

## PROCEDURA KALIBRACJI WIELOPARAMETRYCZNEGO MODELU MIGRACJI ZNACZNIKÓW PRZEZ PRÓBKĘ GRUNTU

### THE CALIBRATION PROCEDURE OF THE MULTI-PARAMETER MODEL OF TRACERS MIGRATION THROUGH GROUND SAMPLE

MONIKA OKOŃSKA<sup>1</sup>

**Abstrakt.** W celu identyfikacji parametrów migracji znaczników w ośrodku porowatym przeprowadzono badania laboratoryjne i modelowe. Badania laboratoryjne polegały na zarejestrowaniu krzywych przejścia wybranych znaczników przez próbkę piasku w kolumnie filtracyjnej. Natomiast badania modelowe obejmowały skonstruowanie za pomocą oprogramowania Visual MODFLOW Pro v.3.1 oraz MT3D99 numerycznego modelu kolumny filtracyjnej i odtworzenie w drodze symulacji warunków badań laboratoryjnych. Wyznaczenie wartości parametrów migracji znaczników przeprowadzono na modelu numerycznym poprzez proces kalibracji modelu metodą kolejnych przybliżeń. Artykuł szczegółowo przedstawia metodykę tarowania wieloparametrycznego modelu migracji na wybranym przykładzie. Wypracowana procedura tarowania modelu numerycznego prowadzi do uzyskania zestawu parametrów opisujących takie procesy, jak adwekcja, dyspersja hydrodynamiczna oraz adsorpcja. Kalibrację oceniano poprzez porównanie krzywych przejścia doświadczalnych i obliczeniowych na podstawie sformułowanych własnych kryteriów zgodności tych krzywych. Otrzymane wyniki poddano dodatkowo weryfikacji metodą rozwiązań analitycznych.

**Słowa kluczowe:** kolumna filtracyjna, model numeryczny, kalibracja, parametry hydrogeologiczne.

**Abstract.** In order to identify parameters of tracer migration in porous medium there was conducted laboratory and model research. Laboratory research was based on registering the breakthrough curves of selected tracers through sand sample in filtration column. Model research involved creating through Visual MODFLOW Pro v.3.1 and MT3D99 software, numerical model of filtration column and reflecting laboratory research conditions through numerical simulation. Identification of tracer migration parameters was conducted on numerical model by the method of succeeding iterations. The article presents in detail the calibration procedure of multi-parameter model of migration on the selected example. The procedure of calibration numerical model, which was worked out by the author, leads to achieving the set of parameters describing such processes as advection, hydrodynamic dispersion and adsorption. Calibration was evaluated by comparison of numerical and experimental breakthrough curves on the basis of author's own criteria of compatibility of the curves. The results which were obtained underwent additional verification by the method of analytical solutions.

**Key words:** filtration column, numerical model, calibration, hydrogeological parameters.

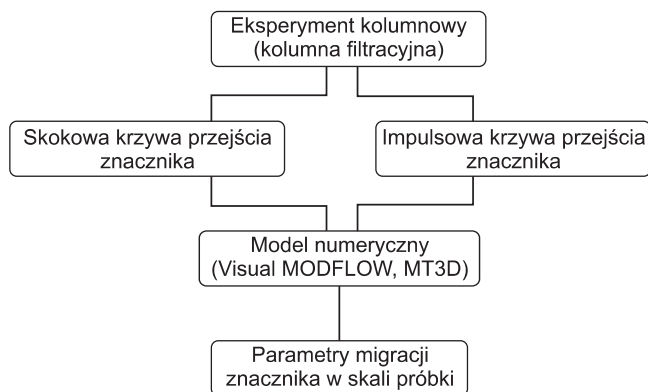
## WSTĘP

Modelowanie przepływu wód podziemnych i migracji substancji w warstwie wodonośnej wymaga znajomości wartości parametrów hydrogeologicznych. Dotyczy to zarówno rozwiązań analitycznych, jak i symulacji numerycznych. We

wcześniejszych publikacjach (Okońska, 2006) zaproponowano procedurę pozwalającą na wyznaczenie wartości (identyfikację) wybranych parametrów hydrogeologicznych w skali laboratoryjnej (fig. 1). W niniejszym artykule szerzej

---

<sup>1</sup> Uniwersytet im. A. Mickiewicza, Wydział Nauk Geograficznych i Geologicznych, ul. Dziegielowa 27, 61-680 Poznań; e-mail: okonska@amu.edu.pl



