

Wojciech Balcerzak, Izabela Zimoch

Matematyczne modelowanie zmian jakości wód w zbiorniku zaporowym „Dobczyce”

Zastosowanie modelowania matematycznego do rozwiązywania zagadnień związanych z jakością wody pozwala zarówno na analizę zachodzących zjawisk i znalezienie występujących między nimi zależności, jak również na próbę przewidywania i ilościowego oszacowania skutków zmian w środowisku wodnym.

Jednym z programów służących do numerycznego rozwiązywania problemów związanych z jakością wody jest program WASP 4, w skład którego wchodzi podprogramy TOXI 4, EUTRO 4 i DYNHYD 4. Podstawowa wersja programu została opracowana w Agencji Ochrony Środowiska Stanów Zjednoczonych (USEPA) [1]. Program ten pozwala na modelowanie zjawisk transportu i przemian zanieczyszczeń zachodzących w wodach powierzchniowych, tj. potokach, rzekach, stawach, jeziorach czy zbiornikach zaporowych. Pozwala on na konstruowanie złożonych, segmentowych modeli jedno-, dwu- lub trójwymiarowych. Program WASP 4 składa się z procedur, które mogą być uzupełniane lub zmieniane według własnych potrzeb użytkownika, co pozwala na elastyczne operowanie programem, w zależności od skali złożoności rozwiązywanego zagadnienia. Podprogram EUTRO 4 pozwala na modelowanie zjawisk związanych z eutrofizacją wód, podprogram TOXI 4 rozwiązuje zagadnienia związane z zanieczyszczeniami chemicznymi wód powierzchniowych typu toksycznego, natomiast podprogram DYNHYD 4 dotyczy przepływów hydrodynamicznych.

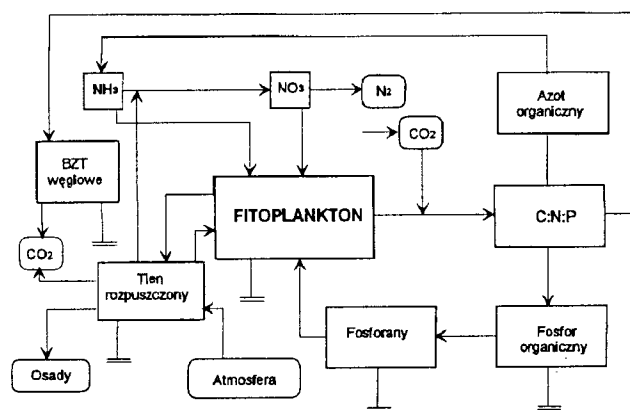
Opis programu EUTRO 4

Program EUTRO 4 pozwala na modelowanie oraz symulację transportu i przemian ośmiu parametrów jakości wód: azotu amonowego, azotu azotanowego, azotu organicznego, fosforanów, fosforu organicznego, tlenu rozpuszczonego, BZT₅ i chlorofilu. Powiązania między tymi zmiennymi opisuje kinetyka przemian fitoplanktonu. Model EUTRO 4 rozwiązuje zadany mu problem z cząstkowego równania różniczkowego bilansu masowego. Równanie to jest rozwiązywane metodami numerycznymi za pomocą elementów skończonych. Kinetyka przemian opisanych w modelu obejmuje sześć zróżnicowanych poziomów obliczeniowych:

- model Streetera-Phelpsa,
- zmodyfikowany model Streetera-Phelpsa,
- pełny liniowy bilans tlenu rozpuszczonego,
- model prostej kinetyki procesu eutrofizacji,

- model złożonej kinetyki procesu eutrofizacji,
- model złożonej kinetyki procesu eutrofizacji z uwzględnieniem oddziaływania bentosu.

Rysunek 1 obrazuje zależności pomiędzy obiegiem substancji biogenych i tlenu rozpuszczonego.



