

ČESKÁ ZEMĚDĚLSKÁ UNIVERZITA V PRAZE  
FAKULTA ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ  
KATEDRA VODNÍHO HOSPODÁŘSTVÍ  
A ENVIRONMENTÁLNÍHO MODELOVÁNÍ



Matematický model proudění podzemní vody  
a transportu kontaminantů skupin NEL a BTEX v areálu  
Innogy Česká republika a.s., Karlovy Vary

## DIPLOMOVÁ PRÁCE

Vedoucí práce: prof. Ing. Pavel Pech, CSc.  
Diplomant: Bc. Maria Mursaikova

2019

# ČESKÁ ZEMĚDĚLSKÁ UNIVERZITA V PRAZE

Fakulta životního prostředí

## ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

Bc. Maria Mursaikova

Environmentální modelování

Název práce

**Matematický model proudění podzemní vody a transportu kontaminantů skupin NEL a BTEX v areálu Innogy Česká republika a.s., Karlovy Vary**

Název anglicky

**Mathematical model of groundwater flow and transport of NAPLs and BTEX groups contaminants in Innogy Česká republika a.s. area, Karlovy Vary**

---

### Cíle práce

Cílem mojí práce je seznámit se s problematikou numerického modelování. Vysvětlení řídicích rovnic a numerických metod, které se používají v jednotlivých software pro řešení proudění podzemní vody a transportu kontaminantů je také nezbytnou částí této diplomové práce.

Následujícím cílem je vytvoření funkčního matematického modelu proudění podzemní vody a kontaminantů v areálu Innogy Česká republika a.s., Karlovy Vary pro následné použití tohoto modelu při sanaci zájmového území.

### Metodika

- a) Vytvoření ustáleného modelu proudění podzemní vody, kalibrace a verifikace
- b) Příprava variant transientního proudění podzemní vody v souladu s probíhajícími sanačními pracemi
- c) Modelové řešení transportu kontaminantů benzen a naftalen pro varianty proudění
- d) Výpočty bilance kontaminantů při variantách sanačního čerpání

**Doporučený rozsah práce**

cca 40-60 str.

**Klíčová slova**

Kontaminace, podzemní voda, environmentální modelování

---

**Doporučené zdroje informací**

Appelo C.A.J., Postma D. (2006) *Geochemistry, Groundwater and Pollution*, (2nd ed), A.A. Balkema, Netherlands

Fetter C.W. (1999) *Contaminant Hydrogeology*; Prentice-Hall, New Jersey

Šrámek O., Datel J., Mls J. (2000) *Kontaminační hydrogeologie*, Vydatelství Karolinum Praha

---

**Předběžný termín obhajoby**

2018/19 LS – FŽP

**Vedoucí práce**

prof. Ing. Pavel Pech, CSc.

**Garantující pracoviště**

Katedra vodního hospodářství a environmentálního modelování

**Konzultant**

Ing. Daniel Kahuda

Elektronicky schváleno dne 22. 3. 2019

**doc. Ing. Martin Hanel, Ph.D.**

Vedoucí katedry

Elektronicky schváleno dne 22. 3. 2019

**prof. RNDr. Vladimír Bejček, CSc.**

Děkan

V Praze dne 11. 04. 2019

## Prohlášení

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracovala samostatně pod vedením prof. Ing. Pavla Pecha, CSc., a použila jsem pouze podklady uvedené v seznamu použité literatury.

V Praze dne .....

.....

## Poděkování

Ráda bych tímto poděkovala všem, kteří mi pomáhali se vznikem této práce. Prof. Ing Pavlu Pechovi, CSc., a Ing. Danielu Kahudovi děkuji za odborné vedení. Též bych ráda poděkovala za podporu své rodině a kamarádům.

V Praze dne .....

.....

## Abstrakt

Předkládaná diplomová práce se zabývá problematikou matematického modelování proudění podzemní vody a transportu kontaminující látek v porézním prostředí. Model byl vytvořen pro areál Innogy Česká republika a.s., Karlovy Vary v rámci probíhající sanace starých ekologických zátěží. V prostorách areálu docházelo od roku 1867 k výrobě svítiplynu z uhlí, která byla ukončena v roce 1967. Díky těmto skutečnostem bylo potřebné namodelovat aktuální proudění podzemních vod kvarterního kolektoru a předpokládaný výsledek sanačního zásahu.