**Fig. 1. Schemat identyfikacji parametrów migracji w skali laboratoryjnej**

The scheme of the migration parameters identification in a laboratory scale

przedstawiono sposób kalibracji wieloparametrycznego modelu numerycznego kolumny filtracyjnej, skonstruowanego za pomocą programów Visual MODFLOW Pro v.3.1 i MT3D99. W efekcie kalibracji uzyskano zestaw parametrów

hydrogeologicznych, takich jak: współczynnik filtracji  $k$ , stała dyspersji podłużnej  $\alpha_L$ , stała podziału dla liniowej izotermii sorpcji  $K_d$ , współczynnik opóźnienia  $R$ .

## BADANIA LABORATORYJNE

W warunkach laboratoryjnych przeprowadzono badania migracji wybranych znaczników przez próbkę piasku gruboziarnistego o wysokości 10 cm. W doświadczeniach użyto roztworu bez znacznika (wody destylowanej) oraz dwóch roztworów ze znacznikiem: znacznikiem idealnym (jony chlorkowe) oraz znacznikiem ulegającym sorpcji (jony litu). Iniekcję danego roztworu ze znacznikiem prowadzono me-

todami skokową i impulsową, odpowiadającymi ciągłej i krótkotrwałej iniekcji substancji do ośrodka wodonośnego (Okońska, 2006). W rezultacie badań doświadczalnych otrzymano krzywe przejścia jonów chlorkowych i jonów litu przez próbkę gruntu, będące zapisem zmian koncentracji tych znaczników  $C_i$  w funkcji czasu  $t$ .

## NUMERYCZNY MODEL KOLUMNY FILTRACYJNEJ

Po wykonaniu badań doświadczalnych skonstruowano w programie Visual MODFLOW model hydrodynamiczny kolumny filtracyjnej, odwzorowujący warunki przepływu wody przez próbkę piasku. Ortogonalna siatka dyskretyzacyjna zawierała dziesięć kolumn i dziesięć wierszy (fig. 2). Osiem kolumn i osiem wierszy składało się z czynnych bloków o rozmiarach  $\Delta x = \Delta y = 5$  mm. Natomiast pozostałe dwie kolumny i dwa wiersze zawierały nieczynne bloki o rozmiarach  $\Delta x = \Delta y = 1$  mm, rozmieszczone na krawędziach modelu. Model numeryczny składał się z dziesięciu warstw obliczeniowych o miąższości równej 10 mm. Uzyskane parametry siatki dyskretyzacyjnej pozwoliły odtworzyć z założoną dokładnością strukturę modelowanej próbki gruntu. Różnica pomiędzy rzeczywistą powierzchnią próbki piasku a odwzorowaną na modelu wyniosła 3%.

Filtrację wody w kierunku z dołu ku górze (analogiczną do warunków doświadczenia) uzyskano na modelu poprzez odpowiednie założenie warunków brzegowych. Stały gradient hydrauliczny zadano za pomocą warunku brzegowego I rodzaju w pierwszej i ostatniej warstwie modelu. Warunek początkowy zadano w postaci:

$$H_{(t)}|_{t=0} = H_{góra} \quad [1]$$

gdzie:

$H$  – potencjał hydrauliczny.

Model hydrochemiczny kolumny filtracyjnej skonstruowano przy użyciu programu MT3D99. Sposób iniekcji znaczników zamodelowano za pomocą warunku brzegowego I rodzaju (stałej koncentracji). Warunek zadano w dolnej warstwie modelu w postaci dwóch lub trzech okresów czasowych, odwzorowując odpowiednio ciągłą lub krótkotrwałą iniekcję znacznika. Warunek początkowy zadano identycznie dla obu typów iniekcji:

