

## MODEL NUMERYCZNY TRANSPORTU TCE I PCE JAKO NARZĘDZIE PROJEKTOWANIA EFEKTYWNEJ REMEDIACJI WÓD PODZIEMNYCH

### NUMERICAL TCE AND PCE TRANSPORT MODELLING AS A TOOL IN DESIGNING EFFECTIVE GROUNDWATER REMEDIATION

ALEKSANDRA KIECAK<sup>1</sup>, EWA KRET<sup>1</sup>, GRZEGORZ MALINA<sup>1</sup>, TADEUSZ SZKLARCZYK<sup>1</sup>

**Abstrakt.** Przedstawiono przykład zastosowania modelowania numerycznego jako narzędzia do projektowania remediacji zanieczyszczonych wód podziemnych. Wykonane symulacje migracji trichloroetylenem (TCE) i tetrachloroetylenem (PCE) w wodach czwartorzędowego piętra wodonośnego pozwoliły na oszacowanie czasu niezbędnego do osiągnięcia przyjętego celu remediacji (stężenia TCE i PCE w wodzie  $<50 \mu\text{g}/\text{dm}^3$ ) dla dwóch scenariuszy remediacji – (I) strategii opartej na samooczyszczaniu wód (Ia – w obecnych warunkach pracy i Ib – przy wyłączonym ujęciu) oraz (II) zastosowaniu metody „pompuj i oczyszczaj”.

**Słowa kluczowe:** model transportu mas, remediacja, wody podziemne, TCE, PCE.

**Abstract.** An example of the application of numerical modeling as a tool for designing effective remediation of trichloroethene (TCE) and tetrachloroethene (PCE) contaminated groundwater is presented. Simulations of TCE and PCE fate and transport in the Quaternary aquifer were performed for two remediation scenarios – (I) a strategy based on natural attenuation (NA) (Ia – waterworks in operation; Ib – waterworks closed down), and (II) a “pump-and-treat” method.

**Key words:** mass transport modelling, remediation, groundwater, TCE, PCE.

## WSTĘP

Trichloroetylen (TCE) i tetrachloroetylen (PCE) są zaliczane do głównych zanieczyszczeń wód podziemnych zarówno w Polsce, jak i na świecie. Dopuszczalne stężenia TCE i PCE dla dobrego stanu chemicznego wód podziemnych zgodnie z Rozporządzeniem Ministra Środowiska wynoszą  $50 \mu\text{g}/\text{dm}^3$  (DzU 2008.143.896). Ponadnormatywne stężenia są traktowane jako zanieczyszczenie wód podziemnych i wymagają, zgodnie z zapisami Ramowej Dyrektywy Wodnej (RDW, 2000) nie tylko działań zapobiegawczych, lecz także naprawczych (remediacji wód podziemnych). Istnieje szereg metod oczyszczania wód podziemnych zanie-

czyszczonych substancjami organicznymi (w tym chlorowanymi etenami), różniących się pod względem technologii i kosztów. Podstawowym problemem jest wybór efektywnego rozwiązania dopasowanego m.in. do warunków hydrogeologicznych, możliwości ekonomicznych oraz regulacji prawnych. Przydatnym narzędziem do projektowania i realizacji efektywnej remediacji zanieczyszczonych wód podziemnych jest modelowanie numeryczne.

Modelowania matematyczne przepływu wód podziemnych i transportu mas to najpowszechniej stosowane narzędzia do odwzorowania procesów migracji zanieczyszczeń

<sup>1</sup> AGH Akademia Górniczo-Hutnicza, Wydział Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska, Katedra Hydrogeologii i Geologii Inżynierskiej, al. A. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków; e-mail: akiecak@geol.agh.edu.pl, ekret@geol.agh.edu.pl, gmalina@agh.edu.pl, tszklarc@agh.edu.pl

