## IMPACTUL POTENȚIAL PE CARE ÎL POT AVEA METALELE ASUPRA BAZINELOR HIDROGRAFICE AFERENTE RÂURILOR ARIEȘ ȘI MUREȘ CA URMARE A UNEI DEVERSĂRI ACCIDENTALE, REZULTATE DE LA IAZUL DE DECANTARE A STERILELOR

Întocmit de,

Paul Whitehead, profesor

#### Centrul Oxford pentru Cercetarea în domeniul Apei

**Universitatea** Oxford

**Iunie 2009** 

P.6. Whithend

SCHOOL OF GEOGRAPHY AND THE ENVIRONMENT OXFORD CENTRE FOR WATER RESEARCH



Paul Whitehead Professor of Water Research Fellow of St Peter's College

OUCE, South Parks Road, Oxford OX1 3QY, United Kingdom Tel (home): +44 (0)1235 850836 Tel (office): +44 (0)1865 285048 paul.whitehead@ouce.ox.ac.uk

# Simularea concentrațiilor de metal pe perioada unei deversări accidentale apărute la iazul de decantare a sterilelor

Apa din iazul de decantare va conține metale în diferite concentrații, acest aspect fiind prezentat în cadrul studiului de impact asupra mediului întocmit pentru Proiect, iar unul dintre aceste aspecte importante este impactul potențial al acestor metale asupra râurilor localizate în aval de amplasament în cazul apariției unei deversări accidentale din sistemul iazului de decantare. În Tabelul nr. 1 se prezintă o listă a principalelor metale și se compară concentrațiile acestora existente în iazul de decantare cu standardele impuse pentru apele de suprafață. După cum se poate observa în tabel, majoritatea metalelor au concentrații sub limitele standard, iar acest lucru este ilustrat prin intermediul celei de a treia coloane a tabelului. Singurele substanțe care depășesc standardele sunt sulfatul, calciul, arsenul și molibdenul. (Cianura a fost evaluată la un nivel de detaliu ridicat, fiind prezentată în alt document).

	Standardul	Concentrații în	Multiplu al valorii
	românesc pentru	cadrul sistemului	standard
	apele de suprafaţă	iazului de decantare	
	(mg/l)	(mg/l)	
Sulfat	600	2.562	4,3
Cianura totală	0,1	3,2	32,0
Arsen	0,1	0,2	2,0
Calciu	300,6	594	2,0
Plumb	0,2	0,1	0,5
Cadmiu	0,2	0,1	0,5
Crom	1	0,2	0,2
Fier total	5	0,9	0,2
Cupru	0,1	0,1	1,0
Nichel	0,5	0,3	0,6
Zinc	0,5	0,2	0,4
Mercur	0,05	0,01	0,2
Molibden	0,1	0,4	4,0
Mangan	1	0,5	0,5
Magneziu	100	9,4	0,1
Cobalt	1	0,5	0,5

# Tabel 1 – Standardele metalelor și concentrațiile anticipate ale acestor metale în cadrul sistemului iazului de decantare

Pentru a putea evalua impacturile pe care deversarea de metale le-ar avea în situația unei avarii apărute la iazul de decantare, s-a realizat o simulare în care 4 tipuri de metale depăşesc standardele în vigoare. Modelul utilizat a fost realizat de profesorul Steve Chapra și a fost deja aplicat pentru a simula transportul cianurii de-a lungul sistemului hidrografic. O descriere succintă a modelului este prezentată în cadrul Anexei nr. 1, iar descrierea completă a modelului, alături de descrierea aplicării acestui model asupra sistemelor hidrografice aferente râurilor Arieș și Mureș sunt prezentate de Chapra și Whitehead (2009).

Modelul de dispersie Chapra a fost utilizat pentru a simula deversarea metalelor din iazul de decantare pe parcursul unui eveniment poluator. Se presupune că, în cadrul acestui eveniment, se deversează 26.000 de metri cubi de sterile din iazul de decantare, sterile care au următoarele concentrații în iaz: 0,2 mg/l arsen (As), 0,4 mg/l molibden (Mo), 2.562 mg/l sulfat și 594 mg/l calciu

(Ca). Aceste concentrații sunt concentrații maxime anticipate pentru iazul de decantare înainte de apariția vreunei avarii potențiale. De asemenea, se presupune cazul cel mai grav posibil care poate apărea în aval de amplasament și anume faptul că metalele nu se descompun sau nu există pierdere de metal ca urmare a apariției precipitării sau a sedimentării. Se presupune, de asemenea, că există două scenarii de debite extreme; primul scenariu – debitul râului este scăzut ca pe parcursul unei veri secetoase sau pe parcursul iernii când sunt debite scăzute de ape, și al doilea scenariu – râul se revarsă ca urmare a apariției unor condiții de debit crescut. Sistemul hidrografic a fost inclus în model pentru a simula întregul bazin de 595 km de râu ce pot fi parcurși de la iazul de decantare și până la granița cu Ungaria. O descriere detaliată a întregului sistem hidrografic inclus în model este prezentată în cadrul documentelor anterioare întocmite de Whitehead (2007) și Whitehead et al. (2009).