$$C(t)|_{t=0} = C_0 \quad [2]$$

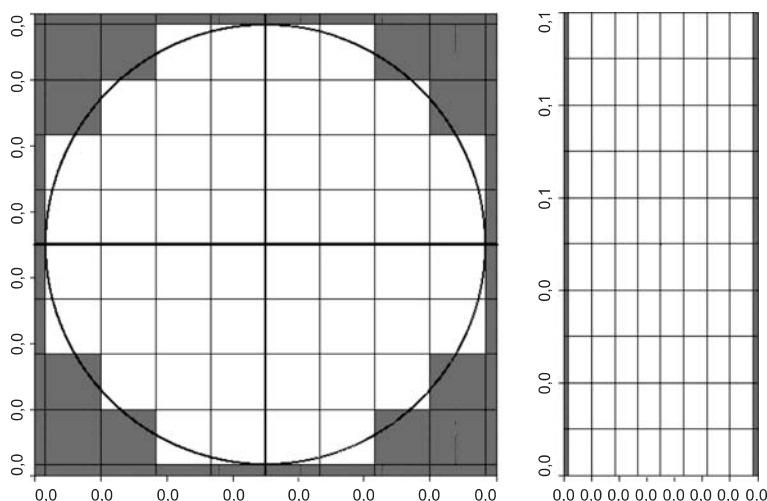
gdzie:

$C$  – koncentracja znacznika w czasie  $t$ .

Koncentrację znacznika po przejściu przez próbkę gruntu obserwowano na modelu za pomocą kalibracyjnego otworu obserwacyjnego zafiltrowanego w ostatniej względem kie-

**Fig. 2. Siatka dyskretyzacyjna: widok w przekroju poziomym i pionowym**

Discretization grid: horizontal and vertical sections



runku przepływu (górnej) warstwie modelu. W otworze kalibracyjnym zadano od kilkunastu do kilkudziesięciu punktów doświadczalnej krzywej przejścia znacznika.

PARAMETRY MODELU NUMERYCZNEGO

Do modelu wprowadzono wartości parametrów hydrodynamicznych: współczynnika filtracji  $k_x, k_y, k_z$ , jednostkowego współczynnika sprężystej pojemności wodnej  $S_s$ , współczynnika grawitacyjnej pojemności wodnej  $S_y$ , współczynnika porowatości aktywnej  $n_a$  oraz współczynnika porowatości całkowitej  $n$ . Wartość współczynnika filtracji  $k$ , obliczoną na podstawie pomierzonego w trakcie doświadczenia natężenia przepływu wody  $Q$  przez próbkę piasku, przeliczono na wartość współczynnika filtracji  $k_{10}$  dla wody o temperaturze  $10^\circ\text{C}$  i dopiero tę wartość wprowadzono do modelu numerycznego jako wartość początkową współczynnika filtracji (tab. 1). Założona jednorodność próbki gruntu w kierunku  $x, y$  oraz  $z$  umożliwiła wprowadzenie jednej wartości współczynnika filtracji  $k_x = k_y = k_z = k$ .

Wartości współczynników porowatości zadano na podstawie danych uzyskanych w wyniku przeprowadzonych badań porozymetrycznych. Na podstawie tych badań określono również wartość gęstości objętościowej szkieletu gruntowego  $\rho_d$ , którą należało zdefiniować w modelu hydrochemicznym w przypadku znacznika ulegającego sorpcji. Wartości poszczególnych parametrów wprowadzonych do modelu numerycznego dla skokowej krzywej przejścia jonów litu przez próbkę piasku przedstawia tabela 2.

KALIBRACJA MODELU NUMERYCZNEGO

Model hydrodynamiczny kalibrowano weryfikując początkową wartość współczynnika filtracji w granicach błędu pomiarowego metody, oszacowanej na  $\pm 10\%$ . Zgodność bilansu przepływu wody z uzyskanym podczas badań laboratoryjnych sprawdzano przy użyciu modułu ZONE BUDGET. Przyjęto, że błąd względny bilansu  $\delta_B$  nie może być większy niż  $10\%$  (Okońska, 2006). Podstawą kalibracji modelu hydrochemicznego było porównanie krzywych przejś-

**Tabela 1**

**Zestawienie wartości współczynnika filtracji**  
Breakdown of permeability coefficient value

Rodzaj jonu	Metoda	Kolumna filtracyjna			Model numeryczny	Obliczenia II
		$Q$ [m <sup>3</sup> /h]	$k$ [m/s]	$k_{10}$ [m/s]	$k$ [m/s]	$k$ [m/s]
Jony chlorkowe	skokowa	2,34E-04	5,16E-04	3,86E-04	3,6E-04	3,92E-04
	impulsowa	3,02E-04	6,68E-04	5,20E-04	4,6E-04	5,22E-04
Jony litu	skokowa	3,35E-04	7,20E-04	5,51E-04	5,0E-04	5,59E-04
	impulsowa	3,57E-04	7,89E-04	6,09E-04	5,9E-04	5,98E-04