Rys. 1. Obieg substancji biogenych i tlenu rozpuszczonego

Teoretyczne podstawy modelu eutrofizacji

Analizowany model uwzględnia wszelkie możliwe sposoby wymiany masy składnika środowiska (transport adwekcyjny i dyspersyjny w słupie wody, źródła i odpływy poza badany układ, przemiany fizyczne, chemiczne i biologiczne). Modelowane środowisko dzielone jest na takie segmenty, aby były reprezentatywne dla badanego obszaru. Środowisko można podzielić w pionie, wzdłuż jak i wszerz. Stężenia składników środowiska (rozpatrywanych zmiennych) obliczane są dla wszystkich segmentów, natomiast szybkość transportu składników środowiska obliczana jest dla powierzchni granicznej pomiędzy sąsiadującymi segmentami. Dokonując podziału środowiska na segmenty można wyróżnić cztery różne ich rodzaje, tj. epilimnion, hipolimnion oraz górne i dolne warstwy bentosu.

W programie uwzględnione są dwa sposoby transportu substancji w środowisku, tj. adwekcja i dyspersja. Wyodrębniono następujące rodzaje transportu:

- transport w słupie wody (adwekcyjny przepływ wraz ze strumieniem wody oraz despersyjne mieszanie pomiędzy rejonami o dużym i małym stężeniu),
- ruch w warstwie osadu (przepływ wody i dyfuzja pomiędzy osadem i słupem wody),
- transport substancji na drodze sedymentacji i powtórnego zawieszenia w wodzie cząstek stałych (transport między warstwą wody i osadem; w zależności od potrzeb jako ciała stałe rozpatrywane są piasek, il, cząstki nieorganiczne i organiczne),

– transport na drodze parowania z powierzchni wód i osadzenia na jej powierzchni.

Przepływ adwekcyjny w słupie wody może być opisany bezpośrednio przez użytkownika lub określony plikiem SUMRY2.OUT, będącym wynikiem symulacji przepływów przy pomocy programu DYNHYD 4. Przy bezpośrednim opisie przepływu wykorzystuje się zależności Browna i Barnwella, wiążące prędkość przepływu, głębokość i szerokość strumienia oraz natężenie przepływu:

$$v = aQ^b \quad (1)$$

$$H = cQ^d \quad (2)$$

gdzie:

v – prędkość przepływu, m/s

H – wysokość strumienia, m

Q – natężenie przepływu, m^3/h

a – współczynnik prędkości

b – wykładnik prędkości (dla zbiorników zaporowych i jezior $b=0$)

c – współczynnik wysokości

d – wykładnik wysokości (dla zbiorników zaporowych i jezior $d=0$)

Dyspersja w słupie wody ma duże znaczenie, zwłaszcza dla zbiorników wodnych. Dla wymiany masy pomiędzy dwoma sąsiadującymi segmentami i -tym oraz j -tym przez powierzchnię A_{ij} przepływ wody wyraża się jako:

$$\partial M/\partial t = [(D_{ij}(t)A_{ij})/L_c](C_j - C_i) \quad (3)$$

gdzie:

M – masa wymianianego składnika, g

C – stężenie, g/m^3

D_{ij} – współczynnik dyspersji zależny od czasu, m^2/d

L_c – charakterystyczna długość mieszania

A_{ij} – powierzchnia wymiany, m^2

Wraz z przepływem wody w warstwie osadu przenoszone są także substancje rozpuszczone. Przepływ pomiędzy segmentami i -tym oraz j -tym wyraża się jako:

$$\partial M/\partial t = Q_{ij}f_{Dj}(C_j/n_j) \quad (4)$$

gdzie:

n_j – porowatość j -tego segmentu

Q_{ij} – natężenie przepływu, m^3/d

f_{Dj} – ułamek zawartości substancji rozpuszczonej w j -tym segmencie

Przepływ dyfuzyjny w warstwie osadu opisany jest następująco (dla wymian pomiędzy dwoma segmentami typu osadowego):

$$\partial M/\partial t = [(D_{ij}(t)A_{ijnj})/(L_c/n_{ij})][f_{Dj}(C_j/n_j) - f_{Di}(C_i/n_i)] \quad (5)$$

gdzie:

n_{ij} – średnia porowatość na powierzchni pomiędzy segmentami

L_c – długość charakterystyczna, równa odległości pomiędzy środkami dwóch segmentów typu osadowego, podzielona przez średnią porowatość segmentu (dla wymiany ze słupem wody jest to głębokość segmentu)