Kolektor je charakterizován průlinovou propustností a volnou hladinou. Hladina podzemní vody je v průběhu roku závislá na chodu srážek a úrovni hladiny řeky Ohře. Tento kolektor je postižen kontaminací produkty z výroby svítiplynu. Při severní hranici areálu byla zjištěna kontaminace zemin nesaturované a saturované zóny ropnými látkami, které pronikly až na hladinu podzemní vody. Znečištění je v tomto prostoru kombinováno se znečištěním PAU. Znečištění podzemní vody ropnými uhlovodíky bylo zjištěno v centru kontaminace u dehtových jám a ve směru proudění podzemní vody od tohoto zdroje.

Práce prezentuje popis řídicích rovnic, vysvětlení fyzikálních zákonů a základních pojmů, které souvisejí s problematikou matematického modelování proudění podzemní vody. Součástí rešeršní části je i shrnutí numerických metod, které se používají pro vytváření modelů proudění podzemních vod a transportu kontaminantů.

Cílem této diplomové práce je vytvořit optimální, a hlavně funkční matematický model jako platformu pro vyhodnocování monitorovaných dat a vytváření prognóz v rámci sanačních prací na zájmové lokalitě.

Samotné modelování probíhalo pomocí takových softwaru jako QGIS, FREEWAT a Surfer'16.

Vizualizace výsledku ukázala, že během sanačního čerpání dochází k poklesu koncentrace znečišťujících látek a zmenšení plochy kontaminace. Některé transportní modely vykazovaly roztržení kontaminačního mraku. Za žádných okolností nedochází k úplnému vymizení kontaminace.

Výstupy aplikovaných modelů mohou sloužit jako orientační prognóza pro následující kroky sanačního zásahů. Na základě již existujících analýz mohou být zvažovány jako nejvhodnější doplňující metody například delší doba pozorování úrovně hladiny podzemní vody, hydrodynamické zkoušky, vzorkování podzemní vody a shluková analýzy kontaminace.

**Klíčová slova:** kontaminace, podzemní voda, environmentální modelování

## Abstract

This diploma thesis deals with problems of mathematical modelling of groundwater flow and transport of contaminants in porous medium. The model was developed for the Innogy Czech Republic, Karlovy Vary as part of the ongoing redevelopment of old ecological burdens. Since 1867 coal gas has been produced on the premises, which was stopped in 1967. Thanks to the coal gas extraction, it was necessary to model the current flow of underground water collateral and the expected result of the remediation intervention.

The collector is characterized by pass-through permeability and a free groundwater level. The groundwater level during the year depends on rainfalls and water level in the Ohře River. This collector is affected by contamination of the coal gas production products. At the northern boundary of the premises, was detected the contamination by soils of unsaturated and saturated zones with oil products that penetrated the groundwater level. Pollution in this area is combined with PAU pollution. Groundwater contamination by oil hydrocarbons has been found at the center of contamination at tar sumps and in the groundwater flow direction from this source.

The diploma thesis presents a description of general equations, explanation of physical laws and basic concepts related to the mathematical modeling of groundwater flow. Component of the research part is also a summary of numerical methods, which are used for creating models of groundwater flow and transport of the contaminants.

The aim of this thesis is to create an optimal and mainly functional mathematical model as a platform for the evaluation of monitored data and for the creation of forecasts within the remediation work in the area of interest.

The modelling was done by using softwares such as QGIS, FREEWAT and Surfer'16.

The visualization of the result showed that during the remediation pumping, the concentration of pollutants and the area of contamination decreased. Some transport models showed a bursting contamination cloud. However, there is no complete disappearance of contamination.

The outputs of applied models can serve as an orientation forecast for the following steps of remediation. On the basis of already existing analyses, the most suitable supplementary methods can be considered, for example, the longer observation of the groundwater level, hydrodynamical tests, groundwater sampling and cluster analysis of contamination.