$Q$  – natężenie filtracji,  $k$  – współczynnik filtracji,  $k_{10}$  – współczynnik filtracji w temperaturze  $10^\circ\text{C}$   
flow rate, permeability coefficient, permeability coefficient in  $10^\circ\text{C}$

Tabela 2

**Zestawienie wybranych parametrów wprowadzonych do modelu numerycznego**  
Breakdown of selected parameters introduced into the numerical model

Metoda iniekcji		skokowa		
Rodzaj znacznika		jony litu		
Opis litologiczny próbki gruntu		piasek gruboziarnisty		
Program użyty do modelowania		Visual MODFLOW v.3.1.0.86		
		MT3D99		
Wariant	procesy	002	sorpcja (izoterma liniowa)	
	reakcje		bez reakcji kinetycznych	
<b>Siatka dyskretyzacyjna</b>				
Średnica modelu		$d$	4,0	cm
Wysokość modelu		$z$	10,0	cm
Wymiar bloku siatki dyskretyzacyjnej		$x\_y\_z$	5_5_10	mm
<b>Warunki brzegowe</b>				
Różnica ciśnień		$\Delta H$	0,01	m
Gradient hydrauliczny		$I$	0,10	cm/cm
Koncentracja roztworu wejściowego	bez znacznika	$C_0$	0,001	mg/l
	ze znacznikiem	$C_r$	2,74	mg/l
Iniekcja roztworu wejściowego		$t_1$ [h]	$t_2$ [h]	$C$ [mg/l]
	krok 1	0,00	1,00	0,001
	krok 2	1,00	8,83	2,74
Czas symulacji		$t$	8,83	h
<b>Wielkości wprowadzone do modelu</b>				
Współczynnik filtracji		$k_x, k_y, k_z$	5,51E-04	m/s
Jednostkowa odsączalność sprężysta		$S_s$	0,01	1/m
Odsączalność grawitacyjna		$S_y$	0,22	–
Porowatość aktywna		$n_a$	0,36	–
Porowatość całkowita		$n$	0,40	–
Gęstość objętościowa szkieletu gruntowego		$\rho_d$	1700	kg/m <sup>3</sup>
Stała podziału		$K_d$		l/(mg/l)
Koncentracja początkowa		$C_0$	0,001	mg/l
Dyspersyjność podłużna		$\alpha_L$		m

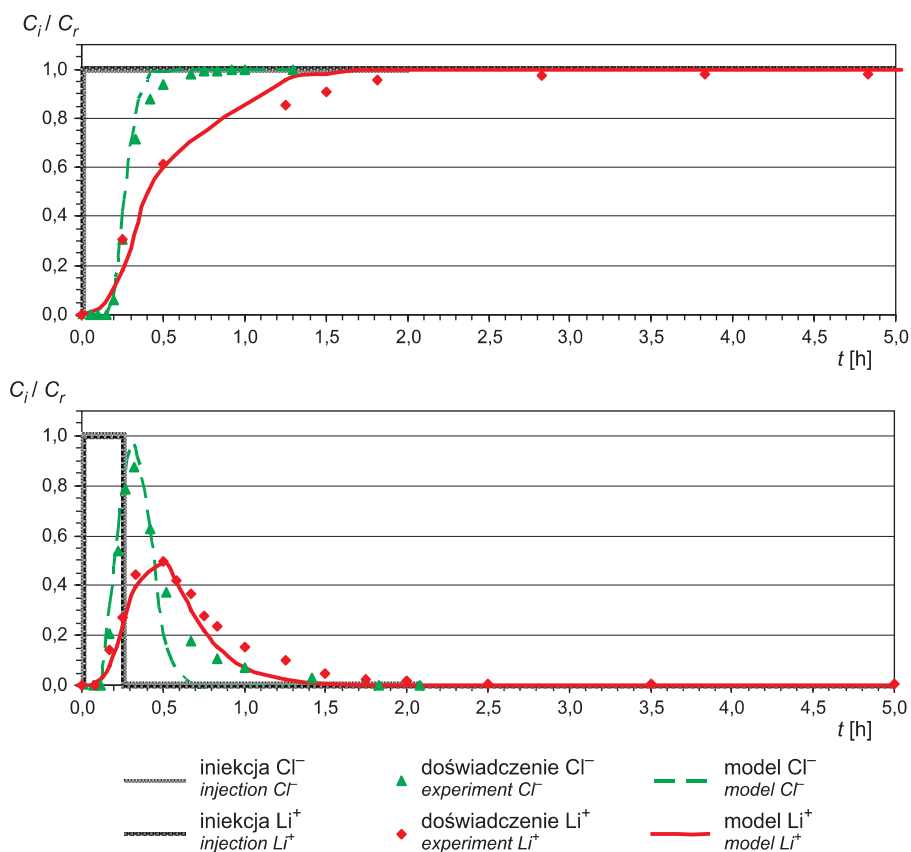
cia (skokowych oraz impulsowych) obliczonych na modelu numerycznym z krzywymi przejścia doświadczalnymi (fig. 3). Spośród dostępnych w programie MT3D99 algorytmów obliczeniowych zdecydowano się na metodę charakterystyk MOC (*Method of Characteristics*), pozwalającą zminimalizować wartość dyspersji numerycznej (Małecki i in., 2006).