Innym możliwym sposobem transportu w rozpatrywanym modelu jest transport osadu, a wraz z nim transport zasorbowanych substancji. W modelu tym wyróżniono transport trzech różnych substancji stałych na drodze sedymentacji, wytrącania lub wyniku wymywania. Szybkości opadania, wytrącania i wymywania w słupie wody opisane są poprzez szybkość transportu i powierzchnie wymiany, co daje natężenie przepływu ciał stałych i związanych z nimi substancji chemicznych. Prędkość sedymentacji w ośrodku o gęstości ρ_p i lepkości μ obliczona jest

z zależności Stokesa dla ciała stałego o gęstości ρ_p i średnicy d_p :

$$v_s = [(8,64g)/(18\mu)](\rho_p\rho_w)d_p^2 \quad (6)$$

Dla wymiany osadu w bentosie przepływ netto jest wyrażony jako:

$$W_{Bs} = A_{ij}(w_{RSi} - w_{DSj}) \quad (7)$$

gdzie:

s – stężenie osadu w segmencie

w_D – prędkość wytrącania

w_R – prędkość wymywania

Prędkość wytrącania można obliczyć na podstawie prędkości sedymentacji:

$$w_d = v_s\alpha_D \quad (8)$$

gdzie:

α_D – prawdopodobieństwo wytrącenia cząstki po sedymentacji do warstwy osadu

Ostatnim rozpatrywanym sposobem transportu jest transport na drodze odparowania lub sedymentacji na powierzchni wody. Wielkość sedymentacji można opisać jako:

$$\partial M/\partial t = P_i(t)A_i(t)C_{oi}(t) \quad (9)$$

gdzie:

P_i – prędkość sedymentacji w i -tym segmencie

A_i – powierzchnia zewnętrzna i -tego segmentu

C_{oi} – stężenie substancji w opadzie

W wyniku odparowania objętość segmentu zmienia się z szybkością E , a co za tym idzie i stężenie zawartych w nim substancji, co jest opisane wzorem:

$$\partial V_i/\partial t = A_i[P_i(t) - E_i(t)] \quad (10)$$

Podsumowując powyższe rozważania całość transportu występującego w badanym obiekcie (jeziro, zbiornik, rzeka) można wyrazić za pomocą dwu równań (11) i (12):

♦ równania zmiany objętości poszczególnych segmentów:

$$\Delta V_j/\Delta t = \sum_i Q_{ij} + (P_j - E_j)A_j \quad (11)$$

gdzie kolejne wyrazy oznaczają: przepływ, sedymentację i odparowanie,

♦ równania wymiany masy rozpatrywanego składnika śródowiska, składającego się z następujących elementów:

– adwekcja w słupie wody i warstwie osadu:

$$\Delta(V_j C_j)/\Delta t = \sum_i (-Q_{ij}C_{ij}) + \sum_i (Q_{pij}C_{ij}f_{Dj}) +$$

– transport ciał stałych:

$$+ \sum_{i,s} (-w_{sij}A_{ij}C_{ij}f_{sj}) +$$

– dyspersja w słupie wody i warstwie osadu:

$$+ \sum (R_{ij}\Delta C_{ij}) + \sum [R_{pij}(f_{Dj}(C_j/n_j) - f_{Di}(C_i/n_i))] +$$

– ładunki punktowe, niepunktowe i graniczne:

$$+ \sum_L \Sigma W_{Lj} + \sum_N \Sigma W_{Nj} + \sum_B \Sigma (Q_{jo}C_{Bj}) +$$

– przemiany kinetyczne:

$$+ \sum_{k,c} \Sigma + (V_j S_{kcj}) \quad (12)$$

gdzie:

- j – numer segmentu
- i – numery segmentów granicznych
- s – indeks rodzaju transportu ciała stałego
- L, N – indeksy źródeł punktowych i niepunktowych
- B – indeks źródła na powierzchni granicznej segmentu
- k – indeks przemian kinetycznych
- c – indeks substancji chemicznej
- w_s – szybkość transportu ciała stałego
- f_{sj} – ułamek substancji zasorbowanej przez ciała stałe w j-tym segmencie
- R – przepływ dyspersyjny pomiędzy segmentami, $R=E(A/L_c)$
- E – współczynnik dyspersji
- R_p – dyfuzyjny przepływ przez warstwy, $R_p=EAn/L_c t$
- t – średni współczynnik labiryntowości
- W_L – punktowe źródła zanieczyszczenia w segmencie
- W_N – niepunktowe źródła zanieczyszczenia w segmencie
- S_k – szybkość przemian danej substancji w segmencie