### **Simulare Arsen**

Rezultatele simulării efectuate prin folosirea modelului Chapra sunt prezentate în Figura 1 și în Tabelul 1 pentru condițiile de debit crescut, iar rezultatele pentru simulările aferente condițiilor de debit redus sunt prezentate în Figura 2 și în Tabelul 2. Rezultatele relevă faptul că, în condiții de debit crescut, apare o diluție ridicată, iar apele bogate în metale se diluează rapid și concentrațiile scad imediat sub nivelul standard al concentrației în ape de 0,1 mg/l. Simularea arată efectele avute de dispersie, cuplate cu efectele pe care diluția le are asupra metalelor pe măsură ce afluenții se varsă în sistemul hidrografic principal. Scenariul cel mai grav luat în considerare în cadrul prezentului document este situația în care nu există precipitare sau sedimentare a metalelor, alături de faptul că toate metalele sunt fie suspendate, fie dizolvate în coloana de apă. În situația în care există condiții de debit extrem de scăzut, după cum se prezintă în Figura 2 și în Tabelul 2, concentrațiile scad de asemenea foarte rapid, iar dispersia și diluția au un efect semnificativ asupra acestora de-a lungul celor 22 de zile în care se parcurge întreaga distanță acoperită de sistemul hidrografic. Din nou, concentrațiile scad mult sub standardul apelor de suprafață.





Tabelul 1. Concentrații simulate pentru Arsen (As) în punctele principale de-a lungul sistemului hidrografic în condiții de debit crescut ca urmare a unei simulări de deversare accidentală poluatoare

Stație	Timp	Concentrație
		de As
	(zile)	(mg/l)
Abrud	0,132	0,00036
Câmpeni	1,012	0,00019
Baia de Arieş	1,038	0,00013
Turda	1,162	0,00009
Ocna Mureş	1,316	0,00006
Alba Iulia	1,716	0,00004
Deva	2,296	0,00004
Săvârşin	3,121	0,00004
Arad	3,413	0,00004
Nădlac	3,665	0,00004

Figura 2. Concentrații simulate pentru Arsen (As) în punctele principale de-a lungul sistemului hidrografic în condiții de debit redus ca urmare a unei simulări de deversare accidentală poluatoare



Tabelul 2. Concentrații simulate pentru Arsen (As) în punctele principale de-a lungul sistemului hidrografic în condiții de debit redus ca urmare a unei simulări de deversare accidentală poluatoare

Staţie	Timp	Concentrație maximă de As
	(zile)	(mg/l)
Abrud	1,002	0,06773
Câmpeni	1,080	0,03634
Baia de Arieş	1,502	0,02242
Turda	3,922	0,00712
Ocna Mureş	6,561	0,00245
Alba lulia	11,062	0,00126
Deva	14,885	0,00086

Aries-Mures River

Săvârşin	19,503	0,00066
Arad	21,074	0,00059
Nădlac	22,404	0,00054

## Simulare molibden

În cazul molibdenului, rezultatele simulării sunt similare cu rezultatele obținute în cazul simulării efectuate pentru arsen, după cum se poate observa în Figura 3 și în Tabelul 3, pentru condiții de debit crescut, și in Figura 4 și Tabel 4, pentru condiții de debit redus. Din nou, în condiții de debit crescut, o diluție ridicată apare, iar apele bogate în metale se diluează rapid și concentrațiile scad imediat sub nivelul standard al concentrației în ape de 0,1 mg/l. În situația unui debit redus, după cum se poate observa în Figura 4 și în Tabelul 4, concentrațiile scad de asemenea repede și sub nivelul standard aferent acestei concentrații din ape.

# Figura 3, Concentrații simulate pentru Molibden (Mo) în punctele principale de-a lungul sistemului hidrografic în condiții de debit crescut ca urmare a unei simulări de deversare accidentală poluatoare



Tabelul 3. Concentrații simulate pentru Molibden (Mo) în punctele principale de-a lungul sistemului hidrografic în condiții de debit crescut ca urmare a unei simulări de deversare accidentală poluatoare

Stație	Timp	Concentrație
-		de Mo
	(zile)	(mg/l)
Abrud	0,132	0,00072

Câmpeni	1,012	0,00037
Baia de Arieş	1,038	0,00026
Turda	1,162	0,00019
Ocna Mureş	1,316	0,00012
Alba Iulia	1,716	0,00009
Deva	2,296	0,00008
Săvârşin	3,121	0,00008
Arad	3,413	0,00008
Nădlac	3,665	0,00008

Figura 4. Concentrații simulate pentru Molibden (Mo) în punctele principale de-a lungul sistemului hidrografic în condiții de debit redus ca urmare a unei simulări de deversare accidentală poluatoare



Tabelul 4. Concentrații simulate pentru Molibden (Mo) în punctele principale de-a lungul sistemului hidrografic în condiții de debit redus ca urmare a unei simulări de deversare accidentală poluatoare

	Timp	Concentratie
Stație	•	maximă de Mo

	(zile)	(mg/l)
Abrud	1.003	0.135
Câmpeni	1.080	0.073
Baia de Arieş	1.502	0.045
Turda	3.923	0.014
Ocna Mureş	6.561	0.005
Alba Iulia	11.062	0.003
Deva	14.886	0.002
Săvârşin	19.504	0.001
Arad	21.074	0.001
Nădlac	22.404	0.001

## Simulare Sulfat

În cazul sulfatului, rezultatele simulării sunt similare cu alte rezultate simulate pentru alte metale, prezentând concentrații reduse pentru ambele tipuri de debit crescut și scăzut, după cum se prezintă în Figurile 5 și 6 și în Tabelele 5 și 6. În condiții de debit crescut, diluția reduce cantitatea de apă bogată în sulfat până la concentrații sub valorile standard cu privire la ape de 600 mg/l. În condiții de debit redus, după cum se prezintă în Figura 6 și în Tabelul 6, concentrațiile scad de asemenea foarte repede sub valorile standard cu privire la ape.