W procesie tarowania uzyskano parametry dyspersji i sorpcji. Przyjęto, że wartości stałych dyspersji poprzecznych  $\alpha_x$  oraz  $\alpha_y$  są równe zero, ponieważ iniekcja znacznika w czasie badań została przeprowadzona przez całą powierzchnię

próbki piasku. Założono ponadto zerową wartość współczynnika dyfuzji  $D_M$  ze względu na dominujący wpływ dyspersji hydrodynamicznej nad procesami dyfuzji podczas migracji znacznika. Przy modelowaniu migracji znacznika idealnego (jony chlorkowe, wariant 001 modelu) kalibracji podlegała jedynie dyspersyjność podłużna  $\alpha_L$  (tab. 3). W przypadku znacznika ulegającego sorpcji (jony litu, wariant 002 modelu) kalibracji podlegała, oprócz dyspersyjności podłużnej  $\alpha_L$ , również stała podziału  $K_d$  (tab. 4). W modelu, ze względu na niewielkie stężenia znacznika, założono liniową zależność

**Fig. 3. Porównanie krzywych przejścia znaczników obliczonych na modelu numerycznym z krzywymi przejścia doświadczalnymi**

Comparison of tracer breakthrough curves calculated to numerical model with experimental breakthrough curves



**Tabela 3**

**Przykład kalibracji modelu numerycznego (jony chlorkowe, krzywa impulsowa)**

The example of numerical model calibration (chloride ions, impulse curve)

$\alpha$ [m]	$k$ [m/s]																	
	0,00046			0,00047			0,00048			0,00049			(...) 0,00057					
	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w			
0,015							0,871	18,399										
0,014	$n$ [-]	$K_d$ [1/mg/dm <sup>3</sup> ]																
0,013																		
0,012																		
0,011			0,4	-														
0,010							0,915	15,161										
0,009							0,927	14,233		0,920	15,075		0,902	16,617				
0,008										0,922	14,661							
0,007				0,953	12,007		0,939	13,555		<b>0,944</b>	<b>12,982</b>	w	0,931	14,639				
0,006				0,961	11,309	w	0,953	12,411		0,942	13,187							
0,005				<b>0,968</b>	<b>10,198</b>	w	0,955	12,072	w	0,946	13,422		0,938	14,197				
0,004				0,970	10,415	w	<b>0,964</b>	<b>10,831</b>	w									
0,003																		
0,002																		

$k$  – współczynnik filtracji,  $\alpha$  – stała dyspersji podłużnej,  $n$  – współczynnik porowatości całkowitej,  $K_d$  – stała podziału dla liniowej izotermii sorpcji,  $r$  – współczynnik korelacji, nRMS – znormalizowany błąd estymacji, w – wykres  
 $k$  – permeability coefficient,  $\alpha$  – longitudinal dispersivity,  $n$  – total porosity,  $K_d$  – distribution coefficient for a linear adsorption,  $r$  – correlation coefficient, nRMS – normalized root mean square, w – graph

Tabela 4

## Przykład kalibracji modelu numerycznego (jony litu, krzywa impulsowa)

The example of numerical model calibration (lithium ions, impulse curve)