Metodyka symulacji

Zbiornik zaporowy „Dobczyce” został wybudowany w latach 1984–1987 jako główny rezerwuuar wody dla Krakowa (gwarantowana ilość wody 3,5 m³/s). Jest to zbiornik zlokalizowany na górskiej rzece Raby. Obszar zlewni zajmuje około 768 km², w tym 45 km² stanowi zlewnia bezpośrednia, zróżnicowana pod względem wysokościowym. Dorzecze Raby powyżej zbiornika ma charakter rolniczo-rekreacyjny i charakteryzuje się dość intensywnym zagospodarowaniem rolniczym. Powierzchnia zbiornika przy maksymalnym piętrzeniu wynosi 1065 ha, pojemność całkowita 125 mln m³, a użytkowa 85 mln m³. Jest to zbiornik głęboki, o średniej głębokości 11 m (maks. 28 m). Woda w zbiorniku jest wymieniana 3,5-krotnie w ciągu roku. Właściwości fizyczno-chemiczne i biologiczne wody w zbiorniku rzutują na technologię i koszty jej uzdatniania oraz na parametry jakościowe wody do picia. Wody zbiornika podczas eutrofizacji nie nadają się do celów komunalnych, gdyż wykazują silne zabarwienie i przykry zapach. Bardzo trudne jest uzdatnianie tych wód, źle przebiega proces koagulacji, utrudniona jest filtracja. Dodatkowym niebezpieczeństwem jest możliwość wtórnego zanieczyszczenia wody. Prawidłową pracę zakładu wodociągowego umożliwić może system osłony, którego zadaniem będzie wykrywanie zwiększonych stężeń zanieczyszczeń biogenych i prognozowanie zmian jakości wody.

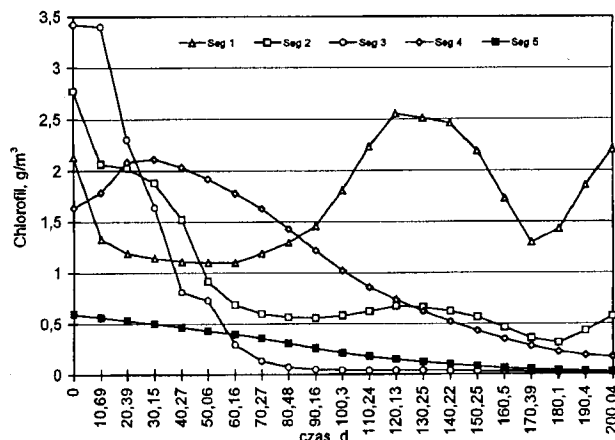
W celu sprawdzenia możliwości działania takiego systemu przeprowadzono próbę symulacji zmian jakości wody w zbiorniku „Dobczyce” z wykorzystaniem programu EUTRO 4. Symulacja procesu eutrofizacji wód zbiornika przeprowadzona została na czwartym poziomie obliczeń (model prostej eutrofizacji). Wartości wymaganych przez program danych kinetycznych przyjęto na podstawie literatury i danych przykładowych Agencji Ochrony Środowiska Stanów Zjednoczonych. Dane dotyczące kinetyki przemian biochemicznych i chemicznych przyjmują na ogół typowe wartości, które zostały uwzględnione w przedstawionych obliczeniach. Stężenia początkowe i brzegowe przyjęte zostały na podstawie wcześniejszych pomiarów własnych. Parametry środowiska przyjęto częściowo wg badań własnych (temperatura), a częściowo wg danych meteorologicznych odpowiednio uśrednionych (promieniowanie słoneczne i prędkość wiatru), a pozostałe wg wskazań źródłowych (współczynnik ekstynkcji).

Ze względu na złożoność modelu i wymagania numerycznej zbieżności podczas rozwiązywania równania bilansu mas, przyjęto prosty model przestrzenny i przepływowy, jako model obliczeniowy procesu symulacji. Do obliczeń zbiornik zaporowy został podzielony na pięć segmentów, tj. dwa segmenty powierzchniowe (1 i 3), dwa segmenty podpowierzchniowe (2 i 4) oraz jeden segment typu osadowego (5).