## Figura 5. Concentrații simulate pentru Sulfat în punctele principale de-a lungul sistemului hidrografic în condiții de debit crescut ca urmare a unei simulări de deversare accidentală poluatoare

#### **Aries-Mures River**



Tabelul 5. Cele mai mari concentrații simulate pentru Sulfat în punctele principale de-a lungul sistemului hidrografic în condiții de debit crescut ca urmare a unei simulări de deversare accidentală

Staţie	Timp	Concentrații maxime pentru sulfat
	(zile)	(mg/l)
Abrud	0,136	4,30
Câmpeni	0,223	2,38
Baia de Arieş	1,039	1,68
Turda	1,162	1,19
Ocna Mureş	1,318	0,75
Alba Iulia	1,716	0,55
Deva	2,296	0,53
Săvârşin	3,121	0,53
Arad	3,413	0,52
Nădlac	3,665	0,51

Figura 6. Concentrații simulate pentru Sulfat în punctele principale de-a lungul sistemului hidrografic în condiții de debit redus ca urmare a unei simulări de deversare accidentală poluatoare

#### **Aries-Mures River**



Tabelul 6. Cele mai ridicate concentrații simulate pentru Sulfat în punctele principale de-a lungul sistemului hidrografic în condiții de debit redus ca urmare a unei simulări de deversare accidentală poluatoare

Stație	Timp	Concentrații
		maxime pentru
		sulfat
	(zile)	(mg/l)
Abrud	1,0	750,6
Câmpeni	1,1	465,5
Baia de Arieş	1,5	287,2
Turda	3,9	91,2
Ocna Mureş	6,6	31,4
Alba Iulia	11,1	16,1
Deva	14,9	11,0
Săvârşin	19,5	8,5
Arad	21,1	7,5
Nădlac	22,4	6,9

**Simulare Calciu** 

În situația calciului, rezultatele simulării sunt similare cu rezultatele obținute în cazul simulării pentru sulfat, prezentând concentrații scăzute atât în caz de debit crescut, cât și în caz de debit redus, după cum se prezintă în cazul Figurilor 7 și 8 și în Tabelele 7 și 8. În condiții de debit crescut, diluția și dispersia reduc repede cantitatea de calciu sub valorile standard cu privire la ape stabilite la 300 mg/l. În condiții de debit redus, după cum se prezintă în Figura 8 și în Tabelul 8, concentrațiile scad de asemenea foarte repede sub valorile standard cu privire la ape.

### Figura 7. Concentrații simulate pentru Calciu în punctele principale de-a lungul sistemului hidrografic în condiții de debit crescut ca urmare a unei simulări de deversare accidentală poluatoare



Aries-Mures River

Tabelul 7. Cele mai ridicate concentrații simulate pentru Calciu în punctele principale de-a lungul sistemului hidrografic în condiții de debit crescut ca urmare a unei simulări de deversare accidentală

Stație	Timp	Concentrații
		maxime Calciu
	(zile)	(mg/l)
Abrud	0,136	1,00
Câmpeni	0,223	0,55
Baia de Arieş	1,039	0,39
Turda	1,162	0,28
Ocna Mureş	1,318	0,17
Alba Iulia	1,716	0,13
Deva	2,296	0,12
Săvârşin	3,121	0,12
Arad	3,413	0,12
Nădlac	3,665	0,12

Figura 8. Concentrații simulate pentru Calciu în punctele principale de-a lungul sistemului hidrografic în condiții de debit redus ca urmare a unei simulări de deversare accidentală poluatoare

#### **Aries-Mures River**



Tabelul 8. Cele mai ridicate concentrații simulate pentru Calciu în punctele principale de-a lungul sistemului hidrografic în condiții de debit redus ca urmare a unei simulări de deversare accidentală poluatoare

Stație	Timp	Concentrații
-	-	maxime Calciu
	(zile)	(mg/l)
Abrud	1,0	171,1
Câmpeni	1,1	107,9
Baia de Arieş	1,5	66,6
Turda	3,9	21,1
Ocna Mureş	6,6	7,3
Alba Iulia	11,1	3,7
Deva	14,9	2,6
Săvârşin	19,5	2,0
Arad	21,1	1,8
Nădlac	22,4	1,6

#### Concluzii

Prezentul studiu, în care se prezintă anumite simulări, a ilustrat faptul că deversările de metale în situația unei avarii apărute la iazul de decantare vor prezenta concentrații care scad foarte repede până la valori sub valorile standard cu privire la ape ca urmare a proceselor de diluție și de dispersie care au loc în aval în cadrul sistemului hidrografic.

