják a speciális szennyeződések mozgását ferde fekük esetében.

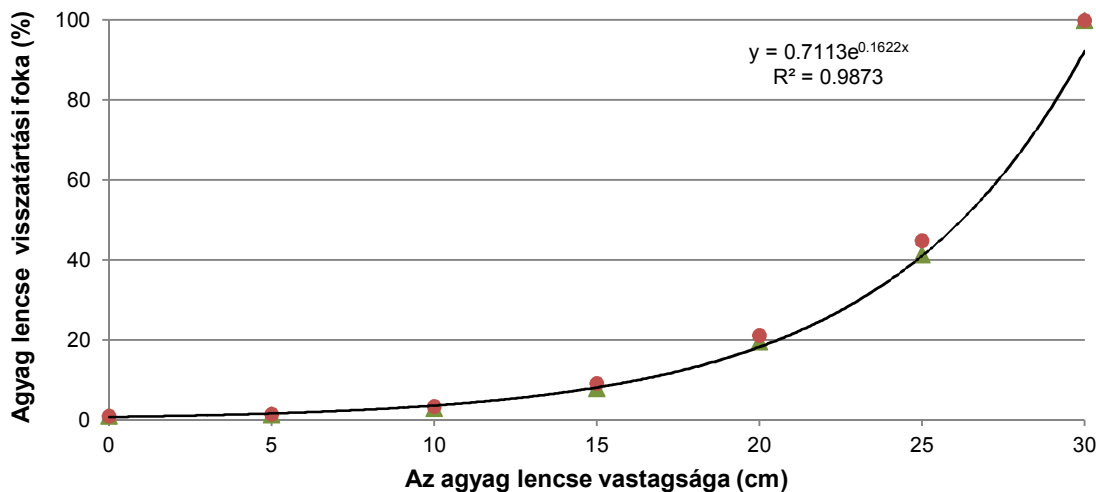
A modellezés során az agyag lencsét a TCE belépési pontjától számítva azonos távolságban helyeztem el (3.5 m), mindhárom rétegdőlés esetében. Hasonlóan az előző fejezethez 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35 és 40 cm-es agyag kiemelkedéseket feltételeztem (dőléstől függően) a vízzáró rétegből. Az eredményeknél megvizsgáltam az agyag lencse előtti cellában a szennyezőanyag koncentráció változását, illetve meghatároztam a visszatartási fokot, amit szintén a már bemutatott módon számítottam. Ebben az esetben azonban nem egy bázis cellához viszonyítottam a koncentráció értékeket, hanem az agyag lencse helyétől (11.5 m, 0 ponttól) mért csóva nagyságokat hasonlítottam össze az agyag kiemelkedések magasságának a függvényében. Azért változtattam, mert a fekü dőlése és a numerikus módszerből adódó hiba miatt az összehasonlítás nem lett volna megfelelő a különböző esetekben. A **8. táblázat** mutatja az 1°-os agyag fekü esetében a számított értékeket.

8. táblázat Az 1°-os vízzáró réteg dőlés esetén kapott eredmények.

Agyag lencse vastagsága (cm)	TCE koncentráció az agyag lencse előtti cellában (mg/l)	Csóva nagysága az agyag lencsétől (m)	Agyag lencse visszatartási foka (%)
0	0.293	27	0
5	0.3989	26.7	1.27
10	0.5193	26.2	2.84
15	0.5483	24.9	7.89
20	0.5726	21.7	19.52
25	0.5843	15.8	41.34
30	0.5866	0.0	100

Ennél a szimulációnál visszakaptam a vízszintes fekünél tapasztalt eredményeket, vagyis 30 cm-es vastag agyag kiemelkedés képes 100 %-ban visszatartani az önálló fázisú szennyezőanyagot. Pontosabb eredményt ettől akkor kaphatunk, ha a rácshálót jobban sűrítjük és a fekü 1°-os dőlését az osztásnak köszönhetően jobban figyelembe tudjuk venni a modellezésnél.

A **36. ábrán** megvizsgáltam, hogyan változik az agyag lencse vastagságának növekedésével a visszatartási hatások és feltüntettem a vízszintes fekvés esetében kapott eredményeket is.



▲ Visszatartási hatásfok változása 1°-os ferde fekvés esetében ● Visszatartási hatásfok változása vízszintes fekvés esetében

36. ábra A visszatartási hatások változása 1°-os ferde fekvés esetében az agyaglencsék vastagságának függvényében.

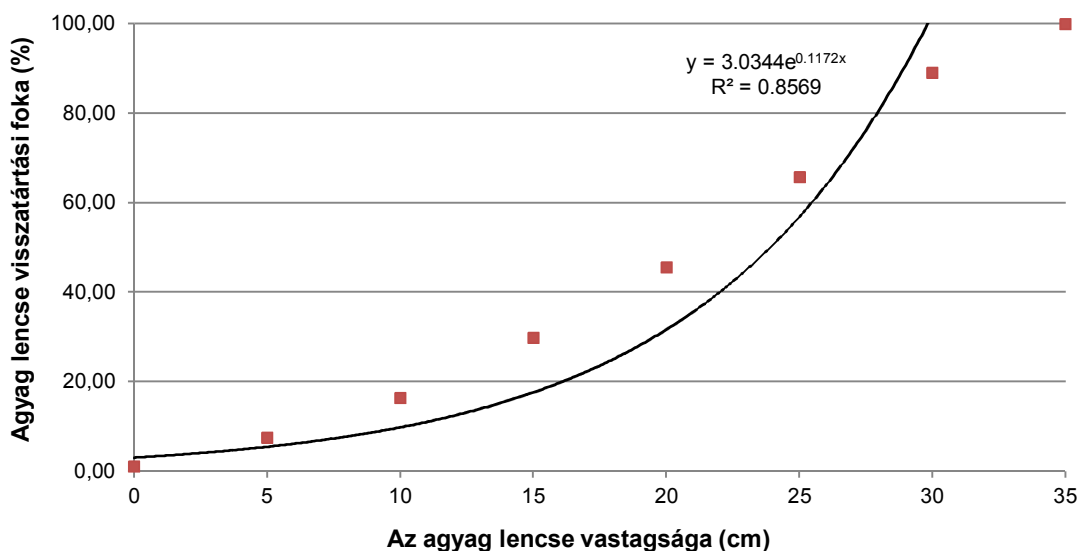
A **9. táblázat** mutatja a 3°-os fekvés esetében a szimulációs eredményeket.

9. táblázat Az agyaglencse vastagság változtatásának modellezésével kapott értékek 3°-os dőlésű fekvés esetében.

Agyag lencse vastagsága (cm)	TCE koncentráció az agyag lencse előtti cellában (mg/l)	Csóva távolsága az agyag lencsétől (m)	Agyag lencse visszatartási foka (%)
0	0.1363	33.6	0
5	0.388	31.1	7.44
10	0.5169	28.1	16.37
15	0.5881	23.6	29.76
20	0.632	18.3	45.54
25	0.6596	11.5	65.77
30	0.6679	3.7	88.99
35	0.6715	0	100.00

A táblázat alapján megállapítható, hogy a szennyezőanyagot, ennél az esetről 35 cm-es agyag lencse 100 %-ban visszatartja és az agyag lencse előtti cellában a TCE koncentráció a kezdetihez képest kb. 5-szörösére emelkedik. A **37. ábrán** megvizsgáltam, hogyan változik az agyag lencse magasságának emelkedésével a visszatartási hatások. A pontokra itt is trendvonalakat próbáltam illeszteni, azonban a vízszintes és az 1°-os

ferdefekű esetéhez képest itt másodfokú egyenlettel leírható görbe adta a legjobb illeszkedést. Ennek ellenére inkább az exponenciális trendet fogattam el mivel ez fizikailag jobban magyarázható és az előző két esethez jobban kapcsolható.



37. ábra A visszatartási hatások változása 3°-os ferde fekű esetében az agyaglencsék vastagságának függvényében.

A **10. táblázatban** mutatom be a 5°-os fekű esetre végzett szimulációk eredményeit.

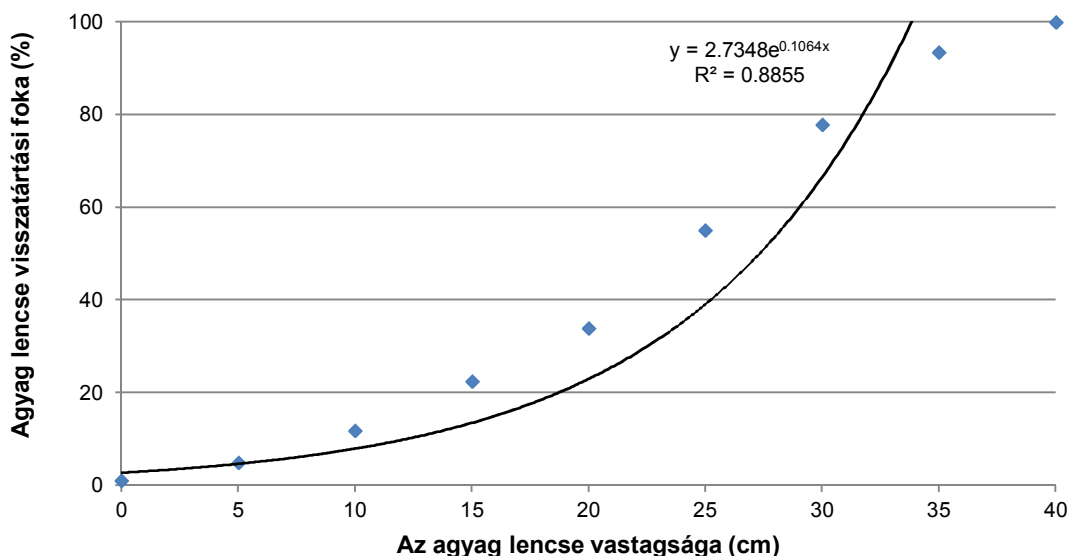
10. táblázat Az 5°-os dőlésű vízzáró fekű esetében a különböző magasságú agyag lencsék visszatartásának eredményei

Agyag lencse vastagsága (cm)	TCE koncentráció az agyag lencse előtti cellában (mg/l)	Csóva távolsága az agyag lencsétől (m)	Agyag lencse visszatartási foka (%)
0	0.1036	36.5	0
5	0.3848	34.7	4.93
10	0.5154	32.2	11.78
15	0.5866	28.3	22.47
20	0.6305	24.1	33.97
25	0.6594	16.4	55.07
30	0.6754	8.1	77.81
35	0.6794	2.4	93.42
40	0.6823	0	100.00

A TCE szennyeződés 100 %-os visszatartáshoz ennél az esetnél 40 cm vastagságú agyag lencse kellett. A vizsgált cellában a szennyezőanyag koncentrációja az alap

esethez képest közel 7 szeresére emelkedett. A **38. ábrán** szemléltetem a visszatartási fokot az agyag lencse magasságának változásával.

A grafikon alapján elmondható, hogy 3°-os ferde fekü esetéhez hasonló helyzet állt elő, azonban itt is az exponenciális trendet fogattam el a visszatartási hatások változására.



38. ábra A visszatartási hatások változása 5°-os ferde fekü esetében az agyaglencsék vastagságának függvényében.

Összegzésként elmondható, hogy az elvégzett szimulációkkal (vízszintes és ferde fekü) bebizonyítottam, hogy mennyire fontos a geológiai kép pontos ismerete a speciális szennyeződések modellezésénél, hiszen akár pár cm-es kis áteresztőképességű réteg jelenléte jelentős mértékben befolyásolni tudja ezen szennyeződések mozgását a felszín alatti közegben. Célszerű ezért, hogy a költségek figyelembevételével minél jobban feltárjuk az adott terület földtani és vízföldtani tulajdonságait, ehhez leginkább a CPT szondázások illetve egyes geofizikai módszerek (pl. gerjesztett polarizációs mérések) alkalmazása jelenthet nagy segítséget (*Plank et al., 2007; 2011*).

4. tézis. Többfázisú UTCHEM szimulációk segítségével megvizsgáltam a valóságban gyakran előforduló ferde rétegzettségű összletek esetében a különböző magasságú agyaglencsék szennyeződés-terjedéssel kapcsolatos visszatartási hatásfokát. Ferde fekü esetében az agyaglencsék speciális szennyeződésekkel kapcsolatos visszatartási hatásfoka homogén anizotróp közegben 1°, 3° és 5°-os ferdeségnél is exponenciális egyenlettel közelíthető. A kapott új eredményekre vonatkozóan az alábbi megállapítást teszem:

- Az alkalmazott szimulációk során megmutattam, hogy növekvő dőlésű rossz vízvezető tulajdonságú fekü esetében egyre nagyobb vastagságú agyag

lencse képes csak 100%-ban visszatartani a speciális szennyezőanyagok önálló fázisát.

- Megállapítottam, hogy a dőlt feük hatását vizsgáló szimulációk esetében a numerikus hibák nagymértékben megnövekedhetnek, ha nem történik kellően finom rácsháló sűrítés.

7.2. Laboratóriumi permeabilitás görbék bevitele az Utchem modulba

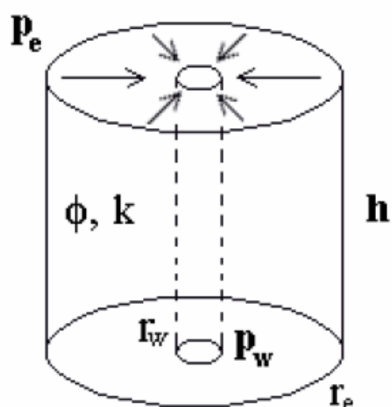
A világ olajtermelésének jelentős hányada vízkiszorítással művelt olajtelepekből származik. Ennek oka az, hogy a víz gazdaságosan alkalmazható és nagy mennyiségben áll rendelkezésre (részben az olajjal együtt termeljük ki), a kiszorítás térfogati hatásfoka elfogadható nagyságú, nem igényel költséges előkészítést, az alkalmazott technológia környezetkímélő.

A Miskolci Egyetem Alkalmazott Földtudományi Kutató Intézetében Dr. Tóth János és munkatársai régóta foglalkoznak a kútkörzetek működésének vizsgálatával kiszorítási hatásfok növelése érdekében (Toth et al, 1998, 2002; Tóth et al, 1998; Bódi et al, 2005). A kidolgozott módszer jól alkalmazható a fúrómagokból kiképzett, nagyméretű kőzetmagokon radiális rendszerben végrehajtott nem állandósult (unsteady-state) vízkiszorítási vizsgálatok folyamatának analitikus leírására, az úgynevezett kiszorítási egyenletek felírására, majd ezekre alapozva egyszerűen számíthatók az relatív permeabilitási görbék (Bódi et al, 2005).

Radiális áramlási rendszerekben a fluidum-cserére elmondható, hogy a besajtott fluidum térfogatárama mindig egyenlő a kilépő fluidumok térfogat-áramainak összegével:

$$q_i = q_k + q_d \quad (34)$$

mivel az áramlás forrásmentes és a fluidumokat összenyomhatatlannak vesszük. Tekintsük az **39. ábrán** látható radiális kőzetmodellt, ahol a palást irányából a tengelyben lévő lyuk irányába történik az áramlás.



39. ábra A radiális áramlási rendszer sematikus rajza a legfontosabb paraméterekkel.

Az ábrán látható jelölések a következők: a mag magassága (h), a tengely fúrat sugara

(r_w), a külső sugár (r_e), a homogénnek vett mag porozitása (ϕ), permeabilitása pedig (k). A mag telítve van a k -jelű (kiszorítandó) fluidummal, melyet d -jelű (kiszorító) fluidummal szorítunk ki, a besajtott fluidum térfogatárama (q_i). Feltételezzük, hogy olyan sebességgel történik a fluidumcsere, amelynél a kapilláris erő alárendelt szerepet játszik, ezért annak hatása elhanyagolható ($P_c=0$), a paláston a nyomás p_e , a furatban (a kilépő helyen) a nyomás p_w , így a depresszió $\Delta p = p_e - p_w$.

Ekkor az áramlási egyenletek a következő alakban adhatók meg:

$$q_d = -\frac{2 \cdot \pi \cdot h \cdot r \cdot k \cdot k_{rd}}{\mu_d} \cdot \frac{dp}{dr} \quad (35)$$

$$q_k = -\frac{2 \cdot \pi \cdot h \cdot r \cdot k \cdot k_{rk}}{\mu_k} \cdot \frac{dp}{dr} \quad (36)$$

és

$$q_i = -2\pi h r k \left(\frac{k_{rd}}{\mu_d} + \frac{k_{rk}}{\mu_k} \right) \cdot \frac{dp}{dr} = -2\pi h r k \cdot Y(S_d) \cdot \frac{dp}{dr} \quad (37)$$

ahol

$$Y(S_d) = \frac{k_{rd}}{\mu_d} + \frac{k_{rk}}{\mu_k}. \quad (38)$$

Az 37. egyenlet megoldása számos átalakítás és integrálás után a következő alakban írható fel:

$$\frac{d(\Delta p)}{dt} = \frac{1}{4\pi h k} \left[\frac{4\pi h k}{q_i} \frac{d^2 V_i(t)}{dt^2} - \frac{q_i^2}{Y(S_{d2}) V_i(t)} \right] = \frac{\Delta p}{q_i} \frac{d^2 V_i(t)}{dt^2} - \frac{q_i^2}{4\pi h k Y(S_{d2}) V_i(t)}. \quad (39)$$

A kapott (39) áramlási egyenlet két feltétel mellett alkalmazható:

- I. $\Delta p =$ állandó, ekkor $V_i(t)$ változik,
- II. $q_i =$ állandó, ekkor pedig $V_i(t) = q_i t$ és $\Delta p(t)$ változik.