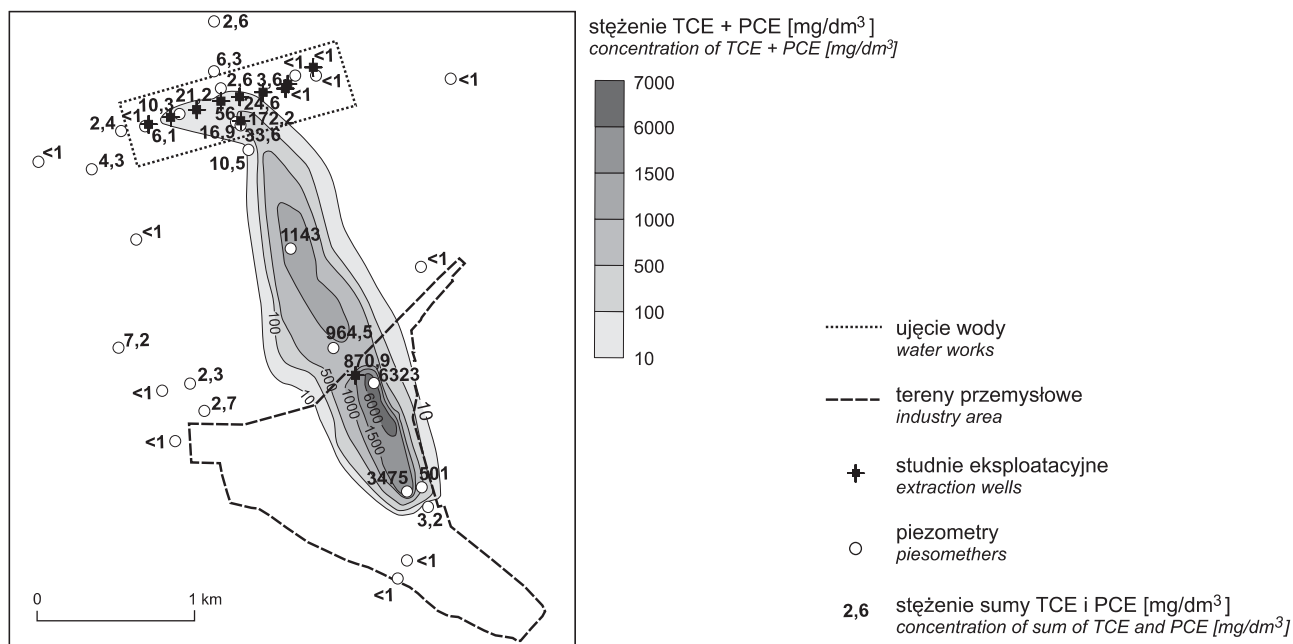


Fig. 1. Rozkład sumy stężeń PCE i TCE w wodach podziemnych piętra czwartorzędowego w rejonie Nowej Dęby (stan na 2010 r.)

Distribution of TCE and PCE concentrations in the Quaternary aquifer in the area of Nowa Dęba (as of 2010)

w wodach podziemnych (Małecki, 2006). Wykorzystuje się je m.in. do ilościowego opisu przepływu wody (np. bilans wodny, kierunek przepływu) oraz badania różnych scenariuszy w celu prognozowania zachowania się substancji, zanieczyszczających badane piętro/poziom wodonosny (np. Clement i in., 2000). Mogą być także bardzo pomocne przy wyborze optymalnej strategii i efektywnych metod remediacji zanieczyszczonych wód podziemnych oraz do optymalizacji funkcjonujących systemów remediacji.

W pracy przedstawiono przykład wykorzystania modelu transportu mas do wyboru metody remediacji zanieczyszczonych wód czwartorzędowego piętra wodonosnego w rejonie Nowej Dęby, gdzie stwierdzono ponadnormatywne stężenia TCE i PCE w ujmowanych wodach podziemnych (fig. 1) (Kret i in., 2011).