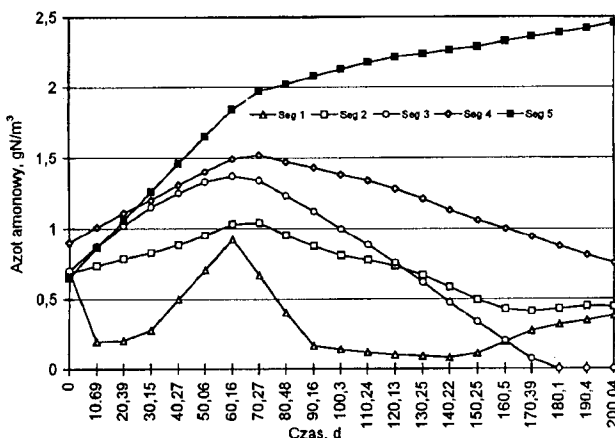
Założono, że przepływ adwekcyjny odbywa się pomiędzy segmentami 1 i 3, natomiast przepływ dyspersyjny, powodujący silne wymieszanie w słupie wody, występuje w pozostałych segmentach. Dla tak założonego modelu obliczeń przeprowadzono symulację dla pięciu zmiennych, tj. stężeń chlorofilu, azotu amonowego, azotu organicznego, fosforu organicznego i fosforanów (rys.2+6).

Dyskusja wyników

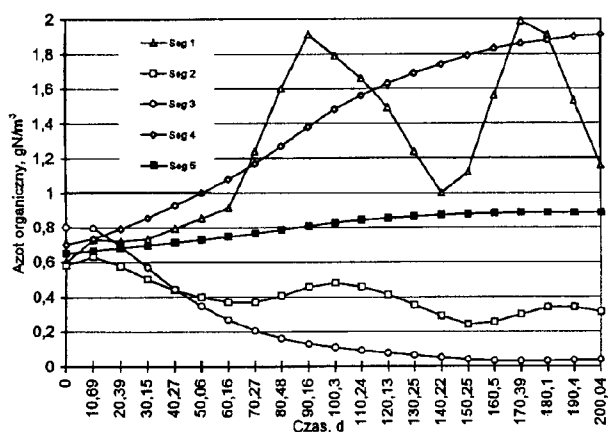
Podczas wykonywania obliczeń stwierdzono, że w przypadku większego skomplikowania struktury segmentowej i przepływowej pojawiała się niestabilność numeryczna algorytmu obliczeniowego przy wymaganym kroku obliczeń wynoszącym kilka dób. Ze względu na duże rozmiary segmentów program wymagałby bardzo długiego kroku obliczeniowego (kilkadziesiąt dób), co utrudniałoby śledzenie przemian zachodzących w zbiorniku, natomiast duża liczba segmentów wymagałaby wielogodzinnego wprowadzania danych do pliku wejściowego typu *.INP. Niedogodności te znacznie