$\alpha$ [m]	$k$ [m/s]																		
	0,00055			0,00056			0,00057			0,00058			0,00059			0,00060			
	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	
0,040																			
0,035																			
0,030	$n$ [-]	$K_d$ [1/mg/dm <sup>3</sup> ]																	
0,025										0,946	13,511		0,938	14,283		0,932	14,558		
0,024	0,4	$5,0 \cdot 10^{-7}$																	
0,023																			
0,022																			
0,021																			
0,020							0,971	12,262		0,969	12,333		0,969	11,504		0,969	10,736	w	
0,019																			
(...)																			
0,005																			
$\alpha$ [m]	$k$ [m/s]																		
	0,00055			0,00056			0,00057			0,00058			0,00059			0,00060			
	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	
0,040																			
0,035																			
0,030	$n$ [-]	$K_d$ [1/mg/dm <sup>3</sup> ]																	
0,025										0,973	11,078		0,956	13,663		0,956	13,035		
0,024	0,4	$5,5 \cdot 10^{-7}$																	
0,023																			
0,022																			
0,021										0,980	11,597		0,981	10,947		0,975	11,166		
0,020										0,983	10,243	w	<b>0,984</b>	<b>8,969</b>	w	0,980	10,614		
0,019										0,983	11,071		0,981	11,386		0,979	11,220		
(...)																			
0,005																			
$\alpha$ [m]	$k$ [m/s]																		
	0,00055			0,00056			0,00057			0,00058			0,00059			0,00060			
	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	
0,040																			
0,035																			
0,030	$n$ [-]	$K_d$ [1/mg/dm <sup>3</sup> ]																	
0,025										0,982	11,039		0,981	10,84		0,949	13,513		
0,024	0,4	$6,0 \cdot 10^{-7}$											0,982	10,979		0,976	11,387		
0,023										0,983	11,734		0,984	10,993					
0,022										0,988	10,707		0,984	11,395		0,984	11,083		
0,021										0,986	10,434		<b>0,986</b>	<b>10,276</b>	w	0,986	10,418		
0,020										0,986	10,585		0,985	10,355		0,985	10,338	w	
0,019																0,984	10,368		
0,018																			
0,017																			
0,016																			
0,015																0,971	12,113		
0,014																			
0,013																			
0,012																			
0,011																			
0,010	0,849	20,237														0,901	17,208		
0,005																			
$\alpha$ [m]	$k$ [m/s]																		
	0,00055			0,00056			0,00057			0,00058			0,00059			0,00060			
	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	$r$ [-]	nRMS [%]	w	
0,040																			
0,035																			
0,030	$n$ [-]	$K_d$ [1/mg/dm <sup>3</sup> ]														0,935	15,002		
0,025																0,967	12,756		
0,024	0,4	$6,5 \cdot 10^{-7}$																	
(...)																			
0,010	0,835	20,851														0,871	18,822		
0,005																			

$k$  – współczynnik filtracji,  $\alpha$  – stała dyspersji podłużnej,  $n$  – współczynnik porowatości całkowitej,  $K_d$  – stała podziału dla liniowej izotermy sorpcji,  $r$  – współczynnik korelacji, nRMS – znormalizowany błąd estymacji, w – wykres

$k$  – permeability coefficient,  $\alpha$  – longitudinal dispersivity,  $n$  – total porosity,  $K_d$  – distribution coefficient for a linear adsorption,  $r$  – correlation coefficient, nRMS – normalized root mean square, w – graph

między stężeniem sorbowanego składnika w roztworze i w skale, zgodnie z równaniem izotermi Henry'ego. Kalibrację modelu przeprowadzono metodą kolejnych przybliżeń.

Zgodność wyników obliczeń numerycznych z pomiarami oceniano według sformułowanych czterech wskaźników zgodności (Okońska i in., 2004):

– błąd względny maksimum impulsowej krzywej przejścia  $\delta_C$  nie powinien przekraczać 5%;

– współczynnik korelacji doświadczalnej i obliczeniowej krzywej przejścia  $r$  (*correlation coefficient*) nie powinien być mniejszy niż 0,9;

– znormalizowany błąd RMS (*normalized RMS*) powinien wynosić mniej niż 20%;

– punkty na wykresie korelacji powinny znajdować się w przedziale, w którym ich zgodność jest nie mniejsza niż 95%.