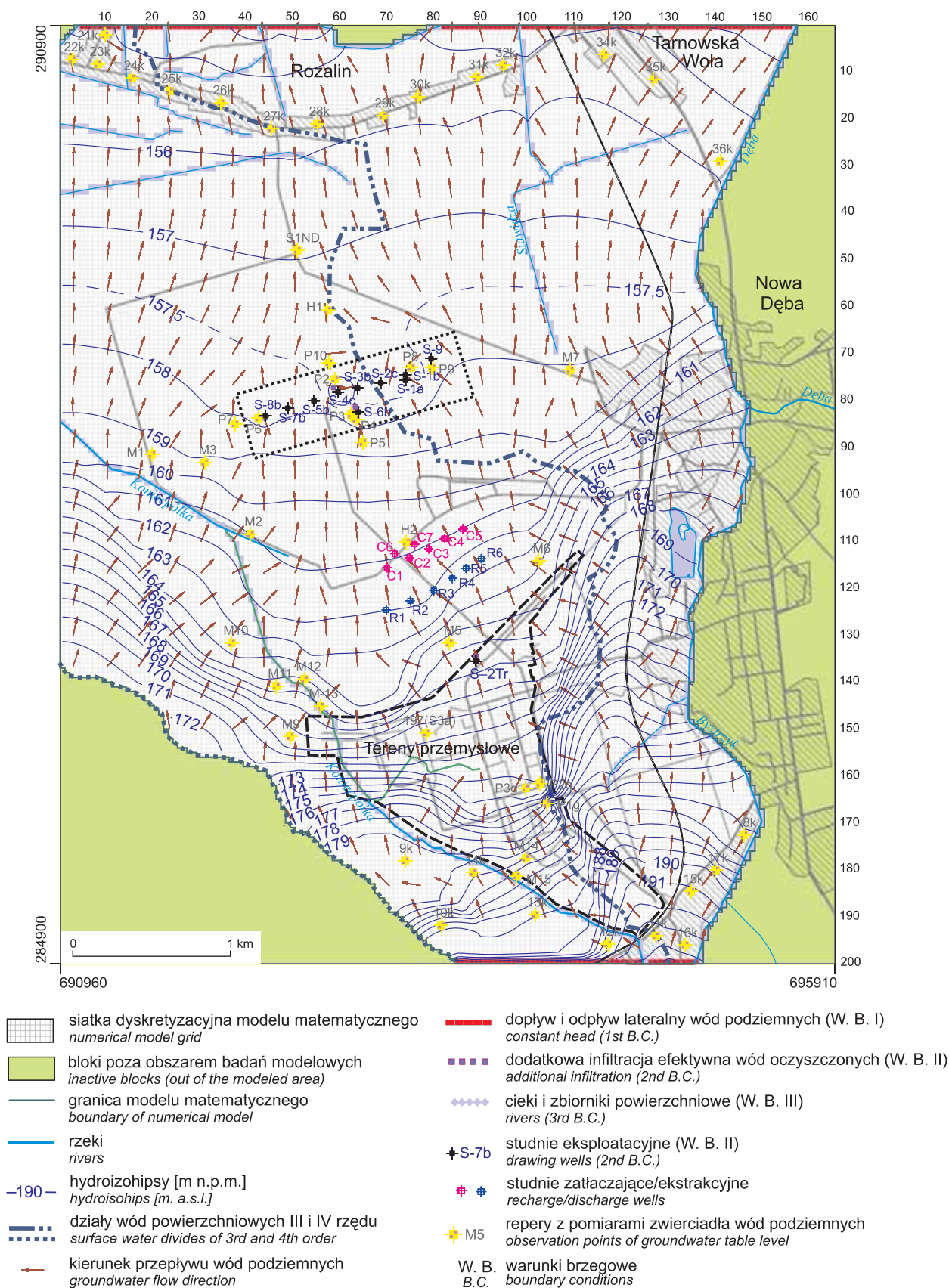
## METODY BADAŃ

Na podstawie pięciowarstwowego modelu hydrodynamicznego (fig. 2), wykonanego przy użyciu programu Visual Modflow, opracowano model transportu TCE i PCE, uwzględniający wyniki rozpoznania (na podstawie badań terenowych i laboratoryjnych) tła hydrogeochemicznego, istniejących ognisk zanieczyszczeń i parametrów migracji. W modelu hydrodynamicznym założono, że wielkość poboru wód podziemnych kształtuje się na poziomie stanu średniego z 2010 roku, a opady są równe średniej z wielolecia (lata hydrologiczne 1955–2010). Modelowaniem objęto obszar o powierzchni 29,7 km<sup>2</sup>, z czego ok. 80% przypada na bloki aktywne. Przyjęto siatkę dyskretyzacyjną z blokami obliczeniowymi 30 × 30 m. Szczegółowy opis modelu został przedstawiony w pracy Szklarczyka i in. (2012).

Przy tworzeniu modelu transportu mas korzystano z pakietu MT3D w wersji MT3DMS, który pozwala realizować obliczenia zgodnie z adwekcyjno-dyfuzyjnym modelem migracji w warunkach filtracji ustalonej lub niestalonej. Przyjęto stałą dyspersji podłużnej  $\alpha_L = 3,0$  m i stałe dyspersji

poprzecznej zależne od stałej dyspersji podłużnej –  $\alpha_{TH} = 0,1\alpha_L$  i  $\alpha_{TV} = 0,01\alpha_L$ . W modelu uwzględniono opóźnienie migracji TCE oraz PCE w wodach podziemnych ze względu na sorpcję, którą opisano izotermę liniową. Stałe podziału  $K_d$  przyjęto na podstawie wyników badań laboratoryjnych w granicach  $3,7 \cdot 10^{-11} \div 4,4 \cdot 10^{-10} \text{ dm}^3/\mu\text{g}$  (TCE) oraz  $1,21 \cdot 10^{-10} \div 6,7 \cdot 