## ANEXA 1. Modelul dispersiei deversării poluatoare

S-a dezvoltat un nou model pentru simularea numerică a transportului și destinației deversării poluatoare din sistemul hidrografic. Modelul se bazează pe ecuația clasică a dispersiei (Fischer 1968), însă include, de asemenea, și efectul de diluare pe care afluenții râului principal îl au, împreună cu orice fel de descompunere chimică care poate să apară la nivelul sistemului hidrografic. Modelul presupune faptul că gradientul lateral și cel vertical sunt minimi, iar contaminantul poate descompune prin cinetică de prim ordin. Natura generală a acestui model este utilă în mod special deoarece ar fi posibilă aplicarea modelului față de orice fel de agent poluant care poate fi descompus sau prezintă cinetică de prim ordin, aplicându-se de asemenea aproape pe orice sistem hidrografic care are afluenți de ape ce determină creșterea efectului de diluție. Pe cale de consecință, modelul poate fi utilizat în cazul deversării de pesticide, bacterii E. coli și pentru orice fel de poluant care poate fi aproximativ reprezentat drept un simplu produs chimic rezultat din descompunere.

În cadrul sistemului hidrografic, acolo unde se prezintă o turbulență sau o amestecare care să fie semnificative, pierderea de material prin procese de sedimentare sau prin descompunere chimică pot fi reprezentate de către cinetica de prim-ordin, care depinde de temperatură, concentrație și de timpul de rezidență în râu. Această abordare cinetică pentru realizarea modelării în cazul metalelor și poluanților a fost utilizată cu succes în cazul studiului Wheal Jane întocmit de către Whitehead et al. (2005) și aceasta este abordarea adoptată pentru realizarea prezentului model al metalelor din cadrul acestui studiu.

Noul model descris mai jos a fost aplicat pe sistemele hidrografice aferente râurilor Arieş şi Mureş din România, după cum se poate observa în Figurile 1 şi 2, iar o descriere completă a modelului poate fi obținută din Raportul Anexă întocmit de Chapra şi Whitehead (2009). Setarea râului, precum şi zonele de influență sunt ambele prezentate în Raportul Anexă și în documentul întocmit de Whitehead et al (2009).

### Segmentare

Pentru a obține o soluție numerică, râul este împărțit în așa numitele zone de influență, după cum se poate observa în Figura 3. Aceste zone reprezintă segmente ale râului care prezintă caracteristici hidro-geometrice constante, însă ele pot să difere în ceea ce privește lungimea lor. Zonele de influență sunt și ele împărțite în serii de elemente de calcul care sunt egale ca lungime. Elementele reprezintă unități fundamentale pentru care apa și bilanțurile maselor sunt scrise și rezolvate.

Pe scurt, terminologia de specialitate utilizată pentru descrierea modului în care modelul deversării organizează topologia râului este aceasta:

• zonă de influență: o lungime a râului care prezintă caracteristici hidraulice constante;

• element: unitate de calcul fundamentală a modelului, alcătuită din subdiviziuni ale zonelor de influență egale ca lungime.

## Bilanțul inițial al debitului

S-a implementat un bilanț de debit constant pentru fiecare element al modelului. Pentru primul element din cadrul unei zone de influență, alocarea este scrisă după cum urmează (vezi Figura 4):

$$Q_i = Q_{i-1} + Q_{in,i}$$
(1),

în care:

 $Q_i$  = eflux al elementului *i* în elementul din aval *i* + 1 (m<sup>3</sup> s<sup>-1</sup>),

 $Q_{i-1}$  = aflux din elementul din amonte i - 1 (m<sup>3</sup> s<sup>-1</sup>),

 $Q_{\text{in},i}$  = aflux incremental în element de la sursele punctiforme sau nepunctiforme de-a lungul zonei de influență (m<sup>3</sup> s<sup>-1</sup>).

Deci, efluxul din aval al primului element este suma afluxului din amonte cu fluxul incremental. Pentru celelalte elemente aferente zonei de influență,  $Q_{in,i} = 0$  și, prin urmare, efluxul este egal cu afluxul, adică  $Q_i = Q_{i-1}$ .

#### Adâncime, viteză și alți parametrii hidraulici

Imediat ce efluxul aferent fiecărui element este calculat, adâncimea  $H_i$  (m) și viteza  $U_i$  (m s<sup>-1</sup>) vor fi calculate prin două metode: curbe de măsurare și ecuația Manning.

*Curbe de măsurare.* Curbele de măsurare prezentate sub forma ecuațiilor de putere sunt utilizate pentru a relaționa viteza și adâncimea de fluxul aferent fiecărui element:

$U_i = aQ_i^p$	(2),
$H_i = \alpha Q_i^{\beta}$	(3),

unde:

 $U_i$  = viteza medie de-a lungul interfaței din aval a elementului *i* (m s<sup>-1</sup>),

 $H_i$  = adâncimea medie a elementului *i* (m),

*a*, *b*,  $\alpha$  și  $\beta$  sunt coeficienți empirici care sunt determinați prin curbe de măsurare vitezădeversare și, respectiv, etapă-deversare.

Se observă faptul că suma  $b \operatorname{cu} \beta$  trebuie să fie mai mică sau egală cu 1. Dacă acest lucru nu se întâmplă, lățimea va scădea odată cu un flux crescut. Dacă suma acestora este egală cu 1, canalul este rectangular.