Key words: contamination, ground water, environmental modelling





# Obsah

1	Úvod.....	1
2	Cíle práce .....	2
3	Teoretická část .....	3
3.1	Podzemní voda .....	3
3.2	Hydraulická výška .....	3
3.3	Řídící rovnice toku podzemní vody .....	4
3.3.1	Darcyho rovnice .....	4
3.3.2	Darcyho rovnice pro 3D-proudění .....	4
3.3.3	Zákon zachování hmoty .....	5
3.3.4	Rovnice pro 3D proudění podzemní vody .....	5
3.4	Parametry, popisující prostředí podzemní vody .....	5
3.4.1	Hydraulická vodivost .....	5
3.4.2	Transmisivita.....	6
3.4.3	Storativita .....	6
3.4.4	Pórovitost .....	7
3.4.5	Efektivní pórovitost.....	7
3.5	Matematické modelování proudění podzemní vody .....	7
	Matematické modely proudění podzemní vody .....	9
3.5.1	.....	9
3.5.2	Numerické metody .....	10
3.5.3	Podmínky .....	13
3.5.4	Kalibrace modelu .....	15
3.5.5	Verifikace modelu .....	16
3.6	Kontaminace podzemních vod .....	16
3.6.1	Zdroje znečišťujících látek.....	17
3.6.2	Transport kontaminantu .....	18
3.6.3	Advekční tok .....	18
3.6.4	Disperzní tok – hydrodynamická disperze a molekulární difúze.....	19
3.6.5	Parciální diferenciální rovnice pro 3D transport kontaminantů.....	20
3.6.6	Transportní modely kontaminace.....	21
3.6.7	Podmínky .....	21
3.7	Charakteristika kontaminantů vyskytujících se v lokalitě.....	22
3.7.1	Nepolární extrahovatelné látky .....	22
3.7.2	Polycyklické aromatické uhlovodíky .....	23
3.7.3	BTEX .....	23

3.8	Využitý software .....	24
3.8.1	MODFLOW (Three-Dimensional Finite-Difference Ground-Water Flow Model).....	24
3.8.2	MT3DMS (A Modular 3D Solute Transport Model).....	25
3.8.3	FREEWAT .....	26
3.8.4	Quantum GIS (QGIS) .....	26
3.8.5	Surfer.....	27
4	Praktická část .....	28
4.1	Charakteristika zájmového území .....	28
4.1.1	Klimatické poměry.....	29
4.1.2	Geomorfologické poměry .....	29
4.1.3	Hydrologické poměry.....	29
4.1.4	Geologické poměry .....	30
4.1.5	Hydrogeologické poměry.....	30
4.1.6	Situace kontaminace v lokalitě.....	31
4.2	Metodika.....	33
4.2.1	Přejatá data .....	33
4.2.2	Koncept modelového postupu.....	33
4.2.3	Postup sestavení jednotlivých matematických modelů.....	34
4.2.4	Vstupní parametry .....	35
4.2.5	Podmínky .....	37
4.2.6	Vizualizace.....	38
4.3	Výstupy modelů .....	38
4.3.1	Základní hydraulický model stacionárního proudění podzemní vody.	38
4.3.2	Hydraulický model proudění podzemní vody v areálu za podmínek čerpání	39
4.3.3	Základní model kontaminantů typu NEL (C <sub>10</sub> -C <sub>40</sub> ).....	40
4.3.4	.....	41
4.3.5	Model transportu kontaminantů typu NEL (C <sub>10</sub> -C <sub>40</sub> ) za podmínek sanačního čerpání .....	42
4.3.6	Základní model transportu kontaminantu typu BTEX (benzen).....	42
4.3.7	Model transportu kontaminantu typu BTEX (benzen) za podmínek sanačního čerpání .....	43
4.3.8	Základní model transportu kontaminantu typu PAU (naftalen).....	44
4.3.9	Model transportu kontaminantu typu PAU (naftalen) za podmínek sanačního čerpání .....	45
5	Diskuze.....	46
	Závěr .....	48

Seznam literatury .....	50
Seznam použitých symbolů a zkratek .....	54
Seznam obrázků .....	55
Seznam tabulek .....	56
Seznam příloh.....	57
Přílohy .....	58

# 1 Úvod

Jedním z vážných problémů, s nimiž se při zkoumání kvality povrchové a podzemní vody setkáváme, je vliv průmyslových imisí. Staré ekologické zátěže jsou nebezpečné pro životní prostředí a mají negativní vliv na lidské zdraví.

Celosvětově, podzemní voda tvoří okolo 20 % dostupných světových zásob sladké vody, využívá se často jako zdroj pitné i užitkové vody. Výzkum v oblasti podzemních vod je motivován potřebou poznání mechanismů a zákonitostí proudění podzemních vod v hydrogeologických strukturách, stanovení hydraulických vlastností hornin a chemického složení podzemních vod. Aplikovanou součástí hydrogeologických výzkumů je také problematika ukládání nebezpečných látek do horninového prostředí.