10^{-10} \text{ dm}^3/\mu\text{g}$  (PCE) (Kret, 2013). Założono, że biodegradacja TCE i PCE w badanej warstwie wodonosnej jest pomijalnie mała i nie ma znaczącego wpływu na migrację tych zanieczyszczeń (Kiecak i in., 2013). Jako warunek początkowy przyjęto rozkład stężeń zanieczyszczeń opracowany na podstawie rozpoznania hydrogeochemicznego z 2010 roku (Kret i in., 2011).

Na podstawie przeprowadzonych na wykonanym modelu symulacji oceniono szybkość migracji TCE i PCE w strumieniu wód podziemnych dla dwóch scenariuszy remediacji – (I) strategii opartej na samooczyszczaniu wód (Ia – w obecnych warunkach pracy i Ib – przy wyłączonym ujęciu) oraz (II) zastosowaniu metody „pompuj i oczyszczaj”.



**Fig. 2. Mapa hydrodynamiczna rejonu ujęcia wód piętra czwartorzędowego w Nowej Dębie, stan na 2010 r., odtworzony na modelu matematycznym**

Hydrodynamic map of the Quaternary aquifer in the area of Nowa Dęba, as of 2010 reconstructed by the mathematical model

W pierwszym przypadku założono, że żadne działania naprawcze nie będą podejmowane. Symulowano więc warunki samooczyszczania wód podziemnych (NA – *Natural Attenuation*) przy założeniu, że głównym procesem mającym wpływ na opóźnienie migracji jest sorpcja. Modelowanie przeprowadzono dla ustalonych warunków filtracji. Druga

symulacja dotyczyła zastosowania metody „pompuj i oczyszczaj” w warunkach pracy ujęcia. Wielkości wydatków pompowania poszczególnych studni, ich liczba i lokalizacja dobrano na podstawie modelowania metodą prób i błędów. W tym przypadku symulacje prowadzono w warunkach filtracji nieustalanej.