După calcularea vitezei și adâncimii prin intermediul ecuațiilor (2) și (3), acestea pot fi folosite pentru calculul altor caracteristici hidro-geometrice. De exemplu, viteza poate fi înlocuită în ecuația de continuare ( $Q_i = U_i A_{c,i}$ ) pentru a determina aria secțiunii elementului (m<sup>2</sup>):

$$A_{c,i} = \frac{Q_i}{U_i}.$$
 (4)

Aria poate fi relaționată direct de flux prin înlocuirea Ecuației (2) în Ecuația (4) pentru a obține:

$$A_{c,i} = \frac{Q_i}{aQ_i^b} = \frac{1}{a}Q_i^{1-b}.$$
 (5)

Lățimea medie a elementului B (m), a perimetrului ud P (m) și volumul V (m<sup>3</sup>) sunt stabilite prin:

$$B_{i} = \frac{A_{c,i}}{H_{i}}$$

$$P_{i} = B_{i} + 2H_{i}$$

$$V_{i} = B_{i}H_{i}\Delta x_{i}$$

$$(6)$$

$$(7)$$

$$(8)$$

unde:

 $\Delta x_i$  = lungimea elementului (m).

Pe lângă calculul caracteristicilor hidro-geometrice drept funcție a fluxului, curbele de măsurare pot fi ,de asemenea, folosite pentru a efectua un calcul invers. Adică, știindu-se volumul, ele pot fi folosite pentru a calcula fluxul, adâncimea, viteza, aria, lățimea și perimetrul umed. Din cauză că  $\Delta x$  este cunoscut, am determinat prima dată aria secțiunii:

$$A_{c,i} = \frac{V_i}{\Delta x_i} \tag{9}.$$

Fluxul poate fi ulterior evaluat prin rezolvarea ecuației (5) pentru:

$$Q_i = a^{1/(1-b)} A_c^{1/(1-b)}.$$
 (10).

După ce se cunoaște fluxul, ecuațiile (2), (3), (6) și (7) pot fi mai apoi utilizate pentru a calcula  $U_i$ ,  $H_i$ ,  $B_i$ , și  $P_i$ .

## Ecuația Manning

Fiecare element din cadrul unei anumite zone de influență este idealizat drept un canal trapezoidal (Figura 5). Pentru asemenea canale, ecuația Manning poate fi utilizată pentru a exprima relația dintre flux și adâncime, după cum urmează:

$$Q_i = \frac{S_{0,i}^{1/2}}{n_i} \frac{A_{c,i}^{5/3}}{P_i^{2/3}}$$
(11),

unde:

 $S_{0,i}$  = gradient vatră (m m<sup>-1</sup>),  $n_i$  = coeficientul de rugozitate Manning,  $A_{c,i}$  = aria secțiunii (m<sup>2</sup>),  $P_i$  = perimetrul umed (m).

Aria secțiunii și perimetrul umed sunt calculate după cum urmează:

$$A_{c,i} = (B_{0,i} + s_i H_i)H_i$$
(12),  

$$P_i = B_{0,i} + 2H_i \sqrt{s_i^2 + 1}$$
(13),

unde:

 $B_{0,i} =$ lățime vatră (m),

 $s_i$  = gradient lateral, după cum se prezintă în Figura 5 (m m<sup>-1</sup>). Se înlocuiesc ecuațiile (12) și (13) în (11) și rezultă:

$$Q_{i} = \frac{1}{n_{i}} \frac{\left[ \left( B_{0,i} + s_{i} H_{i} \right) H_{i} \right]^{5/3}}{\left[ B_{0,i} + 2H_{i} \sqrt{s_{i}^{2} + 1} \right]^{2/3}} S_{0,i}^{1/2}.$$
 (14).

Cunoscând valorile pentru Q,  $B_0$ ,  $S_0$ , n și s, ecuația (14) reprezintă o ecuație non-liniară, cu o necunoscută H ce poate fi reformulată după cum urmează:

$$f(H_i) = \frac{1}{n_i} \frac{\left[ \left( B_{0,i} + s_i H_i \right) H_i \right]^{5/3}}{\left[ B_{0,i} + 2H_i \sqrt{s_i^2 + 1} \right]^{2/3}} S_{0,i}^{1/2} - Q_i.$$
(15).

Rădăcina (adică valoarea adâncimii care face ca prezenta ecuație să fie zero) este adâncimea zonei de influență. Se poate prezenta faptul că rădăcina poate fi determinată eficient prin intermediul înlocuirilor succesive (Chapra & Canale 2006) prin folosirea formulei iterative:

$$H_{i,k} = \frac{(Q_i n_i)^{3/5} \left(B_{0,i} + 2H_{i,k-1} \sqrt{s_i^2 + 1}\right)^{2/5}}{S_{0,i}^{3/10} \left[B_{0,i} + s_i H_{i,k-1}\right]}$$
(16),

unde:

 $k = 1, 2, \dots, n,$ 

n = numărul iterațiilor.

Dacă ipoteza inițială  $H_{i,0} = 0$  este folosită, atunci această abordare este convergentă pentru toate canalele naturale (Chapra & Canale 2006). Metoda este terminată atunci când eroarea estimată scade sub valoarea specificată de 0,001%. Eroarea estimată este calculată drept:

$$\varepsilon_{a,i} = \left| \frac{H_{i,k+1} - H_{i,k}}{H_{i,k+1}} \right| \times 100\%$$
 (17).