Poprawnie wykalibrowany model hydrochemiczny spełniał wymienione wskaźniki zgodności (tab. 5). Wartości parametrów migracji uzyskane w procesie kalibracji modelu numerycznego przedstawiono w tabeli 6. Wartości współczynnika opóźnienia  $R$  zostały obliczone na podstawie wartości stałych podziału  $K_d$ , uzyskanych w wyniku modelowania (Okońska, 2006).

W celu weryfikacji wyników otrzymanych w procesie kalibracji modelu numerycznego przeprowadzono dodatkowo sprawdzające obliczenia analityczne, których punktem wyjścia były uzyskane podczas doświadczeń laboratoryjnych krzywe przejścia oraz interpretacje danych doświadczalnych przy użyciu programu KLUTESTEP (tab. 6). Obliczenia, oznaczone jako I, wykonano na podstawie wzorów podawanych w literaturze (Kleczkowski red., 1984; Domenico, Schwartz, 1998; Appelo, Postma, 1999). Szczegółowy opis zastosowanych rozwiązań analitycznych znajduje się w pracy Okońskiej (2006). Natomiast

Tabela 5

## Uzyskana zgodność krzywych obliczonych z doświadczalnymi

Obtained compatibility of calculated curves with experimental ones

Rodzaj jonu	Metoda	Model numeryczny	
		$r$ [-]	nRMS [%]
Jony chlorkowe	skokowa	0,996	4,912
	impulsowa	0,968	10,198
Jony litu	skokowa	0,994	5,408
	impulsowa	0,984	8,969

$r$  – współczynnik korelacji,  $nRMS$  – znormalizowany błąd estymacji  
*correlation coefficient, normalized root mean square*

interpretacje danych doświadczalnych, oznaczone w tabelach 1 i 6 jako II, przeprowadził Piotr Małuszewski przy użyciu programu KLUTESTEP (Marciniak, Okońska, 2006), stosując liniowy model reakcji między roztworem i ośrodkiem skalnym. Porównanie uzyskanych wartości parametrów wskazuje na poprawną weryfikację wyników badań modelowych (współczynnik determinacji  $R^2 > 0,9$ ).

W czasie kalibracji modelu numerycznego zwrócono uwagę na wpływ poszczególnych parametrów na kształt i położenie obliczonej krzywej przejścia. Stwierdzono, że największy wpływ na przebieg teoretycznej krzywej przejścia ma współczynnik filtracji  $k$ . Nawet nieznaczna zmiana wartości tego parametru powoduje wyraźną zmianę wartości współczynnika korelacji  $r$ , powiązaną ze zmianą wskaźnika nRMS (Marciniak, 2004).

Tabela 6

## Wartości parametrów migracji określone na podstawie krzywych przejścia

Value of migration parameters defined on the basis of breakthrough curves

Rodzaj jonu	Metoda	Model numeryczny			Obliczenia I			Obliczenia II	
		$\alpha_L$	$K_d$	$R$	$\alpha_L$	$K_d$	$R$	$\alpha_L$	$R$
		[m]	[1/mg/dm <sup>3</sup> ]	[-]	[m]	[1/mg/dm <sup>3</sup> ]	[-]	[m]	[-]
Jony chlorkowe	skokowa	0,004	–	–	0,01	–	–	0,005	–
	impulsowa	0,005	–	–	0,01	–	–	0,011	–
Jony litu	skokowa	0,025	6,00E-07	3,83	0,01	5,15E-07	3,43	0,026	3,50
	impulsowa	0,020	5,50E-07	3,60	0,01	4,85E-07	3,29	0,023	2,50

$\alpha_L$  – stała dyspersji podłużnej,  
*longitudinal dispersivity,*

$K_d$  – stała podziału dla liniowej izotermi sorpcji,  
*distribution coefficient for a linear adsorption,*

$R$  – współczynnik opóźnienia  
*retardation factor*

## PODSUMOWANIE

Wiarygodność otrzymanych wyników badań bardzo ściśle zależy od rozpoznania procesów zachodzących podczas migracji substancji przez dany ośrodek, a także od zakresu i dokładności pomiarów wykonanych podczas etapu prac doświadczalnych.