## WYNIKI SYMULACJI

Wynikiem prognostycznych symulacji migracji TCE i PCE w wodach podziemnych jest rozkład ich stężeń w kolejnych krokach czasowych, przedstawiony na mapach (fig. 3). Ustalono, że przy założeniu pracy ujęcia ze stałym wydatkiem równym średniemu wydatkowi z 2010 roku, czas po którym będzie osiągnięty przyjęty cel remediacji, tj. dobry stan chemiczny wód ze względu na TCE i PCE (stężenia  $<50 \text{ g/dm}^3$ ), wyniesie odpowiednio 54 i 35 lat. Natomiast w przypadku wyłączenia ujęcia z eksploatacji czas ten wyniesie 65 (TCE) i 43 (PCE) lata.

W drugiej części badań modelowych symulowano pracę 13 studni (6 ekstrakcyjnych i 7 zatłaczających), za pomocą których oczyszczona woda jest wprowadzana z powrotem do warstwy wodonośnej. Wielkości wydatków pompowania poszczególnych studni zestawiono w tabeli 1. W wyniku symulacji oszacowano, że czas potrzebny do osiągnięcia celów remediacji na całym obszarze przy zaproponowanym schemacie rozmieszczenia studni i warunków pompowania wyniesie 40 (TCE) i 21 (PCE) lat (fig. 3).

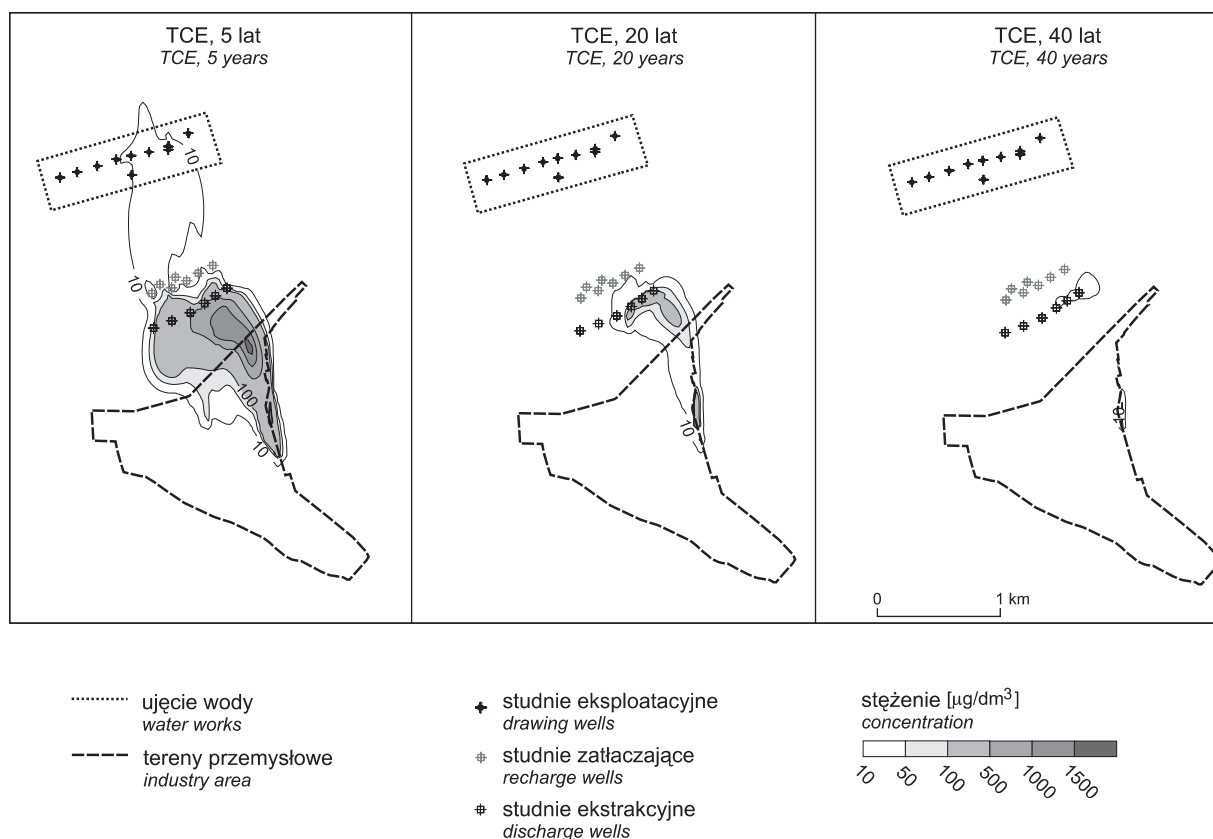


Fig. 3. Zmiany stężenia TCE w wodach podziemnych w strefie przyspągowej – symulacja dla metody „pompuj i oczyszczaj”