V období mezi lety 1867 až 1967 byla v západní části města Karlovy Vary, v městské části Tuhnice, prováděna výroba svítiplynu metodou vysoké tepelné karbonizací černého uhlí. S tímto souvisí charakter znečištění zemin a podzemních vod v okolí zájmového území. Ukončení aktivní dotace tohoto znečištění do horninového prostředí je možno datovat k ukončení provozu výroby plynu, k demolici a demontáži bývalé výrobní technologie. Přes dlouhodobé zastavení a odstranění převážné většiny původní výrobní technologie se v areálu, který je součástí území ochranného pásma stupně 2 A přírodních a léčivých zdrojů lázeňského města Karlovy Vary, stále nachází masivní kontaminace podzemní vody a zemin. Z hlediska ochrany vod je lokalita součástí chráněné oblasti přirozené akumulace vod (CHOPAV) Chebská pánev a Slavkovský les, která byla vyhlášena pro ochranu území, infiltrace a akumulace významných zdrojů podzemní vody.

V rámci opatření vedoucích k nápravě ekologických zátěží bylo rozhodnuto o sanačním čerpání, které má za cíl odčerpát kontaminující látky a zabránit dalšímu rozšiřování znečištění.

Diplomová práce se zabývá tímto konkrétním případem a jejím hlavním úkolem je vytvořit matematický model, který by správně popisoval tok podzemní vody a transport kontaminantů v areálu, probíhající buď přirozeně nebo v období sanačního čerpání. Následně se na základě výstupů jednotlivých modelů posuzuje účinnost sanačního zásahu.

Součástí této práce je i teoretický pohled na matematické modelování proudění podzemní vody a transportu kontaminantu. Je orientována tak, aby byla dobře pochopitelná i pro čtenáře neznalého problematiky, a to jak z matematického, tak i z hydrogeologického pohledu.

## **2 Cíle práce**

Cílem této diplomové práce bylo seznámit se s problematikou matematického modelování, obecnou charakteristikou numerických metod používaných pro řešení proudění podzemní vody a kontaminantů. Důležitým cílem bylo popsat a pochopit jednotlivé řídicí rovnice a základní pojmy, které s danou problematikou těsně souvisejí. Následně bylo nutné se seznámit s určitými druhy softwaru, které jsou celosvětově používány a vybrat ten, který by nejvíce vyhovoval řešení problému dané diplomové práce.

Praktickým cílem bylo vytvoření funkčního matematického modelu proudění podzemní vody a transportu kontaminantů v areálu Innogy Česká republika a.s., Karlovy Vary pro následné použití tohoto modelu při sanaci zájmového území.

### 3 Teoretická část

Tato část poskytuje základní informace související s tématem této práce. Popisuje základní definice spojené s pojmem podzemní voda a vysvětluje rovnice toku podzemní vody, které jsou používány pro matematické modelování. Dále následuje obecné vysvětlení procesů šíření podpovrchových kontaminantů a jsou vysvětleny rovnice pro transport kontaminantů a také významy každého výrazu. Jsou zde také popsány základy, postupy a cíle matematického modelování proudění podzemní vody a transportu kontaminantů. Tyto dvě části tvoří teoretický základ studie.

#### 3.1 Podzemní voda

Pod pojmem podzemní voda rozumíme veškerou vodu pod zemským povrchem bez ohledu na to, zda vytváří souvislou hladinu či nikoliv. Za podzemní vodu ale nepovažujeme vodu, která je fyzikálně nebo chemicky vázána na částice minerálů a hornin. Za vodu podzemní potom nepovažujeme vodu obsaženou v půdním horizontu, tzn. ve vrstvě na rozhraní litosféry a atmosféry (půdní voda). Dominantní část podzemní vody je zapojena do přírodního koloběhu vody – hydrologického cyklu. Je patrné, že převážná část pochází přímo či nepřímo ze srážek (Trakal, 2015).

Podzemní voda je rozdělena do různých zón v závislosti na stavu saturace, ačkoli hydrogeologové mají obvykle nejvíce zájem o nasycenou zónu (Bear, 1979).

Základním ukazatelem hydrogeologických poměrů je hladina podzemní vody (HPV). Jedná se o hydraulický potenciál podzemní vody (tlaková výška, která je na HPV nulová). Samotné měření hladiny podzemní vody se tak provádí pouze na místech přístupných pozorování (vrty, studny, piezometry atd.) (Trakal, 2015).

#### 3.2 Hydraulická výška

Hydraulická výška je měřítkem celkové energie kapaliny. Mechanická energie podzemní vody je tvořena gravitační potenciální energií, kinetickou energií a tlakovou energií kapaliny. Když tyto komponenty spojíme, výsledkem bude známá Bernoulliho rovnice:

$$\frac{v^2}{2g} + z + \frac{P}{\rho g} = \text{constant} \quad (1)$$

Kde

$v$  = rychlost proudění [L/T];

$g$  = tíhové zrychlení [L/T<sup>2</sup>];

$z$  = geodetická výška [L];

$P$  = tlak [M/L/T<sup>2</sup>];

$\rho$  = hustota kapaliny [M/L<sup>3</sup>] (Fetter, 2001).