Vezessük be a Leverett függvényeket:

$$f_d = \frac{q_d}{q_i} \frac{k_{rd}}{\mu_d Y(S_d)}, \quad (40)$$

$$f_k = \frac{q_k}{q_i} \frac{k_{rk}}{\mu_k \gamma(S_d)}, \quad (41)$$

$$f_d + f_k = 1, \quad (42)$$

$$\frac{k_{rd}}{\mu_d} = \frac{f_d \mu_d}{f_k \mu_k}. \quad (43)$$

A radiális magba, amely S_{di} kezdeti telítettségű kiszorító fluidumot tartalmaz, t idő alatt $V_i(t)$ mennyiségű kiszorító fluidum kerül besajtolásra. Ezen t idő alatt $V_d(t)$ össztérfogatú kiszorító fluidum kitermelése mellett $V_k(t)$ mennyiségű kiszorítandó fluidumot szorítunk ki

$$V_i(t) = V_k(t) + V_d(t) \quad (44)$$

ahol

$$V_i(t) = \int_0^t q_i dt, V_k(t) = \int_0^t q_k dt, V_d(t) = \int_{t_a}^t q_d dt \quad (45)$$

t_a – az áttörés időpontja.

Nevezzük e függvényeket áramlási egyenleteknek. Az áttörést követően ($t > t_a$) a térfogatok között az alábbi reláció áll fenn:

$$\frac{V_i}{V_k} = a + b \frac{V_i}{V_p} \quad (46)$$

ahol

a - a kiszorított fluidum hányada a fronttelítettségénél, kisebb, mint egy ($a < 1$),

b - konstans, amelyre igaz, hogy $1 < b = 1 / (S_{dmax} - S_{di})$.

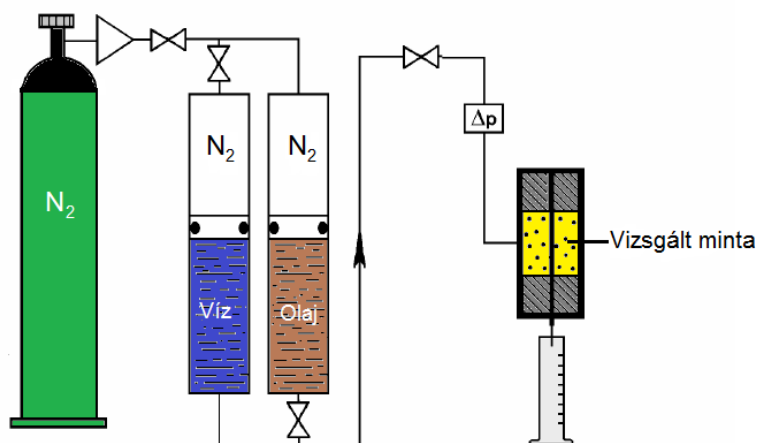
A Leverett-féle f – frakciók pedig a (44) és (40), (41) egyenletek alapján:

$$\frac{k_{rd}}{k_{rk}} = \frac{f_d \mu_d}{f_k \mu_k} \quad (47)$$

A szerzők számítási módszere nem csak a laboratóriumban végzett kiszorítási kísérletek adatainak feldolgozását teszi lehetővé, hanem eredményesen alkalmazható olajkutak termelési adatainak feldolgozására is (Tóth *et al.*, 2006, 2008, 2010). Módszerük segítséget nyújt a kútkörüli gyűjtőterület állapotának, a kút teljes termelési múltját figyelembe vevő felmérésére, a kútkörüli gyűjtőterület maradék olajtelítettségének, a

víz-elárasztás hatékonyságának meghatározására (Tóth *et al.*, 2010). A kút teljes gyűjtőterületét és termelési múltját figyelembe vevő kútdiagnosztika eredményei alapot nyújtanak a kútból még kitermelhető olajmennyiség becslésére (Tóth *et al.*, 2006).

A laboratóriumi mérések gyorsan és kis eszköz apparátussal elvégezhetők (**40. ábra**), és az így kapott eredményeket (relatív permeabilitás görbéket) az irodalomból vett adatok helyett - fel tudjuk használni például a DNAPL szennyezések kutakkal történő kármentesítésének modellezésénél az UTCHEM modulban, amellyel a tényleges adatok felhasználásával a kármentesítések szimulációjának megbízhatósága növelhető (Zakanyi, Szucs, 2012). Ezzel tulajdonképpen egy olajiparban alkalmazott és bevált módszer adaptálható a környezetvédelmi célú, többfázisú áramlással foglalkozó modellezések és kármentesítések pontosítására.



40. ábra A radiális kiszorítási kísérletek elvégzéséhez használt mérőrendszer sematikus rajza (Bódi *et al.*, 2005 alapján).

A következőkben egy esettanulmányt mutatok be, ahol először egy klórozott szénhidrogén szennyezést szimuláltam irodalmi adatokból nyert relatív permeabilitás görbe (Grant *et al.*, 2004), majd pedig tényleges fúrási magon végzett radiális kiszorítási kísérletek mérési adataiból számított relatív permeabilitási görbe eredményeivel (**4. melléklet**) (Zákányi *et al.*, 2013). A modellezést két részre választottam, először csak a szennyeződés (TCE) kijutását és terjedését (180 nap), majd a második részben, a szennyezőanyag egy termelő kúttal történő kármentesítését vizsgáltam meg (180+360 nap). Először bemutatom, a modellezett térrész tulajdonságait.

A modell területet a **41. ábra** mutatja és a következő paraméterekkel rendelkezik:

- a bal alsó sarok koordinátái: 0 m; 0 m
- a jobb felső sarok koordinátái: 60 m; 6 m.

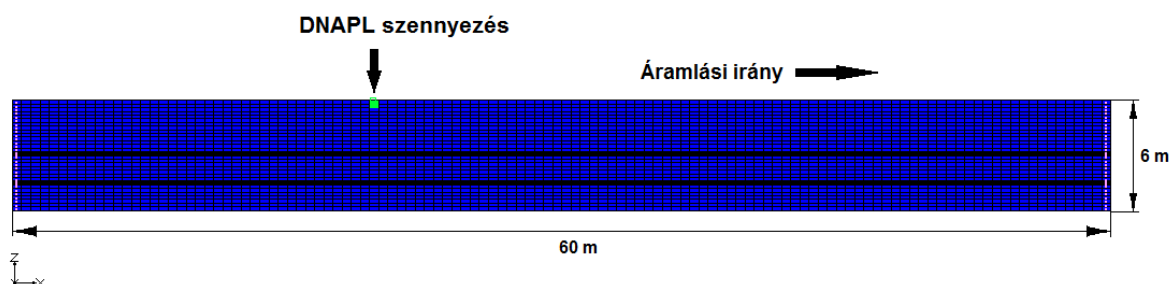
A nyílttűkrű szimulációs modell a következő paraméterekkel rendelkezik:

- kezdeti vízszint: 6 m,

- szivárgási tényező: $k_{\text{vázadó}}=0.00001$ m/s,
- horizontális és vertikális anizotrópia: 1.2,
- áramlási irány: bal oldalról a jobb oldal felé, 0.001 hidraulikus gradienssel,
- porozitás: $n_{\text{vázadó}}=0.3$.

A hálórendszer amelyet, az UTCHEM szimulációban alkalmaztam:

- 36 sor,
- 120 oszlop,
- cellák száma: 4320.



41. ábra Az irodalmi és mérési eredményekből nyert relatív permeabilitási görbék összehasonlító szimulációjához alkalmazott rácsháló.

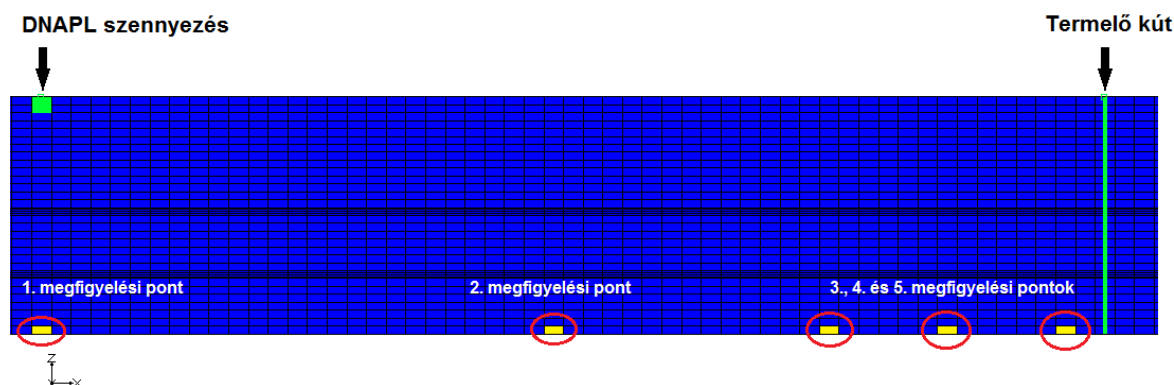
A szimulációs eredmények alapján megvizsgáltam azt, hogy mennyi idő alatt éri el a szennyezőcsóva a vízzáró fekvést, mekkora a legnagyobb kialakuló koncentráció, illetve mekkora méretű a csóva az áramlás irányában és azzal ellentétesen a különböző permeabilitási görbék figyelembevételével. Ezeket a szimulációs eredményeket a **11. táblázat** foglalja össze.

11. táblázat A DNAPL szennyeződés modellezése során kapott eredmények a különböző permeabilitási görbék figyelembe vételével.

Szimulációs eredmények adatai a kármentesítés előtt				
	Lejutás a vízzáróig (d)	Legnagyobb TCE konc. ($\mu\text{g/l}$)	Csóva nagysága az áramlási irányba (m)	Csóva nagysága az áramlási iránnyal szemben (m)
Irodalmi adatok figyelembevételével	15	582.789	25.5	8.5
Mérési adatok figyelembevételével	20	663.313	24.5	10

A táblázatból jól látszik, hogy különbség van az irodalomból vett permeabilitási görbe adatait figyelembevételével készített és a mérésből kapott relatív permeabilitási görbe szimulációs eredmények között.

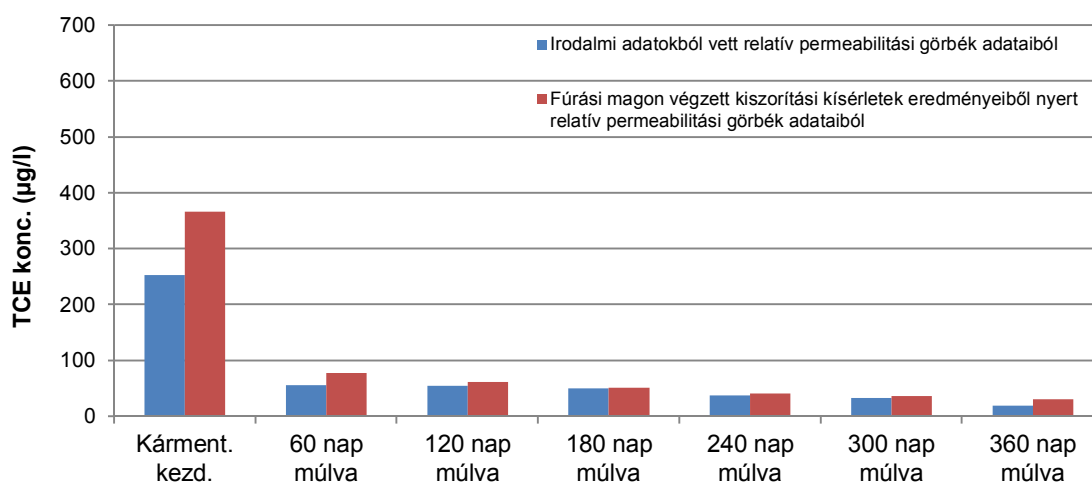
A kármentesítési szimulációjánál a szennyeződés belépésétől 27.5 m-re egy termelő kútat modelleztem ($r=0.055$ m), amely a teljes 6 m-re szűrőzve van. A kút hozama $Q=100$ m³/d. Ahhoz, hogy a különböző permeabilitási görbék általi modellezéseket össze tudjam vetni a **42. ábrán** lévő megfigyelési pontokban vizsgáltam meg a TCE koncentrációkat a kármentesítés kezdetén, majd ettől számított 60., 120., 180., 240., 300. és 360. napon. Ezeket táblázatos formában a **5. melléklet** mutatja.



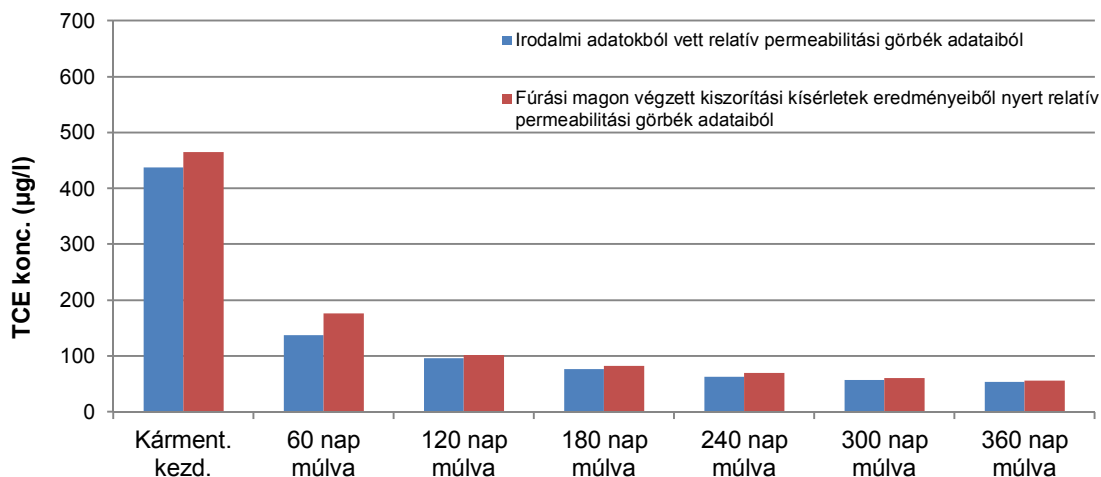
42. ábra A kármentesítési szimulációnál a megfigyelési pontok (1. - belépési pont alatt, 2. - 13 m-re, 3. - 20 m-re, 4. - 23 m-re, és 5. 26 m-re a belépési ponttól).

Hátránya az UTCHEM modulnak, hogy megfigyelési pontokat (Observation Points) nem lehet benne létrehozni, manuálisan kell egy-egy ponthoz és időhöz az adatokat kinyerni.

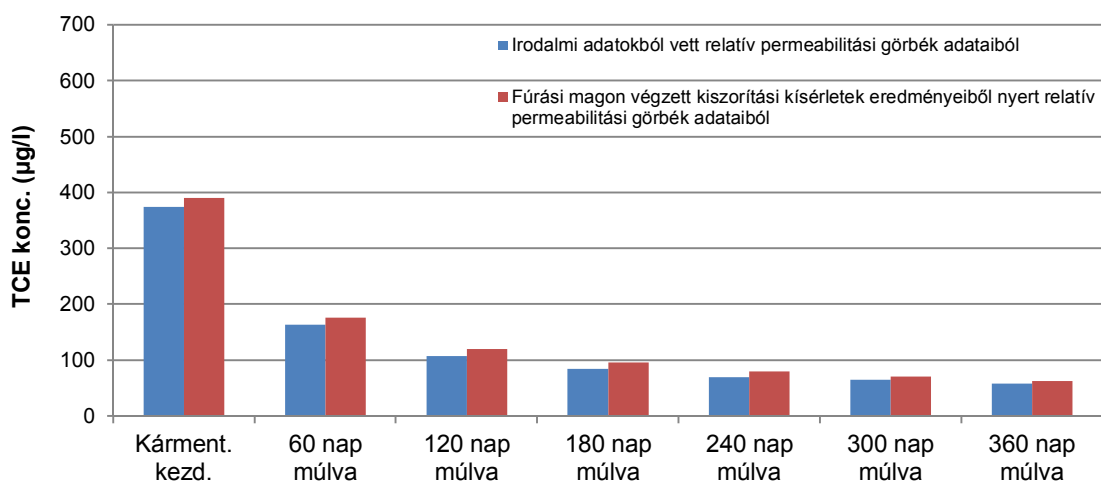
A következő **43-47. ábrákon** a szimulációkban kapott TCE koncentráció értékeket hasonlítottam össze a különböző helyeken.



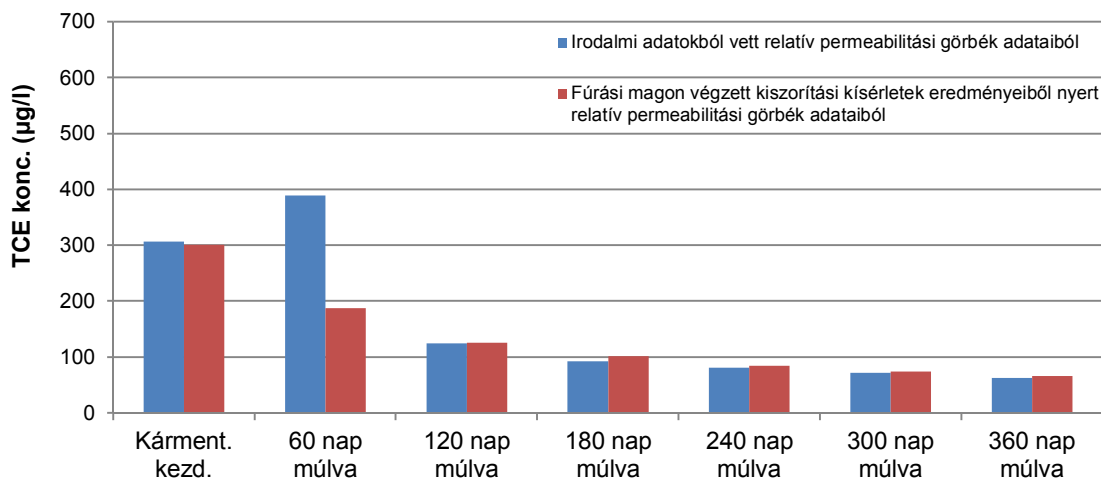
43. ábra A belépési pont alatti megfigyelőpontban kapott szennyezőanyag koncentrációk.