Changes of TCE concentrations after 5 and 40 years at the bottom of the aquifer – simulation for the “pump-and-treat” method”

**Tabela 1****Zestawienie wydatków pompowania studni [m<sup>3</sup>/d] przyjętych do symulacji**Discharge/recharge rates of wells [m<sup>3</sup>/day] used in simulations

Nr studni		Czas prowadzenia pompowania (w latach)			
		0–10	10–15	15–20	20–40
Ekstrakcyjne	R1	-250	-100	0	0
	R2	-350	-250	50	0
	R3	-400	-350	150	0
	R4	-600	-600	500	350
	R5	-600	-550	500	400
	R6	-400	-550	600	450
Zatłaczające	C1	450	500	200	0
	C2	450	450	300	50
	C3	400	500	400	400
	C4	400	450	500	400
	C5	450	400	400	300
	C6	200	50	0	0
	C7	250	100	0	0

**PODSUMOWANIE**

Z symulacji migracji TCE i PCE w wodach podziemnych wynika, że przy zastosowaniu metody „pompuj i oczyszczaj” czas remediacji, po którym stan chemiczny wód podziemnych będzie można uznać za dobry, skróci się co najmniej o 25 lat.

Zastosowane narzędzie, jakim jest model transportu zanieczyszczeń w wodach podziemnych umożliwia, przy prawidłowym rozpoznaniu obszaru badań i zastosowaniu odpowiednich metod badawczych, wybór efektywnej metody remediacji zanieczyszczonych wód. Należy podkreślić, że dysponując prawidłowo skalibrowanym modelem przepływu wód podziemnych i transportu mas można także symulować inne rozwiązania oczyszczania (np. zastosowanie przepuszczalnej bariery aktywnej – PRB). Modelowanie daje możliwość porównywania szybkości oczyszczania przy zastosowaniu poszczególnych metod, m.in. dzięki wizualizacji zmian stężeń zanieczyszczeń, zachodzących w wodach podziemnych w czasie.

W niektórych publikacjach modelowanie hydrodynamiczne z wykorzystaniem pakietów wyznaczających linie

prądu jest uznane za wystarczające do skutecznego projektowania remediacji. Na podstawie wyników niniejszej pracy można jednak stwierdzić, że wyłącznie połączenie modelowania hydrodynamicznego z modelem transportu mas daje dobre rezultaty. W pierwszym podejściu nie bierze się pod uwagę procesów biotycznych i abiotycznych, jakie zachodzą w środowisku gruntowo-wodnym, a które mogą wpływać na transport masy zanieczyszczeń w wodach podziemnych (np. dyspersja, sorpcja, biodegradacja). W praktycznym zastosowaniu oznacza to, że modelowanie migracji zanieczyszczeń może dawać dobre rezultaty, ale o wiarygodności modelu będą decydować: wystarczające rozpoznanie terenu badań, prawidłowo przeprowadzona schematyzacja oraz odpowiedni dobór algorytmów obliczeniowych.