Imediat ce se cunoaște adâncimea, aria secțiunii și perimetrul umed sunt calculate prin intermediul ecuațiilor (12) și (13), iar viteza poate fi stabilită din ecuația de continuare:

$$U_i = \frac{Q_i}{A_{c,i}} \tag{18}.$$

Lățimea medie a elementului,  $B_i$  (m), este mai apoi calculată drept:

$$B_i = \frac{A_{c,i}}{H_i},\tag{19}.$$

Lățimea maximă,  $B_{1,i}$  (m) drept:

$$B_{1,i} = B_{0,i} + 2s_i H_i \tag{20}$$

și volumul elementului drept  $V_i = B_i H_i \Delta x_i$ .

$$s_i H_i^2 + B_{0,i} H_i - A_{c,i} = 0. (22).$$

Rădăcina pozitivă a acestei ecuații este, de fapt, adâncimea (observați că această versiune a ecuației de gradul al doilea previne împărțirea la zero pentru canalele rectangulare, adică cu  $s_i = 0$ ):

$$H_{i} = \frac{2A_{c,i}}{B_{0,i} + \sqrt{B_{0,i}^{2} + 4s_{i}A_{c,i}}}.$$
(23).

Lățimea și fluxul medii sunt calculate prin intermediul ecuațiilor (19) și respectiv (14), iar viteza este ulterior calculată prin intermediul ecuatiei (18).

#### Bilant dinamic al apei

După ce volumele inițiale sunt determinate, software-ul generează soluția numerică aferentă ecuatiei de continuitate uni-dimenisonale:

$$\frac{\partial A_c}{\partial t} = -\frac{\partial Q}{\partial x}$$
(24).

Ecuatia (24) poate fi exprimată sub formă numerică prin scrierea bilanțului apei în jurul fiecărui element, pentru a rezulta:

$$\frac{dV_i}{dt} = Q_{i-1} + Q_{i,\text{in}} - Q_i$$
(25),

unde:

 $Q_i$  este efluxul care este calculat după cum s-a descris mai sus.

Ecuația (25) este mai apoi integrată numeric pentru a obține volumele aferente elementului drept functie a timpului.

#### Dispersia

Dispersia poate fi prescrisă de utilizator sau calculată. În cazul din urmă, pe baza evaluării Rutherford (1994), sunt disponibile trei ecuații obținute empiric pentru calculul dispersiei longitudinale în cazul zonei limită din aval dintre două elemente.

În conformitate cu Fischer *et al.* (1979):

(21).

aria prin

$$E_{p,i} = 0.011 \frac{U_i^2 B_i^2}{H_i U_i^*}$$
(26),

unde:

$$\begin{split} E_{p,i} &= \text{dispersia longitudinală dintre două elemente } i \text{ şi } i + 1 \text{ (m}^2 \text{ s}^{-1}), \\ U_i &= \text{viteza medie a elementului } i \text{ (m s}^{-1}), \\ B_i &= \text{lățimea medie (m)}, \\ H_i &= \text{adâncimea (m)}, \\ U_i^* &= \text{viteza de frecare (m s}^{-1}), \\ \text{care este relaționată de caracteristici fundamentale prin:} \\ U_i^* &= \sqrt{gH_iS_{0,i}} \end{split}$$
(27),

unde:

 $g = \text{accelerația gravitațională (= 9.81 m s^{-2})},$  $S_{0,i} = \text{gradient vatră (m m^{-1})}.$ 

În conformitate cu Liu (1977):

 $\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial Uc}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left( E \frac{\partial c}{\partial x} \right) - kc$ 

$$E_{p,i} = 0.18 \left(\frac{U_i^*}{U_i}\right)^{1.5} \frac{Q_i^2}{U_i^* R_h^3}$$
(28),

unde:

 $R_h$  = raza hidraulică (m), egală cu raportul ariei secțiunii la perimetrul umed.

În conformitate cu McQuivey și Keefer (1974):

$$E_{p,i} = 0.058 \frac{Q_i}{S_i B_i}.$$
 (29).

Această formulă este limitată la sistemele cu numere Froude  $(F = U/\sqrt{gH})$  mai mici de 0,5. Dacă această constrângere este depășită, software-ul afișează automat un mesaj de eroare și încheie operațiunea.

### Bilanțul masei

Software-ul generează o soluție numerică pentru ecuația uni-dimenională de advecțiedispersie-reacție:

(30),

unde:

 $c = \text{concentrația (mg l}^{-1}),$  t = timpul (s),  $U = \text{viteza (m s}^{-1}),$  x = distanța (m),  $E = \text{dispersia (m}^2 \text{ s}^{-1}),$  $k = \text{rată de descompunere de prim-ordin (d}^{-1}).$ 

Ecuația (30) poate fi exprimată sub formă numerică prin scrierea bilanțului masei în jurul fiecărui element, după cum se prezintă în Figura 6. Pentru a putea lua în considerare neuniformitatea, precum și pentru a conserva masa, fluxurile dintre elemente sunt specificate la fronturile lor din aval și din amonte pentru a oferi următoarea relație:

$$\frac{\partial M_i}{\partial t} = \left( UA_c c - EA_c \frac{\partial c}{\partial x} \right)_{i-1,i} - \left( UA_c c - EA_c \frac{\partial c}{\partial x} \right)_{i,i+1} - kV_i c_i$$
(31),

unde:

 $M_i$  = masa poluantului din cadrul elementului i (g) =  $V_i c_i$ .