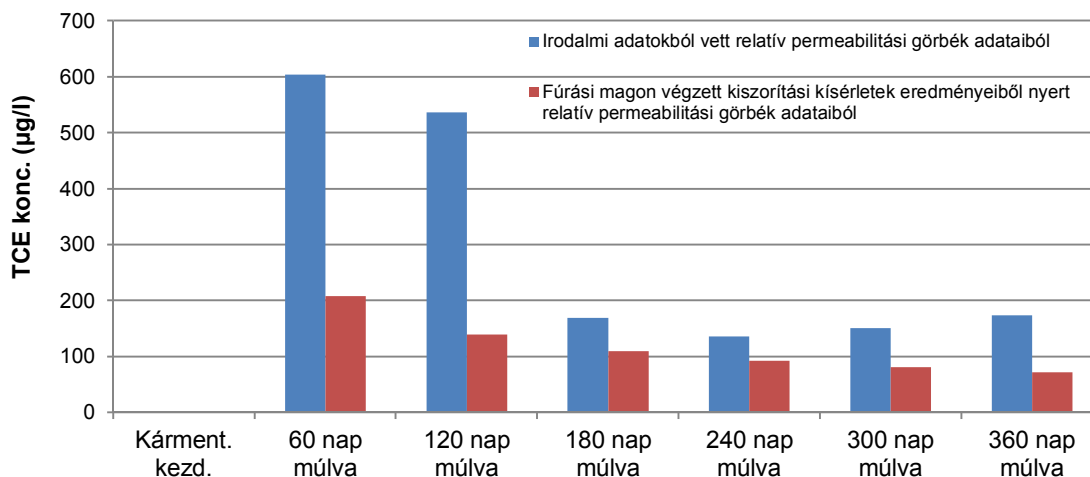
44. ábra A belépési ponttól 13 m-re lévő megfigyelőpontban kapott TCE koncentrációk.



45. ábra A belépési ponttól 20 m-re lévő megfigyelőpontban kapott szennyezőanyag koncentrációk.



46. ábra A belépési ponttól 23 m-re lévő megfigyelőpontban kapott szennyezőanyag koncentrációk.



47. ábra A belépési ponttól 26 m-re lévő megfigyelőpontban kapott szennyezőanyag koncentrációk.

A fenti ábrák alapján megfigyelhető, hogy az 1., 2. és 3. megfigyelési pontokban a kísérleti úton kapott relatív permeabilitási görbék alapján készített szimulációk során a TCE koncentrációja magasabb, mint az irodalmi adatokból vett esetben. A 4. és 5. megfigyelési pont esetén ez a tendencia éppen fordítva alakul. Ennek alapján célszerűnek tűnik a fentiekben bemutatott egyszerű kísérleti módszerrel meghatározni a modellezés elvégzéséhez szükséges adatokat. Ezzel a módszerrel ugyanis a kármentesítések hatásfoka nagyobb megbízhatósággal határozható meg.

5. tézis. A speciális szennyezőanyagok többfázisú transzport-folyamatainak pontosítása érdekében egy az olajipar számára kifejlesztett, egyszerű kiszorítási kísérleten alapuló relatív permeabilitás meghatározási módszert adaptáltam és alkalmaztam. Ezzel a környezetvédelmi célú alkalmazással a numerikus szimulációk megbízhatósága növelhető, amely hatással van a szennyezett területek kármentesítésének tervezésére és kivitelezésére. A fent bemutatott modellezések alapján a következő megállapítást teszem:

- Az irodalmi, igen közelítő jellegű adatok helyett egy, a bemutatott olcsóbb laboratóriumi vizsgálat elvégzése – még ha az kis térfogatú térrészre terjed is ki – mindenképpen segítheti a többfázisú modellezések szempontjából kulcsfontosságú relatív permeabilitási görbék meghatározását, amelyek modellbe adaptálásával realisabbnak tekinthető szimulációt készíthetünk.

7.3. Sztochasztikus modellezés alkalmazása speciális szennyezőanyagok modellezésénél

Jól ismert jelenség, hogy a természetes geológiai közegek térben nem homogének, akármilyen méretskálán vizsgáljuk is azokat. A térbeli változatosság nagyon komoly hatást gyakorol az áramlási viszonyokra, mindenekelőtt az oldatok-, és szennyezőanyagok-transzportjára (Marton, 2009). A felszín alatti modellezésnél mindig van egy kisebb-nagyobb mértékű bizonytalanság. Néhány modellparaméter, mint például a szivárgási tényező és a beszivárgás különösen hajlamosak ezt növelni. A megfigyelési pontok mennyisége és milyensége, valamint az ezekből származó adatok (monitoring kutak adatai, vízmintavétel, stb.) növelhetik a modellezés megbízhatóságát és kalibrálását (Marton, 2009). Azonban a kalibrációhoz szükséges adatok gyakran kevésnek bizonyulnak, és így egy jól elkészített modell is nagyfokú bizonytalansággal terhelt lehet.

A sztochasztikus modellezés statisztikai alapon kezeli a hidrodinamikai és transzportfolyamatokat. Tudjuk, hogy valamennyi mért paraméter változásának is van bizonytalansága, sőt sokszor használunk olyan felvett paramétereket, melyek pontos eloszlását nem ismerjük, mégis úgy gondoljuk, hogy az értéke szinte bizonyosan egy általunk feltételezett intervallumba esik. Például egy homokösszlet esetén, ha ismerjük annak képződését feltételezhetjük, hogy a szivárgási tényezője jellemzően a 0.86-86.4 m/d tartományba esik, ugyanakkor pontról pontra nem ismerjük, nem ismerhetjük annak nagyságát. Ebben az esetben segít, ha a különböző hidraulikai, vízföldtani és transzportjellemzőket vagy azok egy részét olyan statisztikai változóknak tekintjük, amelyeknek valamilyen ismert diszkrét matematikai eloszlásuk van. Ilyenkor a paraméterek eloszlását függvényekkel írhatjuk le. Sztochasztikus modellezés során a számítást ugyanakkor nem a függvényekkel végezzük el, hanem a függvények segítségével generált nagyszámú adathalmazon. Egy-egy a felvett függvények eloszlásai alapján számított adathalmazt realizációnak szoktak nevezni és a számításokat 100, 500, vagy akár 1000 realizációval végzik el. Az eredményként kapott 100, 500 vagy 1000 eredményt statisztikai alapon dolgozzák fel: meghatározzák, hogy pl. egy-egy elemben a kialakuló koncentráció mekkora valószínűséggel nagyobb egy adott (határ)értéknél, vagy milyen valószínűséggel ér pl. 50 éven belül a víz adott elemből egy kiválasztott kútig, stb. A sztochasztikus modellezés eredménye ezért nemcsak a legvalószínűbb koncentráció-eloszlást adja meg, hanem egyben jellemzi a rendszer bizonytalanságait is (Kovács, 2004).

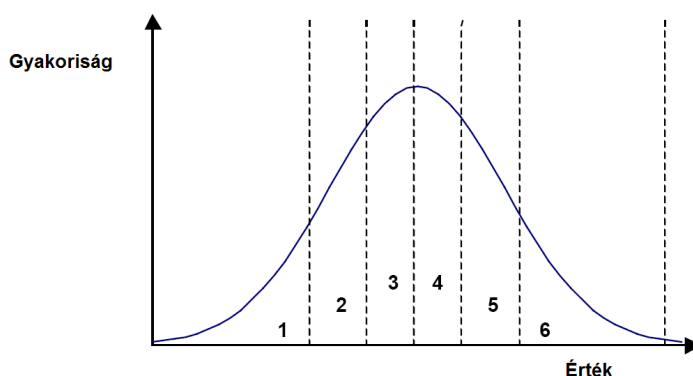
Ebben a fejezetben olyan esettanulmányt mutatok be, ahol egy valós TCE szennyeződés adatait használom fel. A modellezéshez az oldott fázis illetve a szennyezőanyag lebomlási sorát figyelembe vevő SEAM3D modult alkalmazom. A

tényfeltárás során vizsgált terület viszonylag kicsi (330m x 200m) és mivel a modellezést nagyobb területre kívánom elvégezni - de erre adataim nincsenek - a szimuláció kiterjesztéséhez sztochasztikus módszert alkalmazok. A következőkben azokat a sztochasztikus módszereket mutatom be röviden, amik a GMS programban megtalálhatóak.

A sztochasztikus szimulációk felépítése során két megközelítés választható a programban: véletlenszerű paraméter és indikátor szimuláció. Ebben a fejezetben csak az elsővel foglalkozok, amelyre két lehetőség kínálkozik, az egyik a "Monte Carlo", a másik a "Latin Hypercube" módszer.

Az első módszert széles körben alkalmazzák különböző események lehetséges kimeneteleinek és azok valószínűségeinek szimulációjára, amikor a bemenő paraméterek bizonytalanok (*Pokorádi, Molnár, 2011*). A véletlen mintavétellel (Monte Carlo), a felhasználó megad minden paraméterre egy átlag, egy szórás, egy minimális és egy maximális értéket, valamint az eloszlás típusát. GMS támogatja mind a normál, mind az egyenletes eloszlást is. A felhasználónak meg kell határoznia, hogy hány darab szimulációt kíván elvégezni. Minden szimuláció után kap egy eredményt. Minél több szimulációt végez el, annál nagyobb a modellezési eredmények megbízhatósága (*Aquaveo, 2011*).

A Latin Hypercube módszer vonzó alternatívát kínál a véletlen mintavétellel szemben, mivel lehetővé teszi az adott paraméter halmaz szegmensekre való osztását, így nagyobb megbízhatóság mellett kevesebb modellfuttatás szükséges. Ez különösen hasznos lehet a komplex modelleknél, ahol a számításhoz nagyon sok időre van szükség. Csakúgy, mint az előző módszernél, meg kell adni az átlag, szórás, minimum, és maximum értékeket az egyes paraméterekre. A felhasználó meghatározza a szegmensek számát, amellyel tulajdonképpen az adott paraméter valószínűség-eloszlási görbét osztja fel. Az 'n' szegmensben egyenlő a valószínűség értéke. A **48. ábra** egy paraméter normál eloszlását mutatja, mely hat szegmensre van osztva (*Aquaveo, 2011*).



48. ábra Egy normál eloszlás függvény szegmensekre való osztása.

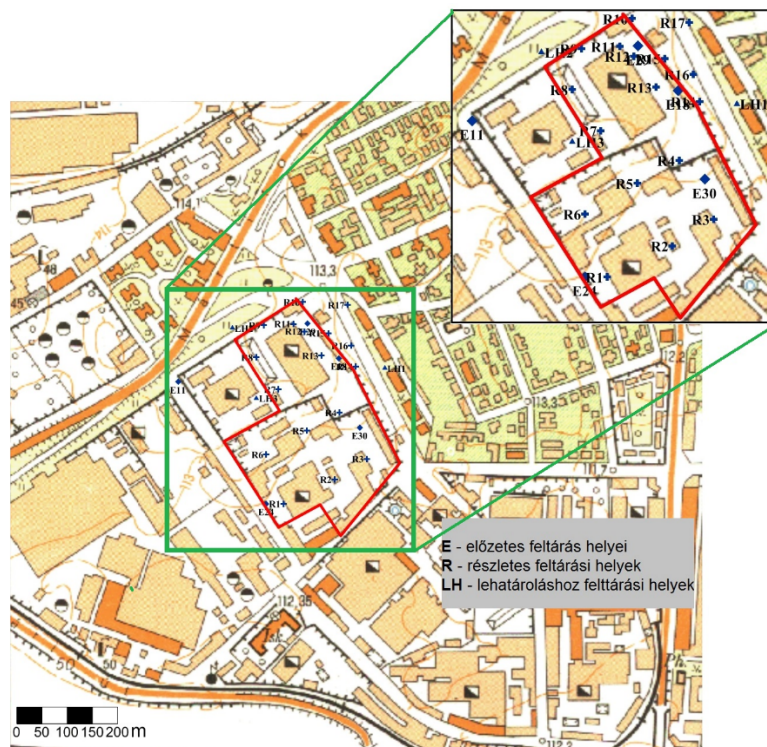
Miután a szegmensek meghatározásra kerültek, minden paraméter véletlenszerű értéket kap egy szegmensen belül. Ezek az értékek a többi paraméter véletlenszerű mennyiségeivel egyesíthetők, majd minden lehetséges kombinációt lefutatható a modellen. A teljes modell futtatások száma tehát függ a paraméterek és a szegmensek számától. Például, ha három paramétert négy szegmensre és egyet ötre osztunk, akkor a szimulációk száma $4 \cdot 4 \cdot 4 \cdot 5 = 320$. Ez a módszer tehát lehetővé teszi, hogy nagyobb megbízhatóság mellett kisebb számú futtatást és komplexebb paraméter kombinációkat vizsgáljunk.

A következőkben bemutatom a vizsgált területet, a szennyezés nagyságát, a hagyományos transzport-, majd a sztochasztikus-transzport szimulációk eredményeit.

A triklór-etilénnel szennyezett terület bemutatása

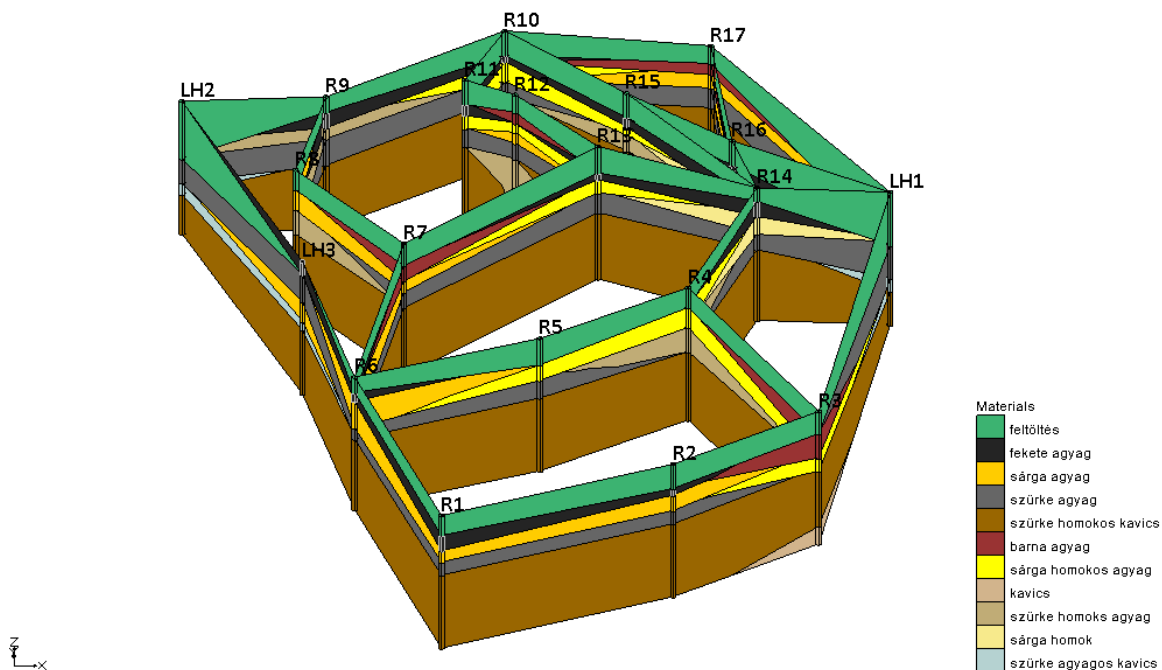
A tényfeltárást végző cég nem járult hozzá, hogy a terület pontos koordinátáit közöljem, ezért a térképeken nem használok EOV koordinátákat, sem olyan információkat, amelyekről felismerhető lenne a szennyezett terület.

A szennyezettség ténye 2008 őszén vált ismertté. Ekkor a **49. ábrán** bemutatott terület ÉK-i részén a talajvízben szennyezettségi határérték (B) feletti bór, és illékony alifás klórozott szénhidrogén (triklór-etilén) szennyezettséget tártak fel. A vizsgálatok kiterjedtek még klórbenzolok, és fémek vizsgálatára, de ilyen szennyezettséget nem találtak sem a talajban, sem a talajvízben. A talajban nincs, a talajvízben viszont jelen van a már említett két szennyezőanyag, amelyeknek a kiterjedése és koncentrációja szükségessé tette a tényfeltárást elvégzését.



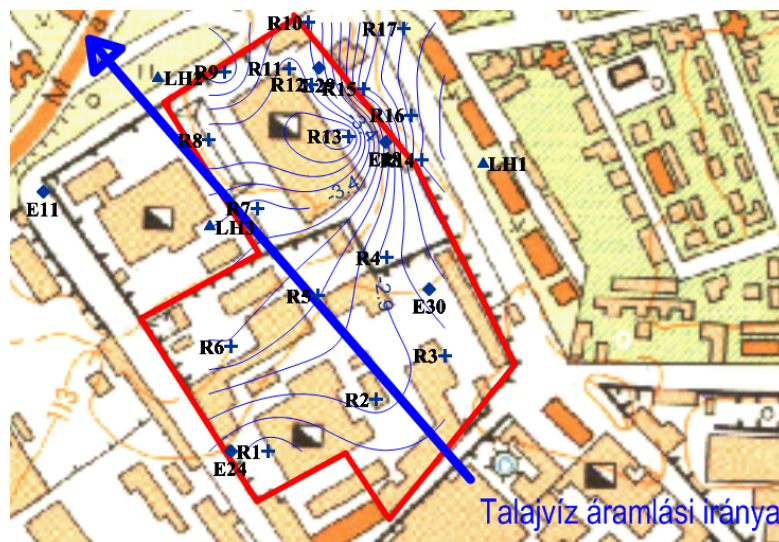
49. ábra A vizsgált terület lehatárolása és a feltárási helyek.