*Przedstawione w pracy badania zrealizowano w ramach projektu badawczego finansowanego przez KBN nr N N525 349 238 (umowa wewnętrzna AGH nr 18.18.140.876).*

## LITERATURA

- CLEMENT T.P., JOHNSON C.D., SUN Y., KLECKA G.M., BAR-  
TLETT C., 2000 — Natural attenuation of chlorinated ethene  
compounds: model development and field-scale application at  
the Dover site. *J. Contaminant Hydrology*, **42**, 2–4: 113–140.
- GAVASKAR A.R., 1999 — Design and construction techniques for  
permeable reactive barriers. *J. Hazardous Materials*, **68**, 1/2:  
41–71.
- GUPTA N., FOXT.C., 1999 — Hydrogeologic modeling for perme-  
able reactive barriers. *J. Hazardous Materials*, **68**, 1/2: 19–39.
- KIECAK A., KRET E., CICHOSTĘPSKA M., MALINA G., 2013 —  
Assessment of intrinsic biodegradation potentials in an aquifer  
contaminated with chlorinated ethenes in the vicinity of Nowa  
Dęba. *Ecol. Chem. Eng. S*, **20**, 2: 265–278.
- KRET E., 2013 — Krążenie wód podziemnych zanieczyszczonych  
tri- i tetrachloroetylenem w warunkach eksploatacji ujęcia  
Nowa Dęba [pr. doktor.]. AGH, Kraków.
- KRET E., KIECAK A., MALINA G., SZKLARCZYK T., 2011 —  
Ocena stanu chemicznego czwartorzędowych wód podziem-  
nych w strefie ochronnej ujęcia Nowa Dęba. Evaluation of  
Quaternary groundwater chemical status exploited by water-  
works in Nowa Dęba. *Biul. Państw. Inst. Geol.*, **445**: 329–336.
- MAŁECKI J. (red), 2006 — Wyznaczanie parametrów migracji  
zanieczyszczeń w ośrodku porowatym dla potrzeb badań  
hydrogeologicznych i ochrony środowiska. Poradnik meto-  
dyczny. UW WG, Warszawa.
- RDW, 2000 — Ramowa dyrektywa wodna. Dyrektywa 2000/  
60/WE Rady i Parlamentu Europejskiego z dnia 23 październi-  
ka 2000 r. ustanawiająca ramy wspólnotowego działania  
w dziedzinie polityki wodnej.
- ROZPORZĄDZENIE Ministra Środowiska z dnia 23 lipca 2008 r.  
w sprawie kryteriów i sposobu oceny stanu wód podziemnych  
(DzU 2008.143.896).
- STROO H., HERB W., 2010 — In situ remediation of chlorinated  
solvent plumes. Springer, New York, USA.
- SZKLARCZYK T., KRET E., GRAJALES MESA S.J., KIECAK  
A., MALINA G., 2012 — Multilayer numerical groundwater  
flow model in the area of Nowa Dęba waterworks. *W: Water  
supply and water quality* (red. Z. Dymaczewski, J. Jeż-Walko-  
wiak): 411–431. Polskie Zrzeszenie Inżynierów i Techników  
Sanitarnych, Oddział Wielkopolski, Poznań.

## SUMMARY

Numerical fate and transport modelling is the commonly used tool for presentation of contaminants' distribution and migration in groundwater. It can be applied e.g. for predicting contaminants' behavior under diverse scenarios and can be valuable for selecting the most effective groundwater remediation methods. The presented work was aimed at showing the usefulness of numerical modeling in designing effective groundwater remediation measures. The unconfined Quaternary aquifer contaminated with TCE and PCE was selected as a case study to present the application of numerical modelling.

The contaminant transport was used to simulate the distribution of TCE and PCE in groundwater vs. time that allowed estimating their migration rates for two clean-up

scenarios – (I) strategy based on Natural Attenuation (NA) (Ia – waterworks in operation, Ib – waterworks closed down), and (II) a 'pump-and-treat' method.

The estimated times required to reach the defined remediation goal (i.e. TCE and PCE concentrations in water  $<50 \mu\text{g}/\text{dm}^3$ ) when NA is 54 (TCE) and 35 (PCE) years, and 65 (TCE) and 43 (PCE) years in scenarios Ia and Ib, respectively. For scenario II, the estimated times are 40 (TCE) and 21 (PCE) years.

The results indicate that 'pump-and-treat' provides faster reduction of TCE and PCE concentrations compared to the NA-based remediation strategy. Numerical modelling enables to simulate also other remediation strategies, thus the usage of models can facilitate the decision-making process