Se presupune că aceste concentrații de la fiecare interfață sunt egale cu elementul din amonte (adică din spate sau diferența "din amonte") și, prin utilizarea diferențelor centrate ale gradienților, rezultă:

$$\frac{dM_{i}}{dt} = W(t) + Q_{i-1,i}c_{i-1} - Q_{i,i+1}c_{i} + E_{i-1,i}A_{c,i-1,i}\frac{c_{i-1} - c_{i}}{\Delta x_{i-1,i}} + E_{i,i+1}A_{c,i,i+1}\frac{c_{i+1} - c_{i}}{\Delta x_{i,i+1}} - kV_{i}c_{i}$$
(32),

unde:

W(t) = rata de încărcare a masei (g s<sup>-1</sup>),  $Q_{j,k} = \text{fluxul din elementul } j \text{ în elementul } k \text{ (m}^3 \text{ s}^{-1}\text{),}$   $E_{j,k} = \text{dispersia dintre elementele } j \text{ şi } k \text{ (m}^2 \text{ s}^{-1}\text{),}$   $\Delta x_{j,k} = \text{lungimea dintre punctele medii aferente elementelor } j \text{ şi } k \text{ (m):}$  $\Delta x_{j,k} = \frac{\Delta x_j + \Delta x_k}{2}$ (33),

unde:

 $\Delta x_i$  = lungimea elementului *i* (m).

Această ecuație poate fi scrisă ulterior pentru toate elementele și integrată numeric pentru a se obține soluția.

## Metoda de soluționare

Ecuațiile (25) și (32) sunt rezolvate numeric prin procedura Euler, după cum urmează:

- 1. Determinarea și înregistrarea valorilor inițiale pentru toate elementele.
- 2. Calculul derivativelor prin folosirea ecuațiilor (25) și (33).
- 3. Calculul noilor volume și mase prin folosirea procedurii Euler:

$$V_i(t + \Delta t) = V_i(t) + \frac{dV_i(t)}{dt}\Delta t$$
$$M_i(t + \Delta t) = M_i(t) + \frac{dM_i(t)}{dt}\Delta t$$

- 4. Calculul noilor efluxuri pentru fiecare element drept funcție a noilor lor volume.
- 5. Calculul altor parametrii hidraulici.
- 6. Calculul noilor concentrații:  $c_i = M_i/V_i$ .
- 7. Timp incremental:  $t = t + \Delta t$ .
- 8. Înregistrarea noilor valori. Dacă  $t \ge$  timpul final, se trece la Pasul 10.
- 9. Întoarcere la pasul 2.
- 10. Afişarea rezultatelor.

În absența dispersiei numerice, soluția hidraulică menționată mai sus este similară valului cinetic. Cu toate acestea, din cauza utilizării diferențierii de prim ordin a timpului inițial și diferențierii amonte a spațiului, nu sunt prezentate dispersii numerice și, prin urmare, similare cu soluția valului difuz. Tehnici de tipul procedurii Muskingum-Cunge încearcă reducerea acestor efecte; se alege soluția timpilor, pentru ca dispersia numerică să aproximeze difuzia reală manifestată prin valuri care fac obiectul efectelor forței gravitaționale.

Într-un mod similar, soluția aferentă masei generează, de asemenea, dispersie numerică suplimentară. Ca și în cazul elementelor hidraulice, se poate selecta soluția timpilor pentru a încerca sincronizarea dispersiei numerice cu dispersia reală.

Din păcate, sunt necesari timpi diferiți pentru soluțiile hidraulice și ale masei. Mai mult, deoarece sistemul studiat prezintă o gamă largă de fluxuri și viteze, timpii optimi vor varia foarte mult. Schema de mai jos încearcă să minimalizeze impactul ambelor efecte, în timp ce se utilizează un singur timp.

Pentru soluția masei, dispersia generală generată este alcătuită din dispersia model  $E_i$ , alături de unele dispersii numerice suplimentare  $E_{n,i}$ . De vreme ce se dorește obținerea dispersiei fizice corecte (adică, fie cea specificată de utilizator, fie cea calculată prin intermediul ecuațiilor (26)-(29))  $E_{p,i}$ , pe cale de consecință se dorește ca

$$E_{p,i} = E_i + E_{n,i}.$$
 (34).

O extindere a seriei Taylor (Chapra 1997) se poate utiliza pentru a relaționa dispersia numerică la spațiu și la timpi, drept:

$$E_{n,i} = 0.5U_i \Delta x_i - 0.5U_i^2 \Delta t.$$
 (35).  
Înlocuind ecuația (35) în (34) și rearanjând-o, rezultă:

$$E_{i} = E_{p,i} - 0.5U_{i}\Delta x_{i} + 0.5U_{i}^{2}\Delta t.$$
(36).

Pe cale de consecință, pentru a obține rezultate corecte, dispersia utilizată în cadrul modelului  $E_i$  este în mod automat stabilită ca fiind egala dispersiei dorite:  $E_{p,i}$  minus dispersia numerică  $E_{n,i}$ .

Există două constrângeri cu privire la stabilitate. În primul rând, o constrângere cu privire la aspectul pozitiv spațial poate fi formulată drept:

$$\Delta x_i < \frac{2E_i}{U_i}.$$
(37).

Această constrângere garantează soluții pozitive.

În plus, există o constrângere a timpilor în conformitate cu:

$$\Delta t < \frac{\Delta x_i^2}{U_i \Delta x_i + 2E_i + k \Delta x_i^2}$$
(38),

unde în partea dreaptă este timpul (timpii) de rezidență a elementului.