A feltérési adatok birtokában elkészítettem a terület 3D rétegszelvényét (**50. ábra**) a GMS program segítségével.



50. ábra A területen végzett fúrások adataiból készített rétegszelvény.

A területre jellemző talajvíz áramlási irányt az **51. ábra** mutatja be.



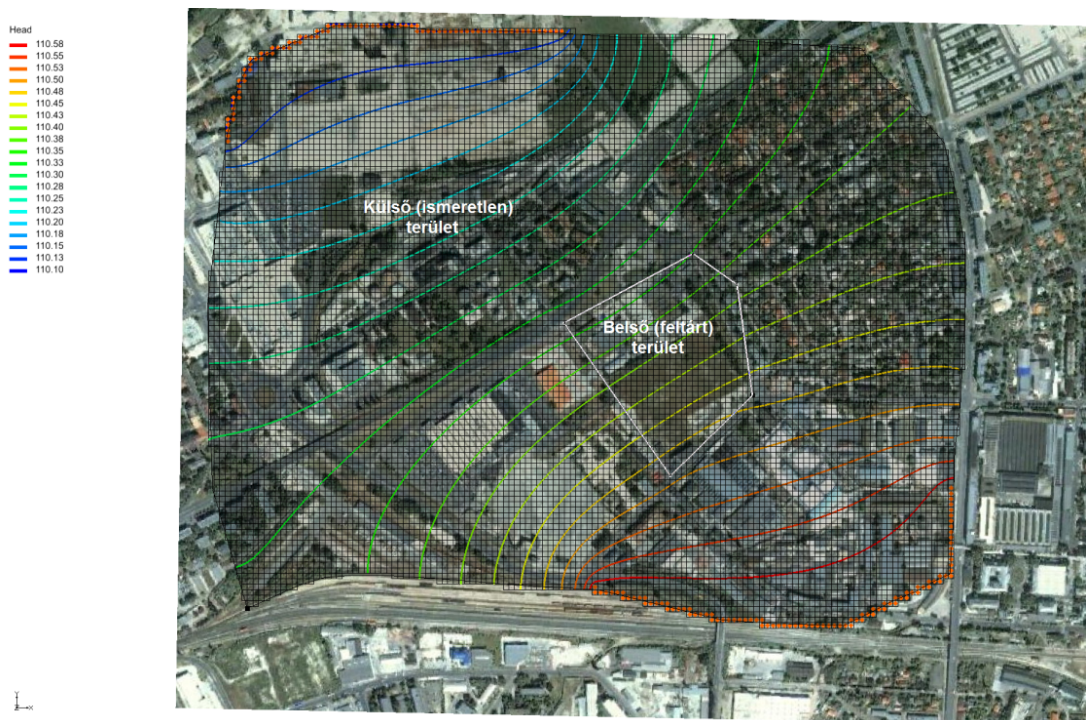
51. ábra A vizsgált területen mért vízszintek (2009. 03. 11.) és talajvíz áramlási iránya.

A terület előzetes és részletes tényfeltárása során 126 db talajmintát és 84 db vízmintát vizsgáltak meg akkreditált laboratóriumban. A felszín alatti vízben a bórra vonatkozó szennyezettségi (B) határérték $500 \mu\text{g/l}$. A vizsgált területen, és környezetében a legmagasabb mért koncentráció a következő két ponton fordult elő: R17-es kútban 4800

$\mu\text{g/l}$, LH2-esben $6200 \mu\text{g/l}$. A di-, tri-, és tetraklór-etilénre vonatkozó szennyezettségi (B) határérték $10 \mu\text{g/l}$, a vinil-kloridé $0.1 \mu\text{g/l}$. A vizsgált területen és környezetében a legmagasabb mért koncentrációk: az LH1-es jelű ponton $2490 \mu\text{g/l}$, míg a R13-asnál $1850 \mu\text{g/l}$ triklór-etilén.

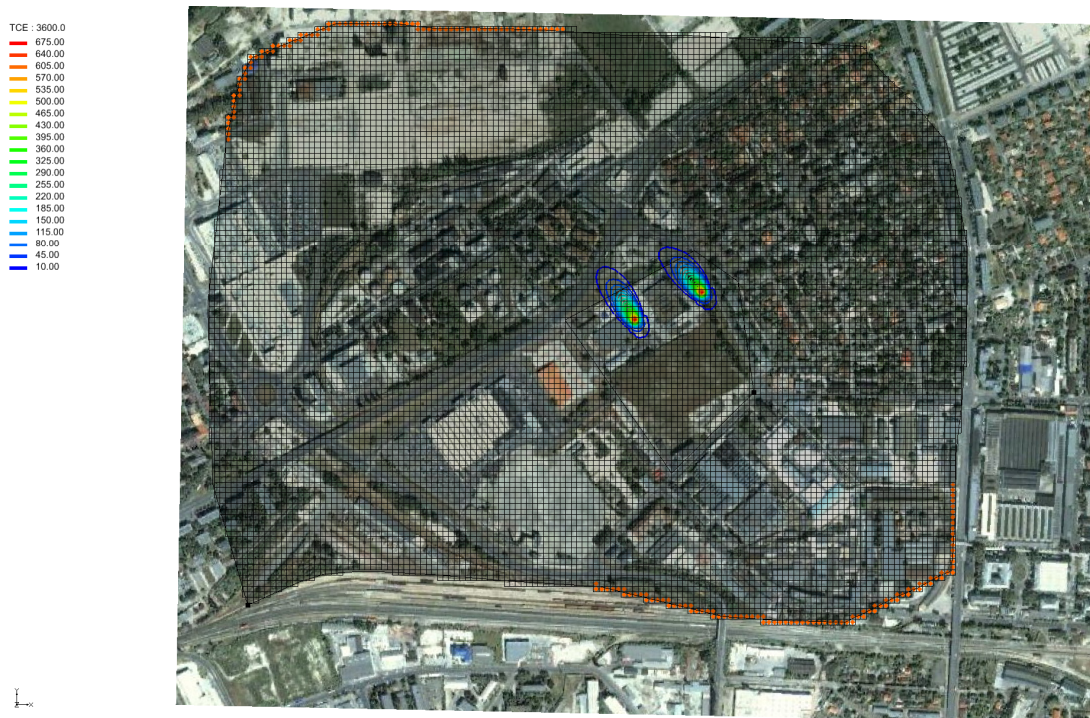
A hidrodinamikai- és transzportmodell felépítése

A 3D rétegszelvény alapján (**50. ábra**) megállapítottam, hogy a szimulációkat a szürke homokos kavics rétegre kell elvégezni (**6. melléklet**), ezért a modellezés során csak ezt réteget vettem figyelembe, ezt azonban további két részre osztottam fel. A tényfeltárási záró dokumentáció ismeretében elkészítettem az **52. ábrán** látható modellezett területet. A telített közeg szivárgási tényezője a monitoring kutakban elvégzett próbaszivattyúzások (5 db) kiértékelése alapján a következő határok között változott $5.04 \cdot 10^{-4}$ - $6.73 \cdot 10^{-5} \text{m/s}$, azaz 43.54 - 5.81 m/d között változik és éppen ezért indokolt volt a sztochasztikus modellezés alkalmazása.



52. ábra A modellezett (külső és belső) terület a peremfeltételekkel és a vízszintekkel.

Az alap modellnél a szivárgási tényezőt minden rétegre és zónára $1 \cdot 10^{-4} \text{m/s}$ -ra állítottam be. A triklór-etilén szennyezés helyeinek a két legmagasabb koncentrációval rendelkező feltárást feltételeztem, mértékét a feltárásnál kapott eredményekkel (LH1-es jelű ponton $2490 \mu\text{g/l}$, míg a R13-asnál $1850 \mu\text{g/l}$) fogadtam el. A modellezés időtartamát 10 évben (3650 nap) határoztam meg. A szimuláció végén kapott TCE koncentráció eloszlását az **53. ábra** mutatja.



53. ábra Az alap transzport szimuláció eredménye a 10. év végén.

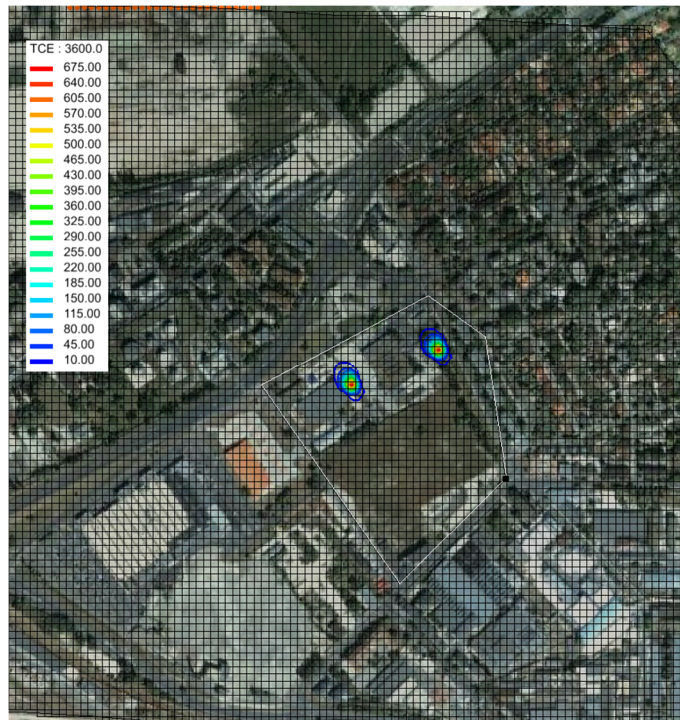
A sztochasztikus modellezés

Az alap hidrodinamikai modellt módosítottam az **52. ábrán** látható módon. Létrehoztam az első és második rétegben is egy belső „feltárt” területet és egy külső „ismeretlen” területet. Ezekre a zónákra megadtam a sztochasztikus szimulációkhoz szükséges k szivárgási tényezőkre jellemző adatokat (**12. táblázat**).

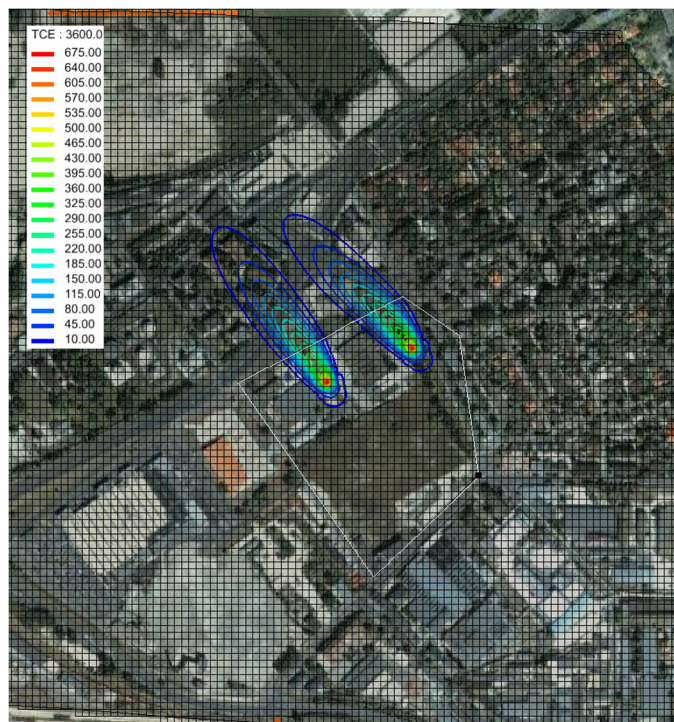
12. táblázat A sztochasztikus modellezés során alkalmazott szivárgási tényező paraméterek és a Latin Hypercube módszerhez tartozó szegmensek száma.

Zónák neve	Átlagos k tényező érték (m/d)	Minimális k tényező érték (m/d)	Maximális k tényező érték (m/d)	Szegmensek száma
1 réteg K(ülső)	17.28	1.0	84.6	4
1 réteg B(első)	8.64	0.864	42.0	2
2 réteg K(ülső)	17.28	1.0	100.0	4
2 réteg B(első)	8.64	0.864	38.0	2

Ha a szegmensek számát összeszorozzuk, megkapjuk a szimulációs futtatások számát, azaz $4 \cdot 2 \cdot 4 \cdot 2 = 64$ db. Ezekre a futtatásokra generált szivárgási tényező értékeket a **7. melléklet** tartalmazza. A sztochasztikus modellezés időtartam ennél a „viszonylag egyszerű” modellnél 21 óra 42 perc. A szimulációk közül két kiemelt mutatok be az **54. és 55. ábrán** (1. számú scenárió ahol a legkisebb és a 61. scenárió, ahol legnagyobb a szivárgási tényezők értéke).



54. ábra Az 1. számú futtatás során kapott TCE koncentrációk ($\mu\text{g/l}$) a 10. évben.



55. ábra A TCE koncentrációk ($\mu\text{g/l}$) a 10. év végén a 61. számú futtatás során.

A két ábrát összehasonlítva szembeűnő a különbség, hiszen az elsőnél alig mozdul el a TCE szennyeződé, míg a második estében jóval nagyobb a szennyezőanyag csóva kiterjedése (13. táblázat).

13. táblázat Az 1. és 61. számú futtatás során kialakuló szennyezőanyag csóva kiterjedése.

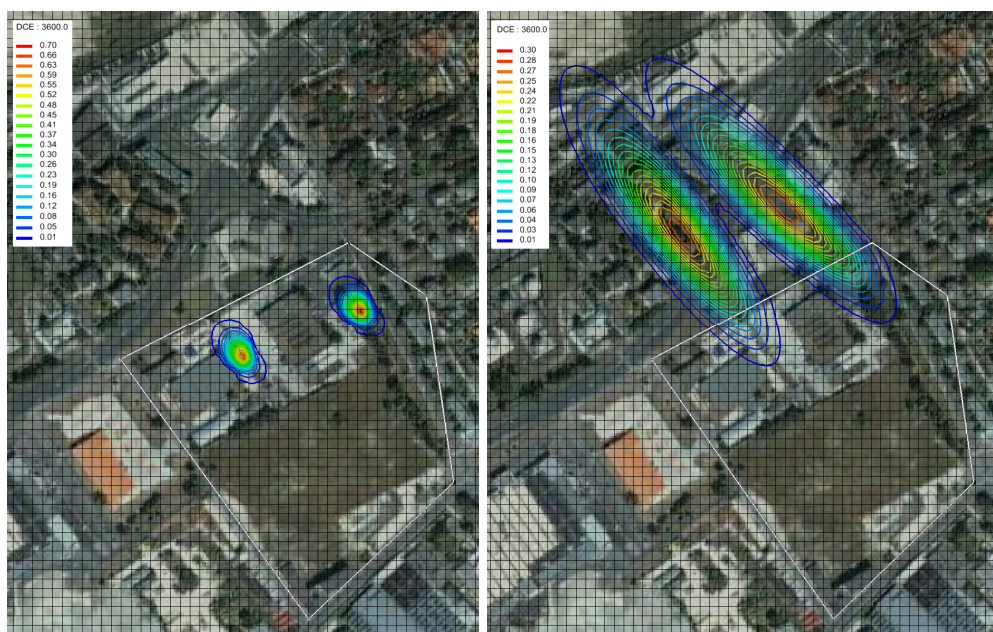
Szimulációs futtatás száma	TCE csóva legnagyobb hosszirányú kiterjedése (m)	TCE csóva legnagyobb keresztirányú kiterjedése (m)
1	92.92	34.34
61	309.8	76.49

A SEAM3D modul a NAPL szennyezőanyagok anaerob lebomlását (TCE → DCE → VC → etén) is képes szimulálni. A következő **56.-58. ábrákon** szintén az 1. és 61. futtatás során kapott bomlási eredményeket mutatom be. A **14. táblázatban** pedig összefoglaltam e két futtatás során kapott szennyezőanyag koncentrációkat.

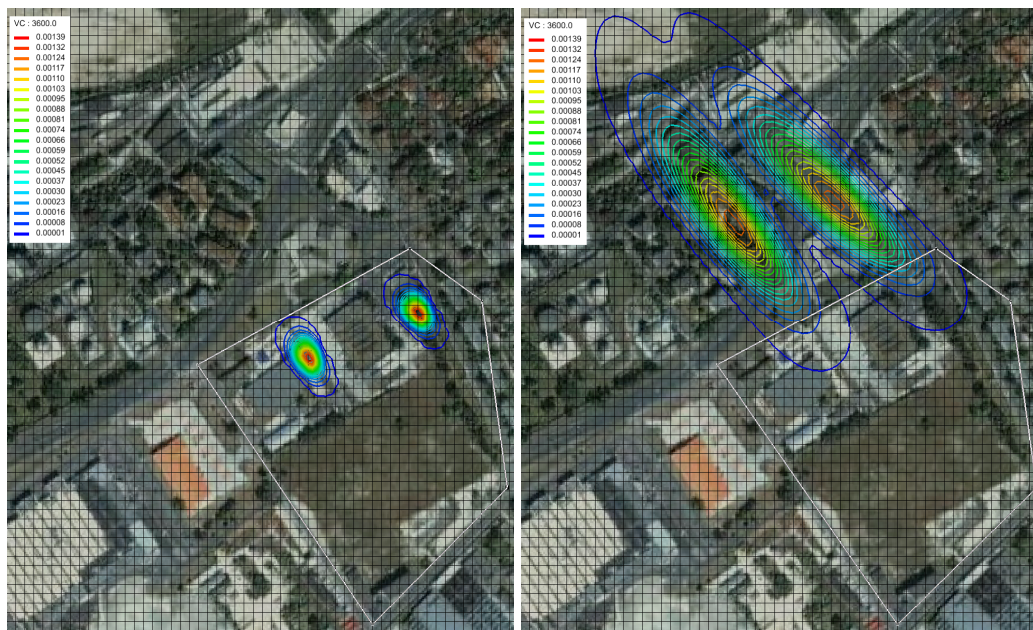
14. táblázat A triklór-etilén lebomlása során kialakuló maximális koncentrációk az 1. és 61. scenáriók esetében.