Korzystne z punktu widzenia kalibracji modelu numerycznego jest przeprowadzanie doświadczeń identyfikacyjnych z wykorzystaniem roztworu wejściowego, zawierającego jednocześnie znacznik idealny i znacznik ulegający sorpcji. Procedura kalibracji modelu numerycznego może

w takim przypadku ulec pewnemu uproszczeniu i przyspieszeniu. Wartość stałej dyspersji podłużnej  $\alpha_L$  dla danego eksperymentu otrzymywana jest poprzez kalibrację krzywej przejścia znacznika idealnego (np. jonów chlorkowych, wariant 001 modelu), jednak w przypadku znacznika sorbowanego kalibracji podlega wówczas tylko wartość stałej podziału  $K_d$  (wariant 002 modelu). Jako wartość stałej  $\alpha_L$  w modelu zadawana może być wartość parametru, wyznaczona wcześniej w procesie tarowania modelu ze znacznikiem idealnym.

## LITERATURA

- APPELO C.A.J., POSTMA D., 1999 – Geochemistry, groundwater and pollution. A.A. Balkema, Rotterdam, Brookfield.
- DOMENICO P.A., SCHWARTZ F.W., 1998 – Physical and chemical hydrogeology. John Wiley & Sons, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Toronto, Singapore.
- KLECZKOWSKI A.S. (red.), 1984 – Ochrona wód podziemnych. Wyd. Geol., Warszawa.
- MAŁECKI J.J., NAWALANY M., WITCZAK S., GRUSZCZYŃSKI T., 2006 – Wyznaczanie parametrów migracji zanieczyszczeń w ośrodku porowatym dla potrzeb badań hydrogeologicznych i ochrony środowiska. Poradnik metodyczny. UW Wydział Geologii, Warszawa.
- MARCINIAK M., 2004 – Eksperyment identyfikacyjny oraz model parametryczny jako narzędzia identyfikacji parametrów hydrogeologicznych. *W: Hydrogeologia. Modelowanie przepływu wód podziemnych* (red. J. Gurwin, S. Staško) : 161–173. Wyd. UWroc., Wrocław.
- MARCINIAK M., OKOŃSKA M., 2006 – Modelowanie matematyczne migracji znaczników przez próbki gruntów na podstawie zarejestrowanych laboratoryjnie krzywych przejścia. Sprawozdanie z prac wykonanych w ramach grantu 4 T12B 064 27. Maszynopis. Poznań.
- OKOŃSKA M., 2006 – Identyfikacja parametrów migracji zanieczyszczeń w porowatym ośrodku hydrogeologicznym metodą modelowania eksperymentu kolumnowego. *Geologos*, 9, *Monographiae*, 3. Bogucki Wyd. Nauk., Poznań.
- OKOŃSKA M., KASZTELAN D., MARCINIAK M., 2004 – Uwarunkowania dyskretyzacji obszaru dla modelu migracji znaczników przez próbkę gruntu. *W: Hydrogeologia. Modelowanie przepływu wód podziemnych* (red. J. Gurwin, S. Staško) : 185–195. Wyd. UWroc., Wrocław.

## SUMMARY

In order to identify parameters of tracer migration in porous medium there was conducted laboratory and model research.

Laboratory research was based on registering the breakthrough curves of selected tracers through sand sample in filtration column. The research involved experiments with two types of tracers: chloride ions  $Cl^-$  treated as conservative tracer, undergoing advection and dispersion processes and lithium ions  $Li^+$  treated as sorbed tracer, undergoing processes of both advection, dispersion and sorption. All experiments were conducted in dynamic conditions, with a constant hydraulic gradient  $I$ . The tracer injection was planned according to a step method, i.e. according to the Heaviside unit step function (continual injection of the tracer) and impulse method, compatible with practical realisation of Dirac impulse function (short-term injection of a tracer).

Model research involved creating through Visual MODFLOW Pro v.3.1 and MT3D99 software, numerical model of

filtration column and reflecting laboratory research conditions through numerical simulation. Identification of tracer migration parameters was conducted on numerical model by the method of succeeding iterations. The article presents in detail the calibration procedure of multi-parameter model of migration on the selected example. The procedure of calibration numerical model, which was worked out by the author, leads to achieving the set of parameters describing such processes as advection, hydrodynamic dispersion and adsorption. There were identified parameters like permeability coefficient  $k$ , longitudinal dispersivity  $\alpha_L$ , distribution coefficient for a linear sorption  $K_d$  and retardation factor  $R$ . Calibration was evaluated by comparison of numerical and experimental breakthrough curves on the basis of author's own criteria of compatibility of the curves. The results which were obtained underwent additional verification by the method of analytical solutions.