Acest lucru este analog condiției Courant stabilite pentru ecuația (32). Aceste criterii pot fi folosite pentru a dezvolta o procedură de soluționare care să maximizeze corectitudinea și să garanteze stabilitatea, așa cum se prezintă mai jos. În primul rând, utilizatorul specifică mărimea maximă dorită pentru lungimea elementelor din fiecare zonă de influență. Mai apoi, ecuația (37) este utilizată pentru a determina mărimea maximă permisă pe baza vitezei și dispersiei, adică prin utilizarea relației  $E_i = E_{p,i}$ . Dacă mărimea dorită este mai mare decât mărimea permisă, lungimea elementului este stabilită la mărimea permisă. Dacă nu, atunci lungimea elementului se stabilește la mărimea maximă dorită. Lungimea rezultată a elementului este ulterior împărțită în lungimea zonei de influență și rezultatul rotunjit în sus, pentru a stabili numărul de elemente aferent fiecărei zone de influență. În al doilea rând, ecuația (38) este utilizată pentru a stabili timpii maximi permiși pentru fiecare zonă de influență. Minimul acestor timpi este ulterior folosit pentru timpii folosiți în calcul pentru întreg sistemul. În final, acest timp, alături de mărimea elementului, este înlocuit în ecuația (35) pentru a calcula dispersia numerică. Dacă este mai mică decât dispersia fizică, ecuația (36) va fi folosită pentru calculul coeficientului de dispersie care trebuie introdus în model.

O descriere completă a modelului și a aplicării sale este oferită în cadrul Raportului Anexă și în documentul întocmit de Chapra și Whitehead (2009). Setarea râului și structura zonelor de influență sunt, de asemenea, ambele prezentate în cadrul Raportului Anexă și în documentul întocmit de Whitehead et al (2009).

## Figuri



Figura 1. România și localizarea comunei Roșia Montană



Figura 2. Bazinul hidrografic al râului Mureș și bazinele sale inferioare de recepție



**Figura 3.** Schemă care prezintă segmentarea unui model de deversare accidentală, ilustrându-se zonele de influență împărțite în elemente de calcul egale ca mărime (fluxurile externe ale sistemului sunt, de asemenea, prezentate)



Figura 4. Bilanțul fluxului pentru primul element din cadrul unei zone de influență



**Figura 5.** Secțiunea unui canal trapezoidal cu parametrii necesari definirii unice a geometriei:  $B_0 =$ lățime vatră, s = gradient lateral

Figura 6



Figura 6. Canal uni-dimensional împărțit într-o serie de elemente

## Bibliografie

Chapra SC. 1997. Ape de suprafață – Modelare calitativă. McGraw-Hill, New York.

Chapra SC & Canale RP. 2006. Metode numerice pentru ingineri. McGraw-Hill, New York

Chapra, S. & Whitehead, P. G. 2009 Modelarea impacturilor poluării în sisteme hidrografice: un nou model de dispersie și un studiu de caz al deversărilor miniere în sistemele hidrografice ale râurilor Abrud, Arieș și Mureș, din Transilvania, România. Hydrol. Res. 40(2–3), 306–322.

Fischer HB. 1968. Previziuni cu privire la dispersii apărute în cursuri de apă naturale. J. San. Engr. Div. ASCE 94(SA5), 927–944.

Fischer HB, List EI, Koh RCY, Imberger J & Brooks NH. 1979. *Amestecul în apele din interiorul țării și în cele din zona de coastă*. Academic, New York.

Johnson DB & Hallberg KB. 2005. Opțiuni pentru producția de ape acide: O revizuire. *Sci. Totl. Env.* **338**, 3–15.

Liu H. 1977. Previziuni cu privire la coeficienții de dispersie din cursuri de apă. *J. Envir. Engr. Div. ASCE* **103**(EE1), 59–69.

McQuivey RS & Keefer TN. 1974. O metodă simplă pentru anticiparea dispersiei în cursurile de apă. *J. Environ. Engr. Div. ASCE* **100**(EE4), 997–1011.

Neal C, Whitehead PG, Jeffery H & Neal M. 2005. Calitatea apei din râul Carnon, West Cornwall, November 1992 to March 1994: Impacturile deversărilor la Wheal Jane. *Sci. Totl. Env.* **338**, 23–41.

Nordstrom DK, Alpers CN, Ptacek CJ & Blowes DW. 2000. pH negativ și ape de mină extrem de acide în cadrul Iron Mountain, California. *Environmental Science și Technology* **34**, 254–258.

Rutherford JC. 1994. River Mixing. Wiley, New York.

Whitehead PG & Prior H. 2005 Bioremedierea apelor acide de mină: o introducere în Proiectul Wheal Jane Wetlands. *Sci. Totl. Env.* **338**, 15–21.

Whitehead PG, Hall G, Neal C & Prior H. 2005a. Comportamentul chimic al sistemului de bioremediere de la Wheal Jane. *Sci. Totl. Env.* **338**, 41–55.

Whitehead PG, Cosby BJ & Prior H. 2005b. Modelul Wheal Jane Wetlands pentru bioremedierea apelor acide de mină. *Sci. Totl. Env.* **338**, 125–135.

Whitehead PG, Butterfield D & Wade A. J. 2009. Simularea deversărilor de metale și de ape miniere în bazinele hidrografice prin utilizarea unui nou Model Integrat al Bazinelor de Recepție (Integrated Catchment Model) pentru metale: Impacturi poluante și strategii de restaurare pentru sistemul hdrografic alcătuit din râurile Arieș și Mureș din Transilvania, România *Cercetare Hidrologică*. Vol 40(2–3), 323–345