Szimulációs futtatás száma	TCE (µg/l)	DCE (µg/l)	VC (µg/l)	Etén (µg/l)
1	704.18	1.29	0.0139	$1.649 \cdot 10^{-6}$
61	704.18	0.69	0.0132	$2.254 \cdot 10^{-6}$

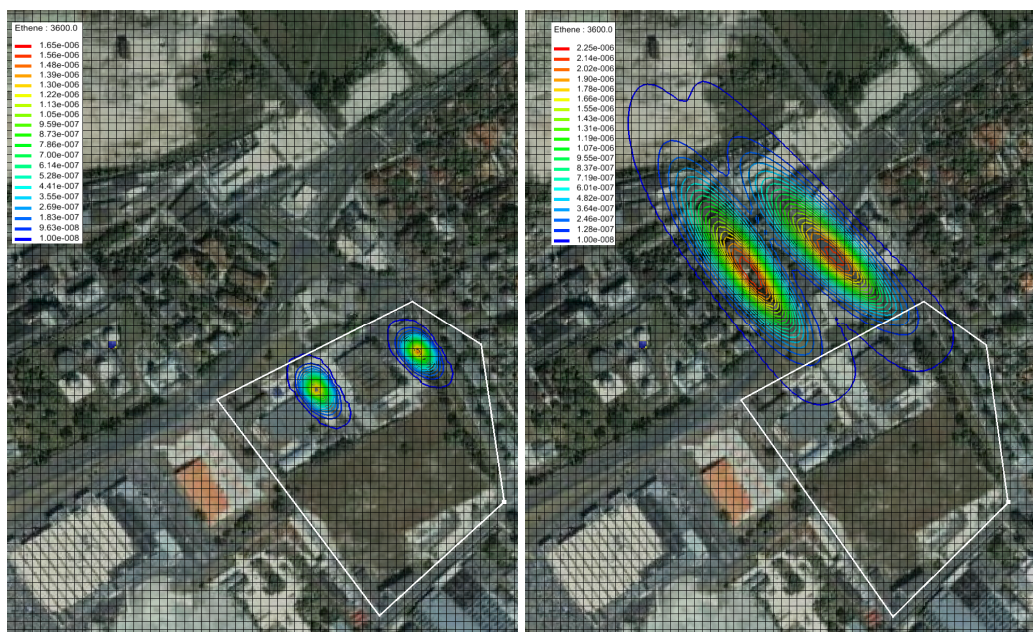
A **14. táblázat** alapján megállapítható, hogy a két futtatásnál a TCE és VC koncentrációk megegyeznek, míg a DCE és etén értékeknél különbség adódik. Utóbbinál az eltérés nem nagy, viszont az előbbinél az 1. futtatás során kapott eredménynek a fele adódik a 61. szimuláció során.



56. ábra A vizsgált szennyezőanyag (TCE) első bomlástermékének (DCE) koncentráció eloszlása a 10. év végén az 1. és 61. scenáriók esetében.



57. ábra A vizsgált szennyezőanyag (TCE) második bomlástermékének (VC) koncentráció eloszlása a 10. év végén az 1. és 61. scenáriók esetében.



58. ábra A vizsgált szennyezőanyag (TCE) utolsó bomlástermékének (etén) koncentráció eloszlása a 10. év végén az 1. és 61. scenáriók esetében.

Összességként elmondható, hogy a SEAM3D modul jól alkalmazható az oldott fázisú DNAPL szennyezőanyagok modellezésére. A sztochasztikus szimuláció nagyon jó eszköz lehet, olyan esetekben mikor a modellezést olyan területekre is ki akarjuk terjeszteni, amelyről nincsenek pontos ismereteink. Azaz a feltárást nem szükséges (vagy pénzühiány miatt nem lehetséges) kibővíteni.

6. tézis Szimulációs vizsgálatokkal bebizonyítottam, hogy a sztochasztikus modellezés alkalmazása jelentős mértékben elősegítheti a kis területeken végzett tényfeltárások során kapott eredmények nagyobb térrészre történő kiterjesztését. Megállapítottam, hogy a SEAM3D modul és a hozzá kapcsolódó sztochasztikus modellezés az oldott fázisú DNAPL szennyezőanyagok modellezésére hatékonyan alkalmazható, amely nagy segítséget nyújthat a humán kockázat értékelések elkészítésénél. A fent bemutatott szimulációk alapján a következő megállapításokat teszem:

- A SEAM3D modul alkalmazása lehetőséget ad bizonyos víznél sűrűbb szennyezőanyagok lebomlása során keletkező termékek és azok kémiai folyamatainak egyidejű modellezésére. Ennek azért van nagy jelentősége, mert sok esetben egy szennyezőanyag bomlásterméke jóval nagyobb kockázatot jelenthet a környezetre, mint maga a kiindulási szennyező.
- A sztochasztikus szimuláció jó eszköz lehet, olyan esetekben mikor a modellezést olyan területekre is ki akarjuk terjeszteni, amelyről nincsenek pontos ismereteink.

8. Eredmények értékelése, tézisek

A környezeti elemeket, így a talajokat és a felszín alatti vizeket érintő megörökölt ipari és bányászati eredetű szennyezések feltárása, továbbá felszámolása még napjainkban is tart. Bizonyos területeken jelenleg és a jövőben is történhet hasonló elszennyeződés. Ezért, különösen fontos a speciális szennyezőanyagok (pl. DNAPL, klórozott szénhidrogének) transzport folyamatainak jobb megismerése, hiszen azok megbízható szimulációja vezethet csak megfelelő hatékonyságú kármentesítési eljárások kidolgozásához. Dolgozatom elsődleges célja, hogy a DNAPL típusú szennyezők terjedési folyamatainak sajátosságait jobban megismertessem a GMS szoftver UTCHEM és SEAM3D moduljainak segítségével. A magas szintű numerikus szimulációk alkalmazása ma már hasznos és fontos kelléke a hidrogeológiai kutatásoknak, ugyanakkor elengedhetetlen alapja a megfelelő szakmai döntéshozatalnak.

Célkitűzéseim megvalósítása során az alábbi tézisekbe foglalt új eredményekre és megállapításokra jutottam:

1. Szimulációs vizsgálatok segítségével bebizonyítottam, hogy a MODFLOW programhoz kapcsolódó MNW moduljának alkalmazásával a több szinten szűrőzött kutak hidraulikai sajátosságai elfogadható pontossággal írhatóak le még bonyolult vízföldtani szituációk esetében is. A több szinten szűrőzött kutak hidraulikai viselkedésének pontosításával megbízhatóbban szimulálhatóak a szennyeződés-terjedési és kármentesítési folyamatok.
2. Esettanulmányokon keresztül bebizonyítottam, hogy a SEEP2D modul hatékonyan alkalmazható speciális szennyezőanyagok tárolására alkalmas tározók gátjának, töltésének hidrodinamikai vizsgálatára. A SEEP2D modul lehetővé teszi a víznél nagyobb sűrűségű fluidumok gátszivárgási mechanizmusának leírását is.
3. A vizsgálataim során a speciális szennyeződések agyaglencsék általi visszatartásának határfokát modelleztem az UTCHEM modullal vízszintes réteg fekü esetén. Kimutattam, hogy a DNAPL típusú szennyező anyagok felszín alatti transzport-folyamatainak szimulációja esetében rendkívüli jelentőséggel bír a földtani felépítés pontos ismerete és annak a modellben való szerepeltetése. Szimulációk segítségével bebizonyítottam, hogy a feküből kiemelkedő 30 cm vastag agyag lencse a vizsgált mennyiségű (1 m^3) önálló fázisú szennyezőanyag közel 100%-át képes visszatartani.
4. Többfázisú UTCHEM szimulációk segítségével megvizsgáltam a valóságban gyakran előforduló ferde rétegzettségű összletek esetében a különböző magasságú agyaglencsék szennyeződés-terjedéssel kapcsolatos visszatartási határfokát. Ferde feküik esetében az agyaglencsék speciális szennyeződésekkel kapcsolatos

- visszatartási határfoka homogén anizotróp közegben 1° , 3° és 5° -os ferdeségnél is exponenciális egyenlettel közelíthető.
5. A speciális szennyezőanyagok többfázisú transzport-folyamatainak pontosítása érdekében egy az olajipar számára kifejlesztett, egyszerű kiszorítási kísérleten alapuló relatív permeabilitás meghatározási módszert adaptáltam és alkalmaztam. Ezzel a környezetvédelmi célú alkalmazással a numerikus szimulációk megbízhatósága növelhető, amely hatással van a szennyezett területek kármentesítésének tervezésére és kivitelezésére.
 6. Szimulációs vizsgálatokkal bebizonyítottam, hogy a sztochasztikus modellezés alkalmazása jelentős mértékben elősegítheti a kis területeken végzett tényfeltárások során kapott eredmények nagyobb térrészre történő kiterjesztését. Megállapítottam, hogy a SEAM3D modul és a hozzá kapcsolódó sztochasztikus modellezés az oldott fázisú DNAPL szennyezőanyagok modellezésére hatékonyan alkalmazható, amely nagy segítséget nyújthat a humán kockázat értékelések elkészítésénél.

9. Summary

Nowadays one of the most important questions of environmental protection is the elimination of inherited industrial and mining related contaminations. This kind of contaminations can happen in some areas now and in the future. It is therefore especially important for a better understanding the transport processes of specific pollutants (eg, DNAPL chlorinated hydrocarbons), since the development of reliable simulation can only lead to an efficient clean-up procedures. The primary objective of this dissertation is to better acquaint the diffusion processes of the DNAPL -type impurities with UTCHEM and SEAM3D modules of GMS software. The use of high-level numerical simulations is now useful and important ingredient of the hydrogeological research, however, an essential foundation for appropriate professional decision.

My new research results and findings contained in the following theses:

1. The hydraulic characteristics of multi-level screened wells can be described reasonable accuracy even for complex hydrogeological situations as well with the use of MODFLOW program MNW module. The simulate of pollution and remediation processes is clarified reliably by accurate knowing of hydraulic behavior of multi-level screened wells.
2. The module SEEP2D effectively used for examine hydrodynamic properties of dam reservoirs and filling storing specific pollutants which were proved in case studies. The SEEP2D module allows the description of leakage mechanism the density greater than water fluids.
3. The specific contaminants retention efficiency of clay lens was modeled by UTCHEM module for the horizontal layers of bedrock. It has shown that it has a particular importance of detailed knowledge of the geological structure and inclusion into the model in simulation of DNAPL type pollutants transport processes. Simulations have proven that a 30 cm thick clay lenses that outstanding from the confining bed can be contained close to 100% of pollutants.
4. It has been examined by UTCHEM multiphase simulations the contamination retention efficiency of clay lenses with different heights in case often occurring in reality. For specific contaminants in oblique footwall the retention efficiency for clay lenses in homogeneous anisotropic medium well approximated by an exponential equation in 1° , 3° and 5° angle.
5. In order to clarify the specific pollutant multiphase transport processes there was adapted and applied a method for determining relative permeability based on the oil industry. With this method the reliability of numerical simulations can be increased, which affects the plan and execute of remediation the contaminated sites.

6. Simulation studies have proven that the use of stochastic modeling can help significantly to obtain the results in actual excavations carried out in areas with large compartment extension. I has found that the SEAM3D module and the associated stochastic modeling, can be used effectively for modeling dissolved -phase DNAPL contaminants, which can provide great assistance in the preparation of human risk assessments.

10. Köszönetnyilvánítás

Ezúton szeretném köszönetemet kifejezni témavezetőmnek **Prof. Dr. Szűcs Péter**nek a sok támogatásért, tanácsért és tudásért, amit átadott nekem.

Köszönöm azok munkáját, akiknek a segítsége nélkül nem tudtam volna elkészíteni dolgozatomat:

- **Dr. Kovács Balázs**nak, **Dr. Madarász Tamás**nak és **Kolencsikné Tóth Andreának** a dolgozathoz tett hasznos és építő megjegyzéseikért.
- Köszönöm a támogatást és a segítséget a Környezetgazdálkodási Intézet valamennyi dolgozójának.
- Utoljára, de nem utolsó sorban köszönöm családomnak a megértést és a türelmet.

A kutatás a TÁMOP 4.2.4.A/2-11-1-2012-0001 azonosító számú Nemzeti Kiválóság Program Hazai hallgatói, illetve kutatói személyi támogatást biztosító rendszer kidolgozása és működtetése országos program című kiemelt projekt által nyújtott személyi támogatással valósult meg. A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.

A kutatáshoz az eszközök és infrastruktúra támogatásával a Miskolci Egyetemen működő Fenntartható Természeti Erőforrás Gazdálkodás Kiválósági Központ TÁMOP-4.2.2/A-11/1-KONV-2012-0049 jelű „KÚTFŐ” projektje járult hozzá, amely az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.

Felhasznált irodalom

- Atkins, P. W. (2002.):* Fizikai kémia I. kötet, Nemzeti Tankönyvkiadó Rt, Budapest, pp. 198-221.
- ATSDR (Agency for Toxic Substances and Disease Registry - Division of Toxicology and Environmental Medicine) (2011.):* Addendum to the toxicological profile for polychlorinated biphenyls, Atlanta, pp. 1-44.
- Aquaveo (2011.):* MODFLOW – Stochastic Modeling, Parameter Randomization, GMS tutorials
- Barótfi I. (2000.):* Környezettechnika, Mezőgazda kiadó, Budapest.
- Bear, J., Cheng, A. H.-D. (2010.):* Modeling Groundwater Flow and Contaminant Transport, Theory and Applications of Transport in Porous Media, Vol. 23., Springer, ISBN 978-1-4020-6681-8, pp. 251-593.
- Bedient, P. B., Rifai, H. S., Newell, C. J. (1999.):* Ground Water Contamination: Transport and Remediation. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, ISBN 978-0130138408.
- Berecz E. (1980):* Fizikai kémia, Tankönyvkiadó, Budapest, ISBN 963 17 4892 8, pp 213-306.
- Berecz E. (1991.):* Kémia Műszakiaknak, Nemzeti Tankönyvkiadó Rt., ISBN: 9631884589, Budapest, pp. 488-557.
- Berkowitz, B., Dror, I., Yaron, B. (2008):* Contaminant Geochemistry - Interactions and Transport in the Subsurface Environment. Springer-Verlag, Berlin, e-ISBN: 978-3-540-74382-8, pp 83-242.
- Bhuyan, D., Lake, L.W., and Pope, G.A. (1990.):* Mathematical Modelling of High-pH Chemical Flooding, *SPE Reservoir Engineering*, May pp. 213-220.
- Bódi T, Tóth J., Szűcs P., Civan F. (2005):* Fluidumcsere radiális áramlási rendszerben. In: XXVI. Nemzetközi Olaj- és Gázipari Konferencia és Kiállítás. Konferencia helye, ideje: Tihany, Magyarország, 2005.09.22-2005.09.24. Budapest: OMBKE, pp. 1-37.
- Center for Petroleum and Geosystems Engineering (2000.)/a:* Technical Documentation for UTCHEM - A Three-Dimensional Chemical Flood Simulator. The University of Texas at Austin, USA.
- Center for Petroleum and Geosystems Engineering (2000.)/b:* User's Guide for UTCHEM - A Three-Dimensional Chemical Flood Simulator. The University of Texas at Austin, USA.
- Cohen, R. M., and Mercer, J. W., (1993.):* DNAPL Site Evaluation. C.K. Smoley-CRC Press, Boca Raton, Fla.

- Compère F., Porel G., Delay F. (2001):* Transport and retention of clay particles in saturated porous media. Influence of ionic strength and pore velocity, *Journal of Contaminant Hydrology* Volume 49, Issues 1–2, May 2001, pp. 1–21
- Dane, J. H., Oostrom, M., Missildine, B. C. (1994):* Determination of Capillary Pressure-Saturation Curves Involving TCE, Water and Air for a Sand and a Sandy Clay Loam, Project Summary, U. S. Environmental Protection Agency, EPA/600/SR-94/005, pp. 1-10.
- Delin, G.N., Essaid H.I., Cozzarelli I.M., Lahvis M.H., and Bekins B.A., (1998.):*Ground Water Contamination by Crude Oil near Bemidji, Minnesota. USGS Fact Sheet 084-98.
- De Roos, A. M., Hartge, P., Lubin, J.H., et al. (2005.):* Persistent organochlorine chemicals in plasma and risk of non-Hodgkin's lymphoma. *Cancer Res* 65(23):11214-226.
- Einarson, M. D., Cherry, J. A. (2002):*A New Multi-Level Ground Water Monitoring System Utilizing Multi-Channel Tubing. *Ground Water Monitoring & Remediation*, Vol. 22 (4), pp 52–65.
- Engineering Computer Graphics Laboratory (1998):* Groundwater Modelling System. The Department of Defense, Brigham Young University, Utah, USA.
- Faur K. B., Szabó I. (2011):* Geotechnika. Miskolci Egyetem, Műszaki Földtudományi Kar, Digitális Tankönyvtár, www.tankonyvtar.hu
- Filep Gy., Kovács B., Szabó I. (1999.):* A káros anyagok reakciói a hulladékot befogadó kőzetekkel, MÁFI tanulmánykötet.
- Filep Gy., Kovács B., Lakatos J., Madrász T., Szabó I. (2002.):* Szennyezett területek kármentesítése, Miskolci Egyetemi kiadó.
- Furka Á. (1988.):* Szerves Kémia, Nemzeti Tankönyvkiadó Rt., ISBN: 963-1927849, Budapest, pp. 335-390.
- Gondi F., Halmóczy Sz., Liebe P., Szabó I., Szarka A. (2003.):* Kármentesítési útmutató 6. – Feltárás és Monitoring, Környezetvédelmi és Vízügyi Minisztérium, Budapest, ISBN: 963 0344 08 4
- Gondi F., Halmóczy Sz. (2008.):* A környezeti kockázatok azonosítása és az új diagnosztikai eljárások a felszín alatti szennyeződések vizsgálatában: a MIP, ROST (LIF) módszerek alkalmazása. XV. Konferencia a felszín alatti vizekről, Balatonfüred, 2008. március 26-27.
- Gondi F., Halmóczy Sz. (2010.):* Korszerű in situ kármentesítési technológiák szűrése, mint a műszaki beavatkozás előkészítő lépése – egy klórozott szénhidrogénnel szennyezett területre vonatkozó esettanulmány, Magyar Hidrológiai Társaság XXVIII. Országos Vándorgyűlés, Sopron, 2010. július 7-9.