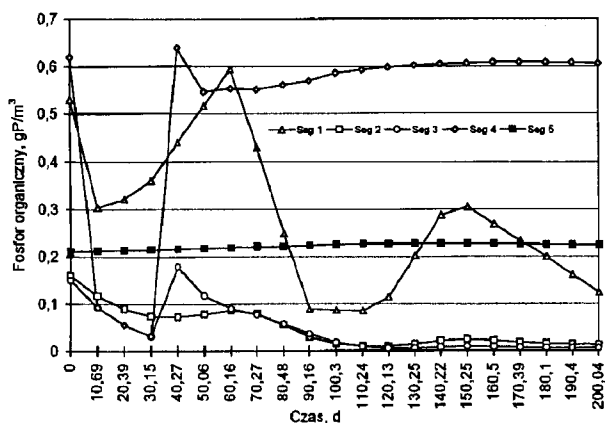
Rys. 2. Zmiany stężeń chlorofilu



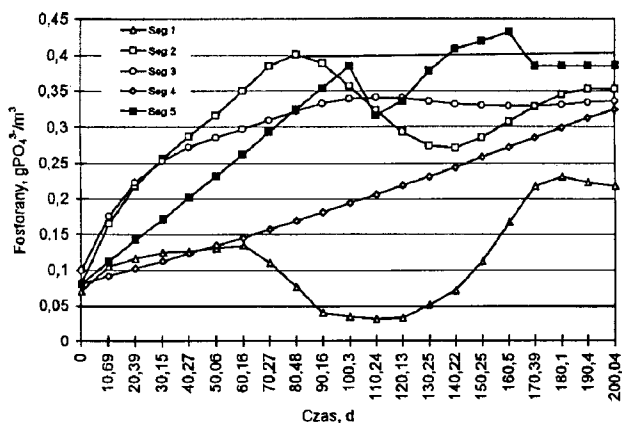
Rys. 3. Zmiany stężeń azotu amonowego



Rys. 4. Zmiany stężeń azotu organicznego



Rys. 5. Zmiany stężeń fosforu organicznego



Rys. 6. Zmiany stężeń fosforanów

utrudniały pracę z programem, dlatego też zdecydowano się na uproszczenie struktury podziału na segmenty zbiornika i występujących w nim przepływów. Pozwoliło to na próbę udzielenia odpowiedzi na następujące pytanie: czy program

WASP 4 może, przy takim uproszczeniu, dawać wyniki przydatne w praktyce? Pozytywna odpowiedź upoważnia do dalszych prób, mających na celu przyjęcie struktury przepływu i segmentacji bardziej złożonej i dokładniej oddającej rzeczywistość, nie powodującej jednak trudności uniemożliwiających korzystanie z programu.

Analizując podejmowane próby ominięcia trudności numerycznych stwierdzono, że wskazane byłoby dokładne modelowanie przepływu w zbiorniku za pomocą programu DYNHYD, przy zastosowaniu dość prostej struktury podziału na segmenty (do 20 segmentów). Pozwoliłoby to na prowadzenie obliczeń z wystarczającą szybkością i dokładnością.

Wnioski

♦ W wyniku przeprowadzonych prac przeanalizowano zasadę działania, możliwości i zakres zastosowania programu obliczeniowego WASP 4, który zaadaptowano do warunków krajowych, opracowując sposób wprowadzania danych do modelu symulacji procesu eutrofizacji (EUTRO 4).

♦ W oparciu o program WASP 4 przeprowadzono symulację komputerową zmian stężeń pięciu istotnych parametrów wpływających na przebieg procesu eutrofizacji (chlorofil, azot amonowy i organiczny, fosforany i fosfor organiczny). Uzyskane wyniki porównano z danymi rzeczywistymi, stwierdzając w większości wypadków dość znaczną zgodność pomiędzy tymi dwiema grupami danych, z czego wynika, że w oparciu o ten program możliwe będzie prognozowanie zmian jakości wody w zbiorniku zaporowym wynikających z przebiegu procesu eutrofizacji.

♦ Program WASP 4 jest programem złożonym, umożliwiającym długoterminowe prognozowanie zmian jakości wody. Wymaga on jednak dalszego dopracowania w celu uzyskania lepszej zgodności pomiędzy wynikami uzyskanymi w symulacji i wartościami rzeczywistymi. Zachęcające wyniki uzyskane podczas symulacji zmian jakości wód zbiornika „Dobczyce” pozwalają przypuszczać, że program ten może być w przyszłości użyteczny do opracowania prognoz zmian jakości wody w innych polskich zbiornikach wodnych.

LITERATURA

1. R. B. AMBROSE jr., P. E. TIM, A. WOOL, J. P. CONNOLLY, R. W. SCHANZ: WASP 4, a hydrodynamic and water quality model – Model theory, user's manual and programmer's guide. Environmental Research Laboratory Office of Research and Development, USEPA, 1988, Athens, Georgia.
2. W. BALCERZAK, R. WRÓBLEWSKI: Występowanie przemian i usuwanie wybranych mikrozanieczyszczeń z wód powierzchniowych. Inst. Zaop. w Wodę i Ochr. Środow. PK, Kraków 1991 (praca nie publikowana).

Mathematical Modelling of Water Quality Variations

The theoretical background to a eutrophication model and the computing program EUTRO 4 (based on that model) were characterized. With the eutrophication model and the EUTRO 4 scheme, concentration variations were simulated for some of

the water quality parameters which characterize the eutrophication process. The agreement between theoretical and measured results was promising. This indicates that the program will provide reliable predictions of water quality.