- Grant, G. P., Gerhard, J. I., Kueper, B. H. (2004.):* The influence of relative permeability heterogeneity on DNAPL releases. Bringing Groundwater Quality Research to the Watershed Scale (Proceedings of GQ2004, the 4th International Groundwater Quality Conference, held at Waterloo, Canada, July 2004). IAHS Publ. 297, pp. 148-155.
- Halmóczy Sz., Gondi F. (2010.):* Klórozott szénhidrogénekkal szennyezett területek kármentesítése korszerű technológiákkal – A laboratóriumi kísérletektől a terepi alkalmazásig vezető út, Magyar Hidrológiai Társaság XXVIII. Országos Vándorgyűlés, Sopron, 2010. július 7-9.
- Hardell, L., Andersson, S. O., Carlberg, M., et al. (2006.):* Adipose tissue concentrations of persistent organic pollutants and the risk of prostate cancer. *J Occup Environ Med*, Vol. 48(7), pp. 700–07.
- Herrling, B., Bärman, W., Stamm, J., Schoen, M. (1990):* UVB technique for in-situ remediation of strippable contaminants: operation and dimensioning of the well. Proc. of ENVIROTECH VIENNA 1990 (2nd Int. ISEP Congress) "Current Problems in Hazardous Waste Management and Contaminated Sites", Vienna, Austria, October 23-25, 1990, ed. by W. Pillmann u. K. Zim, A. Riegelmik Printers, pp. 631-640.
- Internet_1:* <http://www.eurochlor.org> (letöltés ideje. 2011. 05.14)
- Internet_2:* <http://ntp.niehs.nih.gov/> (letöltés ideje. 2011. 07.14)
- Internet_3:* <http://www.atsdr.cdc.gov/> (letöltés ideje. 2011. 07.15)
- Internet_4:* <http://www.inchem.org/> (letöltés ideje. 2011. 07.14)
- Internet_5:* <http://toxnet.nlm.nih.gov/> (letöltés ideje. 2011. 07.15)
- Internet_6:* www.flut.com (letöltés ideje. 2012. 03.10)
- Internet_7:* <http://enfo.agt.bme.hu/drupal/keptar/6527>
- Internet_8:* (letöltés ideje. 2013. 04. 25)
- Internet_9:* <http://www.geo-engineering.hu/files/images> (letöltés ideje. 2013. 04. 25)
- Istok, J. (1989):* Groundwater Modeling by the Finite Element Method. American Geophysical Union, Water Resources Monograph, Vol. 13.
- ITRC (The Interstate Technology & Regulatory Council) (2003.):* An Introduction to Characterizing Sites Contaminated with DNAPLs, Copyright 2003 Interstate Technology & Regulatory Council.
- ITRC (The Interstate Technology & Regulatory Council) (2004.):* Strategies for Monitoring the Performance of DNAPL Source Zone Remedies, Copyright 2004 Interstate Technology & Regulatory Council.
- Jan, J., Sovcikova, E., Kocan, A., et al. (2007.):* Developmental dental defects in children exposed to PCBs in eastern Slovakia. *Chemosphere* 67(9):S350–54.

- Jan J., Vrbic V. (2000.): Polychlorinated biphenyls cause developmental enamel defects in children. *Caries Res.*34 (6):469-473.
- Konikow, L.F., Hornberger, G.Z., Halford, K.J., and Hanson, R.T., (2009): Revised multi-node well (MNW2) package for MODFLOW ground-water flow model: U.S. Geological Survey Techniques and Methods 6–A30, pp. 67
- Kovács B. (1998.): Szennyezőanyag-terjedési számítások környezetvédelmi alkalmazásai, kézirat, PhD értekezés, Miskolc.
- Kovács B. (2004): Hidrodinamika és transzportmodellezés I. Miskolc ISBN: 963-661-637.
- Kueper, B. H., Davies, K. L. (2009.): Assessment and Delineation of DNAPL Source Zones at Hazardous Waste Sites, USEPA, Ground Water Issue, EPA/600/R-09/119, pp. 1-20.
- Kueper, B.H., McWhorter, D.B., (1991.): The behaviour of dense, non-aqueous phase liquids in fractured clay and rock. *Journal of Ground Water*, Vol. 29, Issue. 5, pp. 716-728.
- Kueper, B.H., Wealthall, G.P., Smith, J.W.N., Leharne, S.A., Lerner, D.N. (2003.): An illustrated handbook of DNAPL transport and fate in the subsurface; *Environment Agency*, R&D Publication 133, ISBN:1844320669, pp.1-63.
- Kuratsune, M. (1989.):Yusho, with reference to Yu-Cheng. In: Kimbrough RD, Jensen AA, eds. Halogenated biphenyls, terphenyls, naphthalenes, dibenzodioxins and related products. 2nd ed. Amsterdam, The Netherlands: Elsevier Science Publishers, pp. 381-400.
- KvVM (Környezetvédelmi és Vízügyi Minisztérium) (2010): Kármentesítési kézikönyv 5. - Bioremediáció: mikrobiológiai kármentesítési eljárások. pp 1-85.
- Laurer J. (2007.): Talajvédelem, Pécsi Egyetem, Pollack Mihály Műszaki és Informatikai kar, digitális oktatási segédlet.
- Longino, B. L., Kueper, B. H. (1999): Nonwetting phase retention and mobilization in rock fractures, *Water Resour. Res.*, Vol. 35(7), pp. 2085–2093.
- Makó A., Hernádi H. (2012.): Kőolaj származékok a talajban: talajfizikai kutatások. Pannon Egyetem Georgikon Kar, Keszthely, ISBN 978-615-5044-62-5, pp1-333.
- Markóné Dr. Monostory B. (2001.): Halogénezett szénhidrogének a talajban és a talajvízben. Környezetvédelmi füzetek, Budapest pp. 1-52.
- Marton Lajos (2009.): Alkalmazott hidrogeológia, ELTE – Eötvös Kiadó, Budapest, ISBN 978963 284 054 3, pp. 119-193.
- Mercer, J. W., Cohen, R. M. (1996.):A review of immiscible fluids in the subsurface: properties, models, characterization and remediation. *Journal of Contaminant Hydrogeology*, Vol. 6, pp. 107-163.

- Montgomery, J. H. (2007.):* Groundwater chemicals desk reference - 4th ed. CRC Press Taylor & Francis Group, New York, ISBN 978-0-8493-9276-4, pp 1-1701.
- Naidu, R. (2008.):* Chemical bioavailability, Elsevier – Developments in soil science, vol 32., ISBN 978-0-444-52169-9, pp. 191.
- Newell, C. J., Acree S. D., Ross R. R., and Huling S. G. (1995.):* Light Nonaqueous Phase Liquids, Ground Water Issue, US EPA, EPA/540/S-95/500; pp. 1-28.
- Nielsen, D. M. (2006.):* Practical handbook of environmental site characterization and ground-water monitoring. Second Edition, Taylor&Francis, CRC press, ISBN 1-56670-589-4, pp. 1-1318.
- Nielsen, D. M., Nielsen, G. L. (2007.):* The Essential Handbook of Ground-Water Sampling. Second Edition, Taylor&Francis, CRC press, ISBN 1-4200-4278-5, pp. 1-309.
- Pankow, J. F., and Cherry, J. A. (1996.):*, Dense Chlorinated Solvents and other DNAPLs in Groundwater, Portland, OR, Waterloo Press, 1996.
- Pitkin, S. E., Cherry, J. A., Ingleton, R. A., Broholm, M., (1999.):* Field Demonstrations Using the Waterloo Ground Water Profiler; Ground Water Monitoring & Remediation, Vol. 19, Issue 2, pp. 122–131.
- Plank Zs., Neduczka B., Szucs P., Madarasz T., Halmoczky Sz. (2007.):* Non-invsive geophysical methods in environmental diagnostics of contaminated sites. EAGE (European Association of Geoscientists and Engineers) 69th Conference and Exhibition – London, UK, pp. 1-5.
- Plank Zs., Szűcs P., Madarász T., Neduczka B. (2011):* Interdisciplinary Characterization of Subsurface Hydrocarbon Contamination on a Test Site in Hungary. Acta Geodaetica et Geophysica Hungarica, Vol. 46 (4), pp. 457-470.
- Poehls, D.J. and Smith, G. J. (2009):* Encyclopedic Dictionary of Hydrogeology. Elsevier, Academic Press, ISBN: 978-0-12-558690-0, pp. 1-517.
- Pokorádi László, Molnár Boglárka (2011.):* A Monte-Carlo szimuláció szemléltetése, Szolnoki Tudományos Közlemények XIV
- Pope, G. A., Nelson, R. C. (1978.):* A Chemical Flooding Compositional Simulator, Society of Petroleum Engineers Journal, Vol. 18, pp. 339-354.
- Putzlocher, R., Kueper, B. H., Reynolds, D. A. (2006):* Relative velocities of DNAPL and aqueous phase plume migration, Journal of Contaminant Hydrology, Elsevier, Vol. 88., pp. 321–336.
- Reynolds, D. A., Kueper, B. H. (2001.):* Multiphase flow and transport in fractured clay/sand sequences, Journal of Contaminant Hydrology, Elsevier, Vol. 51., pp.41–62.

- Robertson, P. K., Cabal, K.L., (2010.):* Guide to Cone Penetration Testing for Geotechnical Engineering, 4th Edition, Gregg Drilling & Testing, Inc., California, pp. 1-138.
- Rignell-Hydbom, A., Rylander, L., Hagmar, L. (2007.):* Exposure to persistent organochlorine pollutants and type 2 diabetes mellitus. *Hum Exp Toxicol* 26(5):447–452.
- Rogan, W. J. (1989.):Yu-Cheng.* In: Kimbrough RD, Jensen AA, eds. Halogenated biphenyls, terphenyls, naphthalenes, dibenzodioxins and related products. 2nd ed. Amsterdam, The Netherlands: Elsevier Science Publishers, pp. 401-415.
- Schwille, F. (1981):* Groundwater pollution in porous media by fluids immiscible with water, Elsevier - Science of The Total Environment, Vol. 21, pp. 173–185.
- Shaw, D. J. (1986.):* Bevezetés a kolloid- és felületi kémiába. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, ISBN: 963-10-6435-2.
- Steenland, K., Hein M.J., Cassinelli R.T., et al. (2006.):* Polychlorinated biphenyls and neurodegenerative disease mortality in an occupational cohort. (Comment in *Epidemiology* 17(1):2–3) *Epidemiology* 17(1):8–13.
- Székely F. (2012.):* Evaluation of pumping induced flow in observation wells during aquifer testing. *Ground Water*, accepted for publication.
- Székely F., Al-Rashed M. (1996.):* Simulation of flow to multiscreened wells in heterogeneous layered formations. In: *Computational Methods in Water Resources XI, Volume 1, Computational Methods in Subsurface Flow and Transport Problems*, Computational Mechanics Publications Southampton Boston, pp. 671-678.
- Székely F., Senay Y., Al-Rashed M., Al-Sumait A., Al-Awadi E. (2000.):* Computer simulation of the hydraulic impact of water well fields in Kuwait. *Journal of Hydrology*, 235, Issues 3-4, pp. 205-220.
- Szűcs P., Sallai F., Zákányi B., Madarász T.(2009.):* Vízkészletvédelem. A vízminőségvédelem aktuális kérdései. Bíbor Kiadó, ISBN 978-963-9988-00-2, pp. 1-418.
- Szűcs P., Székely F., Zákányi B. (2011.):* Comparison of different simulation approaches in a multi-layer aquifer system.: *A Miskolci Egyetem Közleménye, A sorozat, Bányászat*, 81. kötet, VIII. Kárpát-medence Ásvány- és Gyógyvizei Konferencia, „Termálvíz-Borvíz-Egészség”, HU ISSN 1417-5398, Miskolci Egyetemi Kiadó.
- Szucs P., Szekely F., Zakanyi B. (2013):* Comparison of analytical and numerical approaches for simulating groundwater flow to multi screen wells. *Carpathian Journal of Earth and Environmental Sciences*, Publishd online at: 07. 03. 2013, Vol. 8, No. 2, pp. 69 – 76. (IF: 1.450).

- Tóth J, Bódi T., Szűcs P. (1999.):* Relatívpermeabilitás-függvény számítása kiszorítási kísérlet adataiból. In: OMBKE 24th International Petroleum Conference and Exhibition. Konferencia helye, ideje: Tihany, Magyarország, pp. 1-8.
- Toth, J., Bodi, T., Szucs, P., Civan, F. (1998):* Practical method for analysis of immiscible displacement in laboratory core tests. *Transport in Porous Media* Vol. 31., pp 347-363.
- Toth, J., Bodi, T., Szucs, P., Civan, F. (2002):* Convenient formulae for determination of relative permeability from unsteady-state fluid displacement in core plugs. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Vol. 36, pp. 33-44.
- Tóth J, Bódi T., Szűcs P., Civan F. (2006.):* Kútörzet diagnosztika vízkiszorítással művelt olajtelepeknél. In: Geofizikai – Földtani - Környezetvédelmi Vándorgyűlés és Kiállítás: Szellemi és földtani erőforrások a XXI. század elején. Konferencia helye, ideje: Zalakaros, Magyarország, pp. 1-24.
- Tóth J, Bódi T, Szűcs P, Civan F. (2008):* A kútörzet művelési állapotának vizsgálata vízkiszorítással működő olajtelepeknél. In: X. Székelyföldi geológus találkozó: Neogén-Kvarter vulkanizmus a Kelemen-Görgényi-Hargita vonulatban. Konferencia helye, ideje: Csíkszereda, Románia, Csíkszereda: Pro Geologia Egyesület, ISBN:973-87515-3-5, pp. 1-39.
- Tóth J, Bódi T, Szűcs P, Civan F. (2010.):* Determining Effective Fluid Saturation, Relative Permeability, Heterogeneity and Displacement Efficiency in Drainage Zones of Oil Well Producing Under Waterdrive. *Journal of Canadian Petroleum Technology* Vol. 49:(11), pp. 69-80.
- U.S. Department of Health and Human Services (2000.):* Toxicological profile for Polychlorinated Biphenyls (PCBs), Agency for Toxic Substances and Disease Registry (ATSDR), Atlanta, pp. 1-765.
- US EPA (1996.):* Soil Screening Guidance: Technical Background Document Table of Contents, Part 5 Chemical-Specific Parameters, EPA/540/R-95/128
- US EPA (2004.):* Site Characterization Technologies for DNAPL Investigations, EPA 542-R 04-017, pp. 1-165.
- Widdowson, M. A. (2002):* SEAM3D -Documentation and User's Guide, The Via Department of Civil and Environmental Engineering, Virginia Polytechnic Institute and State University, Blacksburg, Virginia, pp. 1-84.
- Wolfe, W. J., Haugh, C. J., Webbers, A., and Diehl, T. H. (1997.):* Preliminary Conceptual Models of the Occurrence, Fate, and Transport of Chlorinated Solvents in Karst Regions of Tennessee, U.S. Geological Survey, Water-Resources Investigations Report 97-4097, pp. 1-16.

- Zákányi B. (2006.): Az árvízvédelmi gátak és töltések szivárgásának meghatározási módszerei. Diplomamunka, Miskolc, pp 1-88.
- Zákányi B. (2007.): Gátszivárgás meghatározása SEEP2D modullal, IV. Nemzetközi Tudományos Konferencia a Kárpát-medence Ásványvizeiről, Miskolc, Egyetemi Kiadó 2007, HU ISSN 1417-5398, pp. 257-264.
- Zákányi B., Szűcs P. (2009): A GMS háromdimenziós hidrogeológiai modellező rendszer alkalmazási lehetőségei, microCAD 2009, pp. 43-48.
- Zákányi B., Szűcs P. (2010): Völgyzáró gát és árvízvédelmi töltések hidraulikai vizsgálata SEEP2D modullal, Hidrogeológiai Közlöny 90. évf. 4. szám, 2010. július-augusztus, pp. 54-62.
- Zákányi B. (2011): Klórozott szénhidrogének transzport-modellezési lehetőségei a GMS programban, Műszaki Tudomány az Észak-Kelet Magyarországi Régióban, Debreceni Akadémiai Bizottság Műszaki Szakbizottsága, Debrecen, ISBN 978-963-7064-25-8, pp. 441-446.
- Zákányi B., Nyiri G. (2011.):Árvízvédelmi töltések és általájának hidrodinamikai modellezése a SEEP2D modullal, VIII. Nemzetközi Tudományos Konferencia a Kárpát-medence Ásvány- és Gyógyvizeiről, Miskolc, Egyetemi Kiadó 2011, HU ISSN 1417-5398, pp. 271-276.
- Zakanyi B., Szucs P. (2012.): Opportunities in Increasing Reliability of DNAPL Transport Modeling. Paper 435. Annual IAH Conference in 2012., Niagara Falls, Kanada, pp. 100-105.
- Zákányi B., Szűcs Péter, Tóth Márton (2013): Sensitivity of DNAPL transport simulations concerning the relative permeability data, IAH Central European Groundwater Conference, Szeged, Mórahalom, ISBN:978-963-306-217-3, pp. 137-141.

Az értekezés témájában megjelent publikációim**2013**

1. **Zákányi B.**: Nem vizes fázisú, víznél sűrűbb szennyezőanyagok transzport-folyamatainak szimulációja felszín alatti közegben. In: Földtudományi Vándorgyűlés és Kiállítás: Föld- és Környezettudományok a fenntartható gazdaság érdekében. Konferencia helye, ideje: Veszprém, Magyarország, 2013.07.04-2013.07.06. Magyarhoni Földtani Társulat, ISBN:978-693-8221-50-6, 2013. pp. 64-69.
2. Szucs P, Virag M, **Zakanyi B**, Kompar L, Szanto J: Investigation and Water Management Aspects of a Hungarian-Ukrainian Transboundary Aquifer. Water Resources 40: (4) pp. 462-468. (2013)
3. Szucs P., Szekely F., **Zakanyi B**: Comparison of analytical and numerical approaches for simulating groundwater flow to multi screen wells. Carpathian Journal of Earth and Environmental Sciences 8:(2) pp. 69-76. (2013)
4. **B Zákányi**, P Szűcs, M Tóth: Sensitivity of DNAPL transport simulations concerning the relative permeability data. In: IAH Central European Groundwater Conference 2013. Mórahalom, Magyarország, 2013.05.08-2013.05.10. University of Szeged, 2013. ISBN:978-963-306-217-3, pp. 137-141.

2012

5. **Zákányi B.**, Szűcs P.: Transzport modellezés megbízhatóságának növelése DNAPL szennyezőanyagok esetén. Műszaki Tudomány az Észak-Kelet Magyarországi Régióban 2012 Konferencia. Szolnoki Főiskola, Szolnok, 2012. május 10. Konferencia kiadvány, Kiadja: Debreceni Akadémiai Bizottság Műszaki Szakbizottsága. ISBN 978-963-7064-28-9. Szerkesztette: Pokorádi László. HU ISSN 2060-7954, Debrecen 2012.
6. **Zakanyi B.**, Szucs P.: Opportunities in Increasing Reliability of DNAPL Transport Modeling. Paper 435. In: Annual IAH Conference in 2012. Niagara Falls, Kanada, 2012.09.26-2012.09.30. pp. 100-105.
7. **Zákányi B.**, Szűcs P.: Klórozott szénhidrogén szennyezések transzport folyamatainak modellezése SEAM3D és UTCHEM programkódok alkalmazásával. In: VIII. Kárpát-medencei Környezettudományi Konferencia. Veszprém, Magyarország, 2012.04.18-2012.04.21. (Pannon Egyetem Környezetmérnöki Intézet), Veszprém: Göttinger Kiadó, 2012. pp. ISBN:978-963-86627-2-9, pp.158-163.
8. **Zákányi B.**, Szűcs P., Nyiri G.: Esettanulmányok a Lázberci-víztározó és három szerkezetes árvízvédelmi gát és altalajának szivárgás-hidraulikai modellezésére.:

Műszaki Földtudományi Közlemények, Geotudományok: A Miskolci Egyetem közleménye: A sorozat, Bányászat 83, HU ISSN 1417-5398, pp. 277-287.

2011

9. Szűcs P, Székely F, **Zákányi B**: Comparison of different simulation approaches in a multi-layer aquifer system.: A Miskolci Egyetem Közleménye, A sorozat, Bányászat, 81. kötet, VIII. Kárpát-medence Ásvány- és Gyógyvizei Konferencia, „Termálvíz-Borvíz-Egészség”, HU ISSN 1417-5398, pp. 277-284.
10. Madarász T, Szűcs P, Lakatos J, Gombkötő I, Szántó J, Radeczky J, Trauer N, **Zákányi B**, Székely I: Új típusú PRB töltetek fejlesztése.: A Miskolci Egyetem Közleménye, A sorozat, Bányászat, 81. kötet, VIII. Kárpát-medence Ásvány- és Gyógyvizei Konferencia, „Termálvíz-Borvíz-Egészség”, HU ISSN 1417-5398, Miskolci Egyetemi Kiadó, pp. 401-410
11. **Zákányi B**: Speciális szennyeződések transzport-folyamatainak modellezési lehetőségei. IAH Magyar Nemzeti Tagozat, Előadás, Miskolc, 2011. 11. 11.
12. **Zákányi B.**, Szűcs P.: Modellezési kihívások a klórozott szénhidrogének felszín alatti transzport folyamatainak szimulációjában. In: VII. Kárpát-medencei Környezettudományi Konferencia 1-2. Kolozsvár, Románia, 2011.03.24-2011.03.27, Ábel Kiadó, pp. 629-633.
13. Madarász T, Szűcs P, Lakatos J, Gombkötő I, Szántó J, Radeczky J, Trauer N, **Zákányi B**, Székely I: Reaktív gátak komplex tervezése.: Multidiszciplináris Tudományok: A Miskolci Egyetem közleménye 1, ISSN 2062-9737, pp. 21-30.
14. **Zákányi B.**: Klórozott szénhidrogének transzport-modellezési lehetőségei a GMS programban. Multidiszciplináris Tudományok: A Miskolci Egyetem közleménye 1, ISSN 2062-9737, pp. 333-340.
15. Szűcs P., Virág M., Kompár L., **Zákányi B.**: A Magyar-Ukrán határtérség felszín alatti vízkészleteinek mennyiségi és minőségi kérdései.: Hulladékonline elektronikus folyóirat, ISSN 2062-9133, 2011, pp. 1-12.
16. Madarász T, Szűcs P, Lakatos J, Gombkötő I, Szántó J, Radeczky J, Trauer N, **Zákányi B**, Székely I: Újszerű reaktív gátak tervezése.: Műszaki Tudomány az Észak-Kelet Magyarországi Régióban 2011 Konferencia előadásai. Miskolci-Egyetem, 2011. május 18., Elektronikus Műszaki Füzetek, 9. kötet, Kiadja: MTA Debreceni Akadémiai Bizottság Műszaki Szakbizottsága. Szerkeszti: Prof. Dr. Pokorádi László. HU ISSN 2060-7954. pp. 1-10.
17. Madarász T, Szűcs P, Lakatos J, Szántó J, **Zákányi B**, Tóth R: PRB gátak működésének szimulációja hidrogeológiai modellezéssel. In: microCAD 2011, A

szekció: XXV. International Scientific Conference. Miskolc, Magyarország, 2011.03.31-2011.04.01. pp. 87-92.

2010

18. **Zákányi B**, Szűcs P: Völgyzáró gát és árvízvédelmi töltések hidraulikai vizsgálata SEEP2D modullal. Hidrológiai Közöny 90: (4), ISSN 0018-1323, pp. 54-62.
19. Szűcs P, Virág M, Csegény J, **Zákányi B**: Regionális hidrogeológiai modellezés a magyar-ukrán térségben. In: Mérnökgeológia-Közütechnika 2010, Műegyetemi Kiadó 2010, ISBN 978-963-313-001-8, pp. 29-34.
20. Szűcs P, Kovács B, Lénárt L, **Zákányi B**: Modellezési eljárások a felszín alatti vízkészletek mennyiségi és minőségi szolgálatában. Geotudományok: A Miskolci Egyetem közleménye: A sorozat, Bányászat 79, A Miskolci Egyetem Műszaki Földtudományi Kara 50 éve Miskolcon. HU ISSN 1417-5398, pp. 207-220.
21. Szűcs P, Virág M, Csegény J, **Zákányi B**, Szántó J: Határral osztott felszín alatti vízáadó komplex hidrogeológiai vizsgálata a magyar-ukrán térségben.: Szemelvények a geotermikus energia hasznosítás hidrogeológiai alkalmazásaiból. Tanulmánykötet, ISBN 978-963-06-9622-7. InnoGeo Kft., Szeged, pp. 129-141.
22. Szűcs P, Virág M, **Zákányi B**: A magyar-ukrán határtérség ásványvíz termelési lehetőségei. In: A Kárpát-medence ásványvizei: 7. Nemzetközi Tudományos Konferencia. Csíkszereda, Románia, 2010.08.27-2010.08.29. ISBN:978-973-7625-26-7, pp. 25-34.
23. Szűcs P, Madarász Tamás, **Zákányi B**, Szántó J: A kállósemjéni Nagymohos vízháztartási viszonyainak meghatározása hidrodinamikai modellezés, illetve terepi monitoring vizsgálatok segítségével.: Természetvédelmi és környezetvédelmi célú szakértői tanulmány. Megrendelő: Hortobágyi Nemzeti Park Igazgatósága. A kutatási jelentés készült a Miskolci Egyetemen. pp. 1-55.
24. Szűcs P, Madarász T, Szántó J, **Zákányi B**, Gonda N: A kállósemjéni Nagymohos vízháztartási viszonyainak meghatározása hidrodinamikai modellezés, illetve terepi monitoring vizsgálatok segítségével. microCAD 2010 A szekció: XXIV. International Scientific Conference, Miskolc, Magyarország, 2010.03.18-2010.03.20. ISBN:978 963 661 906 0, pp. 33-38.

2009

25. **Zákányi B**: A Groundwater Modeling System (GMS) alkalmazási lehetőségei a hidrogeológiában. In: XV. Nemzetközi Környezetvédelmi és Vidékfejlesztési Diákkonferencia, ISBN 978-963-06-87874-3, 2009. pp. 21. Előadás

26. **Zákányi B:** Zagytarozók vízháztartás vizsgálata a HELP modellel. In: XV. Nemzetközi Környezetvédelmi és Vidékfejlesztési Diákkonferencia, ISBN 978-963-06-87874-3, 2009. pp. 64. Poszter
27. **Zákányi B,** Mészáros R: Emulzióbontás új megvilágításban. In: XV. Nemzetközi Környezetvédelmi és Vidékfejlesztési Diákkonferencia, ISBN 978-963-06-87874-3, 2009. pp. 65. Poszter
28. **Zákányi B:** Víznél nehezebb sűrűségű szénhidrogén szennyezések transzportmodellezése. In: XL. Ifjú Szakaemberek Ankéntja, 2009, pp. 50.
29. **Zákányi B:** Hidraulikai modellezés alkalmazása víztározó gátjának vizsgálatára. In: XL. Ifjú Szakaemberek Ankéntja, 2009, pp. 49.
30. **Zákányi B,** Szűcs P: A GMS háromdimenziós hidrogeológiai modellező rendszer alkalmazási lehetőségei. microCAD 2009 A szekció: XXIII. International Scientific Conference, Miskolc, Magyarország, 2009.03.19-2009.03.20. ISBN:978-963-661-867-4. pp. 43-48.
31. Szűcs P, Madarász T, **Zákányi B,** Szántó J: Szennyeződésterjedés meghatározása geofizikai eljárások, valamint hidrodinamikai és transzport modellezés kombinációjával. microCAD 2009 A szekció: XXIII. International Scientific Conference, Miskolc, Magyarország, 2009.03.19-2009.03.20. ISBN:978-963-661-867-4, pp. 37-42
32. Szűcs P, Sallai F, **Zákányi B,** Madarász T: Vízkészletvédelem: A vízminőségvédelem aktuális kérdései. Miskolc: Bíbor Kiadó, 2009. ISBN:978-963-9988-00-2. Szakkönyv
33. Szűcs P, **Zákányi B,** Szántó J, Zsemle F: Repedezett hévíztárolók vezetőképességi viszonyinak meghatározása az ACE algoritmus alkalmazásával. In: Geotudományok: A Miskolci Egyetem közleménye: A sorozat, Bányászat 79, VI. Kárpát-medence Ásvány- és Gyógyvizei Konferencia, „Kutatás-felhasználás-védelem”, HU ISSN 1417-5398, Miskolci Egyetemi Kiadó, pp. 209-225.
34. Szűcs P, **Zákányi B,** Szántó J, Zsemle F: Repedezett geotermikus tárolók vezetőképességi viszonyainak meghatározása az ACE algoritmus segítségével. In: 15th Building Services, Mechanical and Building Industry Days, Debrecen, Magyarország, 2009.10.15-2009.10.16. ISBN:978-963-473-315-7, pp. 52-62.
35. Horne R N, Szucs P, **Zakanyi B:** Inferring Well-to-Well Connectivity Using Nonparametric Regression on Well Histories. In: Recent Innovations in Oil and Gas Recovery (Progress in Oilfield Chemistry; Vol. 8.), Budapest: Akadémiai Kiadó, 2009. ISBN:978 963 05 8719 8 pp. 247-258.

2008

36. **Zákányi B**, Szűcs P: Végeselemes hidraulikai modellezés alkalmazása árvízvédelmi gátaknál. In: IV. Kárpát-medencei Környezettudományi Konferencia I. kötet, Debrecen, Magyarország, 2008.03.28-2008.03.29. ISBN:978-963-06-4625-3, pp. 301-306.
37. **Zákányi B**: UTCHEM program alkalmazása szénhidrogén szennyeződések modellezésére. XIV. Nemzetközi Környezetvédelmi és Vidékfejlesztési Diákkonferencia, ISBN 978-963-06-87874-0-8, pp. 41.
38. **Zákányi B**: Lázberci-víztározó gátjának hidraulikai modellezése. XIV. Nemzetközi Környezetvédelmi és Vidékfejlesztési Diákkonferencia, ISBN 978-963-06-87874-0-8, pp. 100.
39. **Zákányi B**: Új környezetdiagnosztikai módszer speciális szénhidrogén szennyezések felmérésére. In: Környezet Reneszánsza a Tudományban és a Nevelésben Konferencia, Sopron, Magyarország, 2008.11.20-2008.11.21. ISBN:978-963-9883-15-4, pp. 45-46.
40. Szűcs P, Madarász T, **Zákányi B**, Tóth A, Nyári Zs, Neduczka B, Halmóczy Sz: Speciális felszín alatti szennyeződések roncsolásmentes vizsgálata. In: IV. Kárpát-medencei Környezettudományi Konferencia I. kötet, Debrecen, Magyarország, 2008.03.28-2008.03.29. ISBN:978-963-06-4625-3, pp. 295-300.
41. Szűcs P, **Zákányi B**: Végeselemes hidraulikai modellezés alkalmazása árvízvédelmi gátaknál. In: IV. Kárpát-medencei Környezettudományi Konferencia I. kötet, Debrecen, Magyarország, 2008.03.28-2008.03.29. ISBN:978-963-06-4625-3, pp. 301-306.
42. Szűcs P, Madarász T, **Zákányi B**, Tóth A, Nyári Zs, Neduczka B, Halmóczy Sz: Felszín alatti szénhidrogén szennyeződés modellezése Ásotthalom térségében. In: microCAD 2008: International Scientific Conference, Miskolc, Magyarország, 2008.03.20-2008.03.21. ISBN:978 963 661 812 4, pp. 63-68.

2007

43. **Zákányi B**, Tóth A: Transzport modellezés pontosítása geofizikai módszerek alkalmazásával. In: XIII. Nemzetközi Környezetvédelmi és Vidékfejlesztési Diákkonferencia, pp. 26.
44. **Zákányi B**, Szűcs P: Gátszivárgás meghatározása SEEP2D modullal. In: microCAD 2007, International Scientific Conference, University of Miskolc, March 22-23, 2007, Section B: , Water management and Environmental Protection. ISBN: 978-963-661-744-8, pp. 185-190.

45. **Zákányi B:** Esettanulmányok a gáttesten átszivárgó víz számítógépes modellezésére. In: XXVIII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia, Széchenyi István Egyetem Győr, ISBN 978-963-7175-32-9, Környezetvédelmi és Vízügyi Minisztérium különdíj, pp. 288.
46. **Zákányi B, Szűcs P, Lénárt L:** Árvízvédelmi gátak hidraulikai viszonyainak modellezése. In: IX. Bányászati, Kohászati és Földtani Konferencia, Buziásfürdő, 2007. március 29 – , április 1., EMT, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, pp. 286-291.
47. Szűcs P, Madarász T, **Zákányi B:** Hidrodinamikai és transzport modellezés alkalmazása a Berhida és Péterfürdő vízbázisok védelme érdekében. In: Geotudományok: A Miskolci Egyetem közleménye: A sorozat, Bányászat 72 „IV. Nemzetközi Tudományos Konferencia a Kárpát-medence Ásványvizeiről”, „Dr. Juhász József 80. születésnapjára”, pp. 209-219.
48. Szűcs P, **Zákányi B:** A leggyakoribb érték (MFV) módszerének alkalmazása a hidrogeológiai modellezésben. In: Mérnökgeológia-Közetmechanika 2007, Budapest, Magyarország, 2007.11.15. Budapest: Műegyetemi Kiadó, ISBN:978-963-420-933-1. pp. 161-174.
49. Szűcs Péter, Madarász Tamás, **Zákányi Balázs:** "Start" Modeling of Multifunctional Recharge Options for the Great-Forest Park in Debrecen. In: Smart Fields, Smart Wells and Smart Technologies (Progress in Oilfield Chemistry; 7.) Budapest: Akadémiai Kiadó, 2007. ISBN:978-963-058-550-7, pp. 245-252.

2006

50. Szűcs P, Tóth A, **Zákányi B, Madarász T:** Inverziós módszerek a hidrogeológiában. Magyar Geofizika 47:(4) pp. 169-172. (2006)

1. melléklet A leginkább előforduló és a 6/2009. (VI. 2.) KöM-EüM-FVM-KHVM együttes rendeletben legfőbb fizikai-kémiai tulajdonságai.

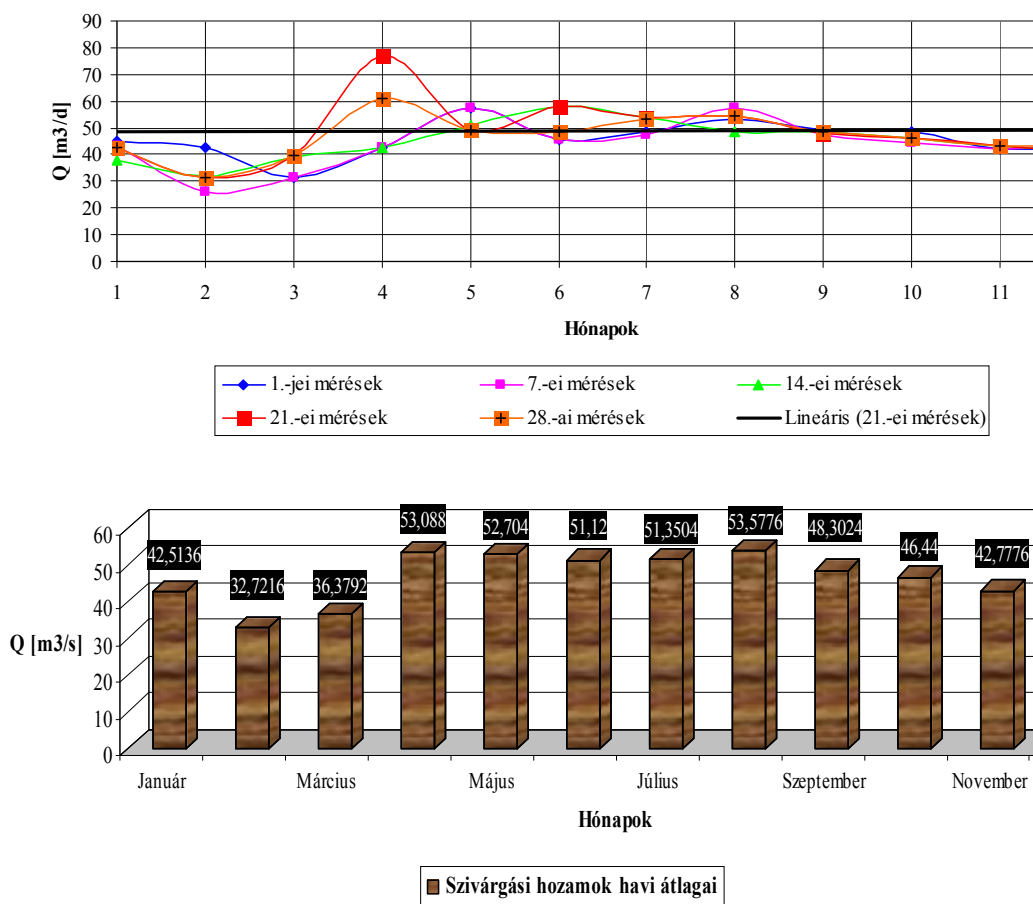
vegyület	CAS	molekulatömeg (g/mol)	oldhatóság vízben (mg/l)	sűrűség (kg/m ³)	gőznyomás (Pa 25°C)	viszkozitás (cP)	HLC (Henry's law constant) [atm·m ³ /mol 25°C]
triklór-etilén (TCE)	79-01-6	131.4	1100	1460	9000	0.57	0.020
tetraklór-etilén	127-18-4	165.8	200	1620	2600	0.9	0.018
szén-tetraklorid	56-23-5	153.8	790	1590	15000	0.97	0.094
kloroform	66-67-3	119.4	8000	1480	26000	0.56	0.003
klór-benzol	108-90-7	112.6	500	1110	1580	0.8	0.00358
1,1,1-triklór-etán	71-55-6	133.4	1500	1330	16000	0.84	0.008
1,1,2-triklór-etán	79-00-5	133.4	3500	1435	10000	1.69	0.00082
1,1,2,2-tetraklór-etán	79-34-5	167.86	2870	1600	600	1.7	0.000367
diklór-metán	75-09-2	84.94	13200	1325	53325	0.43	0.0025
1,1-diklór etán	75-34-3	98.97	5040	1174	30664	0.38	0.042
1,2-diklór-etán	107-06-2	98.96	8690	1230	8100	0.79	0.015
PCB 28	7012-37-5	257.54	0.26	n.a.	0.023	n.a.	0.00032
PCB 52	35693-99-3	291.98	0.19	1441	0.01	n.a.	0.00028
PCB 101	37680-73-2	326.43	0.031	1522	0.0024	n.a.	0.000319
PCB 118	31508-00-6	326.43	0.028	1522	0.00149	n.a.	0.00032
PCB 138	35065-28-2	360.9	0.0159	1593	0.0005	n.a.	0.000245
PCB 153	35065-27-1	360.88	0.0026	1593	0.00005	n.a.	0.000173
PCB 180	35065-29-3	395.3	0.00023	1658	0.000126	n.a.	0.000107
Aroclor 1221(PCB)	11104-28-2	188.66	0.2	1180	0.893	5	0.0035

(Forrás: ATSDR, 2011; Naidu R., 2008.; Montgomery, 2007.; Internet_2; Internet_3.; Internet_4.; Internet_5.; U.S. Department of Health and Human Services, 2003.; US EPA, 1996.; Kueper et al., 2003.)

2. melléklet A Lázberci-víztározó és gátjának adatai

Vízgyűjtőterület		
2004 évi felmérés	km ²	211.7
Elzárási szelvény	km	bán-patak 10+300
Vízmérce "0" pont	mBf	191.77
Min üzemvízszint	mBf (cm)	189.33 (-244)
Max üzemvízszint	mBf (cm)	200.83 (906)
Árapasztó küszöbszintje	mBf (cm)	200.83 (906)
Árvízi duzzasztási szint	mBf (cm)	201.63 (986)
Gát legnagyobb magassága	m	19.3
Gát hossza	m	250
Gát legnagyobb talpszélessége	m	126
Építéskori jellemzők		
Tározó térfogat		
min üzemvízszintnél	100m ³	417
max üzemvízszintnél	100m ³	6204
árvízi duzzasztási szintnél	100m ³	6853
Hasznos térfogat	100m ³	5880
Árvízi tározótérfogat	100m ³	649
Vízfelület min üzemvízszintnél	ha	18.6
Vízfelület max üzemvízszintnél	ha	87.3
Vízfelület árvízi duzzasztási szintnél	ha	92.2

3. melléklet A felső grafikonon a Lázbérci-víztározó gátjának szivárgó-rendszeren mért havi négy alsón a havi átlaghozamok láthatóak.



4. melléklet A relatív permeabilitási görbékből leolvasott és bevitt adatok az UTCHEM programba

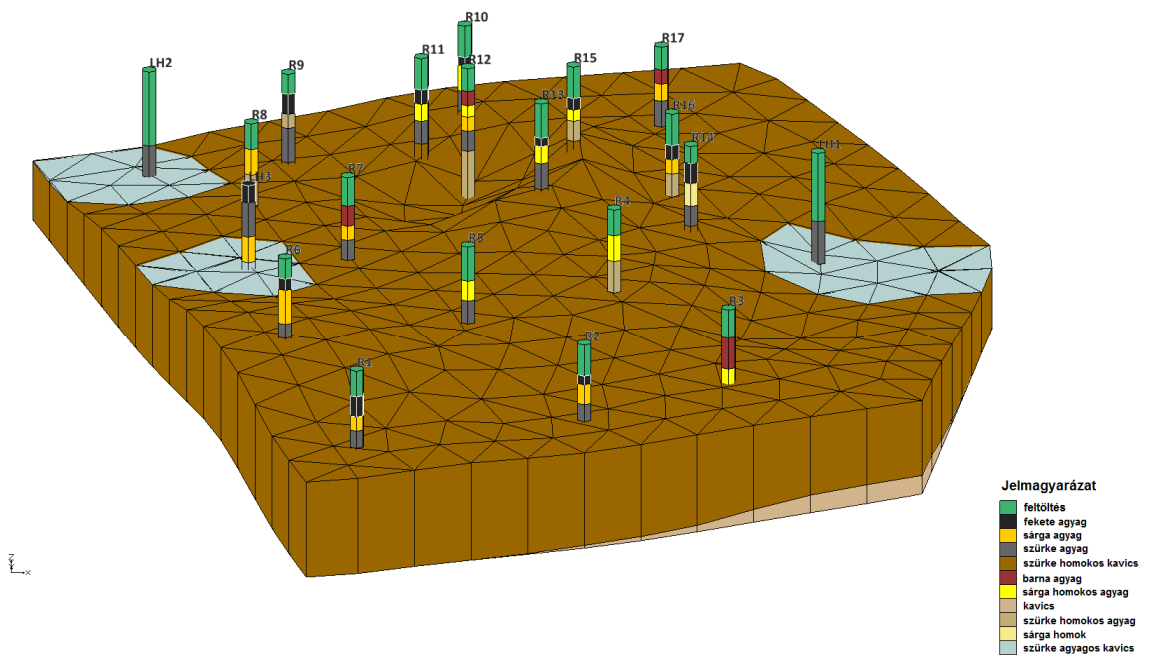
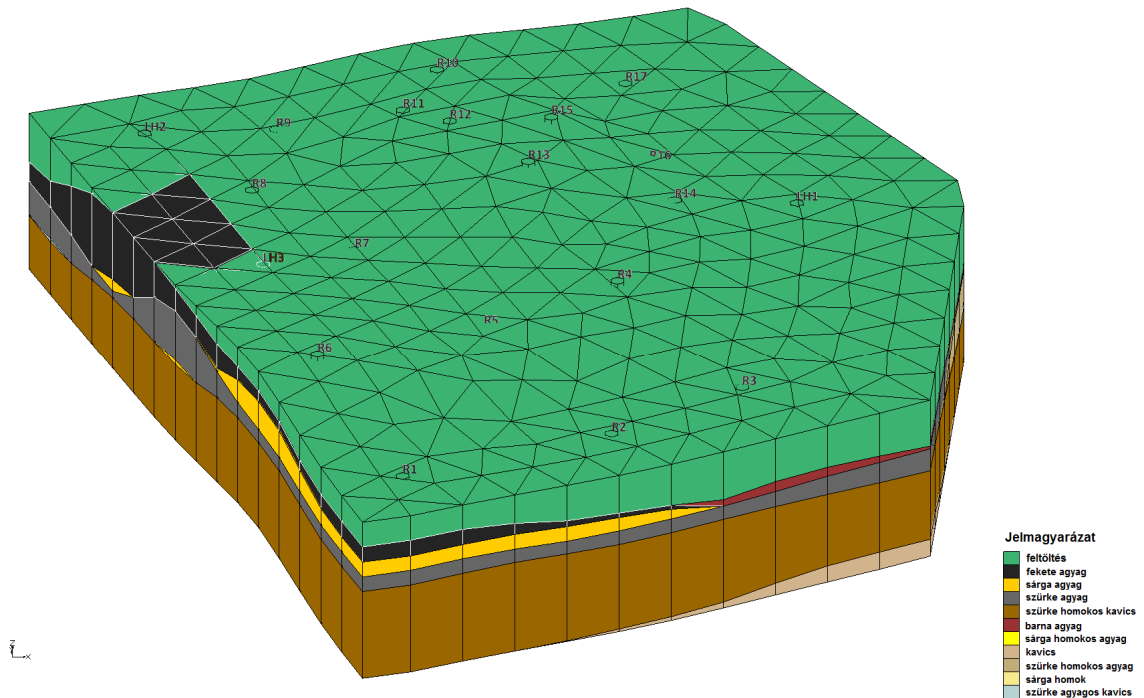
UTCHEM programba bevitt adatok származása	Vizes fázis		
	S_v (visszamaradó telítettség)	K_{rv}	S_{TCE} (visszamaradó telítettség)
Irodalmi adatokból	0.24	0.17	0
Fúrasi magon végzett kiszorítási kísérletek eredményeiből	0.1	0.4	0

5. melléklet A különböző relatív permeabilitási görbét figyelembe vevő szimulációk során kapott eredmények

IRODALMI ADATOKBÓL VETT RELATÍV PERMEABILITÁSI GÖRBÉK ADATAIBÓL					
	TCE koncentráció (µg/l)				
	Kárment. kezd.	60 nap múlva	120 nap múlva	180 nap múlva	240 nap múlva
Belépési pont alatt	253.329	56.375	54.25	49.637	37.862
Belépési ponttól 13 m-re	438.42	137.655	96.307	77.105	63.229
Belépési ponttól 20 m-re	374.593	163.319	107.577	84.926	70.158
Belépési ponttól 23 m-re	307.243	389.806	125.049	92.778	80.68
Belépési ponttól 26 m-re	0.158	604.054	537.306	169.081	136.072

FŰRÁSI MAGON VÉGZETT KISZORÍTÁSI KÍSÉRLETEK EREDMÉNYEIBŐL NYERT RELATÍV PERMEABILITÁSI ADATAIBÓL					
	TCE koncentráció (µg/l)				
	kármentesítés kezdetén	60 nap múlva	120 nap múlva	180 nap múlva	240 nap múlva
Belépési pont alatt	366.7	77.802	61.848	51.107	41.321
Belépési ponttól 13 m-re	465.7	176.455	101.973	82.521	69.509
Belépési ponttól 20 m-re	390.3	176.455	120.078	95.581	79.966
Belépési ponttól 23 m-re	300.8	187.91	125.705	101.273	84.646
Belépési ponttól 26 m-re	0.07	208.693	139.94	110.122	93.067

6. melléklet A tényfeltárás adataiból készített tömbszelvények. Az elsőn a teljes tömb, míg a másodikon csak a vízvezető rétegek és a feltárások helyei láthatók.



7. melléklet A sztochasztikus modellezés során a különböző futtatásokban alkalmazott k tényező értékek.

Zónák neve	1rétegK	1rétegB	2rétegK	2rétegB
Sztenderd deviancia	17.0	10.0	25.0	15.0
Átlagos k tényező érték (m/d)	17.28	8.64	17.28	8.64
Szegmensek száma	4	2	4	2
k tényező értékek a különböző futtatásokban				
Futtatás 1	2.631	2.694	2.768	1.018
Futtatás 2	2.397	1.572	2.983	1.083
Futtatás 3	2.824	0.910	1.955	2.748
Futtatás 4	3.124	0.971	2.515	2.429
Futtatás 5	1.772	1.842	2.206	2.868
Futtatás 6	1.176	5.641	2.258	4.922
Futtatás 7	2.697	1.540	2.323	1.214
Futtatás 8	2.409	4.708	2.518	5.155
Futtatás 9	1.196	1.809	1.256	4.236
Futtatás 10	1.919	1.627	2.912	5.010
Futtatás 11	1.240	1.207	1.187	2.566
Futtatás 12	1.580	4.878	2.214	1.885
Futtatás 13	1.267	4.865	1.765	1.154
Futtatás 14	1.780	1.356	1.712	1.319
Futtatás 15	1.243	3.343	1.351	2.043
Futtatás 16	3.115	1.687	1.001	2.932
Futtatás 17	4.046	5.445	4.488	1.460
Futtatás 18	8.263	0.929	6.126	4.054
Futtatás 19	3.257	4.618	5.469	1.029
Futtatás 20	7.605	1.673	5.464	2.070
Futtatás 21	3.455	1.229	9.051	1.290
Futtatás 22	4.642	0.898	7.559	1.303
Futtatás 23	5.132	2.509	9.874	1.978
Futtatás 24	4.155	1.307	4.451	0.938
Futtatás 25	7.098	2.828	3.397	2.977
Futtatás 26	5.618	5.902	9.435	1.692
Futtatás 27	5.916	3.614	4.843	4.431
Futtatás 28	8.784	2.914	5.240	4.748
Futtatás 29	7.891	1.086	8.293	5.638
Futtatás 30	3.809	4.934	4.553	5.133

Zónák neve	1rétegK	1rétegB	2rétegK	2rétegB
Futtatás 31	3.330	2.544	3.207	2.268
Futtatás 32	8.536	4.889	5.925	5.513
Futtatás 33	25.861	16.000	31.009	13.083
Futtatás 34	22.988	14.416	19.178	8.173
Futtatás 35	19.913	36.095	10.919	22.123
Futtatás 36	28.919	11.145	14.241	12.357
Futtatás 37	14.289	16.167	23.253	7.067
Futtatás 38	19.887	25.542	11.037	9.195
Futtatás 39	11.076	16.913	24.738	18.354
Futtatás 40	10.522	12.692	28.594	29.212
Futtatás 41	18.040	8.626	13.774	20.065
Futtatás 42	12.184	30.936	29.504	9.819
Futtatás 43	12.721	22.853	27.360	24.339
Futtatás 44	10.898	24.717	27.668	19.455
Futtatás 45	12.903	23.577	21.519	19.093
Futtatás 46	10.204	7.288	14.218	20.298
Futtatás 47	29.670	19.406	18.281	19.751
Futtatás 48	10.094	20.415	27.178	6.385
Futtatás 49	46.837	6.369	75.228	36.732
Futtatás 50	95.453	22.641	41.950	6.323
Futtatás 51	93.534	9.322	33.980	9.966
Futtatás 52	87.421	24.039	35.039	7.057
Futtatás 53	50.228	41.961	94.758	7.027
Futtatás 54	56.923	12.565	50.515	36.093
Futtatás 55	51.826	17.125	43.702	9.149
Futtatás 56	85.765	23.901	54.676	17.644
Futtatás 57	39.846	32.928	79.732	8.084
Futtatás 58	92.291	6.825	82.318	12.039
Futtatás 59	34.389	25.931	33.343	6.040
Futtatás 60	74.822	12.850	35.739	19.412
Futtatás 61	96.031	36.936	64.569	31.458
Futtatás 62	46.053	16.953	48.031	6.633
Futtatás 63	44.723	9.728	71.943	21.508
Futtatás 64	39.862	18.981	77.697	14.598