Pokud se předpokládá, že je rychlost podzemní vody malá, rychlostní složka Bernoulliho rovnice zmizí a hydraulická výška může být zapsána takto (Fetter, 2001):

$$h = z + \frac{P}{\rho g} \quad (2)$$

### 3.3 Řídící rovnice toku podzemní vody

Pro pochopení dané problematiky je nezbytné mít představu o proudění podzemí vody od místa infiltrace do místa odběru vzorku. Proto je potřeba uvést základní rovnice, které tok podzemní vody řídí.

Teorie toku podzemní vody začíná základní rovnicí, známou jako Darcyův zákon pro jednu dimenzi.

#### 3.3.1 Darcyho rovnice

V roce 1856 publikoval Henry Darcy na základě experimentálního sledování průsaku vody písčitymi vrstvami zákon odporu při proudění vody porézním prostředím. Darcy zjistil, že průtok při rovnoměrném filtračním proudění vody v kruhové trubici s příčným průřezem je v lineárním vztahu k piezometrickému spadu:

$$Q = -KA \left( \frac{dh}{dl} \right) \quad (3)$$

kde  $K$  = hydraulická vodivost [ $L/T^1$ ], která charakterizuje odporové vlastnosti porézního prostředí a vlastnosti kapaliny při proudění;

$A$  = plocha průtočného průřezu [ $L^2$ ];

$dh/dl$  je změna výšky  $h$  podél délky  $l$ ;

$Q$  = průtočné množství [ $L^3/T^{-1}$ ] (Fetter, 2001).

Z této rovnice vyplývá, že pro rychlost proudění vody porézním prostředím platí vztah:

$$q = -K \left( \frac{dh}{dl} \right) \quad (4)$$

kde  $q$  = objemový tok neboli tzv. Darcyovská rychlost [ $L/T$ ].

$q$  tedy není skutečná rychlost, protože předpokládá průtok přes otevřenou trubku a nezohledňuje skutečnost, že voda je schopna protékat pouze póry mezi pevnými zrny. Pro zjištění skutečné rychlosti podzemní vody je tok Darcym dělen koeficientem pórovitosti zkoumaného prostředí (Fetter, 2001).

Záporné znaménko je nezbytné v souladu s matematickou konvencí týkající se gradientů, neboť to znamená, že průtok je směr opačný k hydraulickému gradientu (Fetter, 2001).

#### 3.3.2 Darcyho rovnice pro 3D-proudění

Předchozí rovnice popisuje proudění pouze v 1D vertikálním směru, kde  $h = h(z)$ .

Pro pochopení problematiky proudění podzemní vody v 3D doméně je potřeba přepsat funkce  $h = h(z)$  na  $h = h(x, y, z)$ :

$$q_x = -K \frac{dh}{dx} \quad q_y = -K \frac{dh}{dy} \quad q_z = -K \frac{dh}{dz} \quad (5)$$

Rovnice může být zapsána také v kratší formě (Wang & Anderson, 1982):

$$\mathbf{q} = -K \mathbf{grad} h \quad (6)$$

### 3.3.3 Zákon zachování hmoty

Zákon zachování hmoty neboli rovnice kontinuity je základní fyzikální rovnice, která umožňuje odvození řídicích rovnic pro proudění vody, konzervativní a nekonzervativní transport kontaminantů atd. (Kuraž, 2014).

Rovnice popisuje jev, který vysvětluje následující pravidlo: „Když do nějakého objemu vstupuje víc, než z něj vystupuje, znamená to, že musí dojít ke změně akumulovaného objemu.“ Změnu toku je tedy možno popsat jako parciální derivaci toků podle souřadnicových os ( $x$ ,  $y$  a  $z$ ) a změna toků musí být v závislosti na změně akumulovaného objemu podle času (časová osa  $t$ ). Takže pro proudění ve 3D prostoru platí:

$$\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = - \frac{\partial V}{\partial t} \quad (7)$$

kde

$V$  = objem [ $L^3$ ] (Kuraž, 2014).

### 3.3.4 Rovnice pro 3D proudění podzemní vody

Tok podzemní vody ve třech rozměrech může být popsán pomocí parciálních diferenciálních rovnic, zapsaných ve směřích  $x$ ,  $y$  a  $z$  a času  $t$ . Jsou psány na základě Darcyho zákona a rovnice kontinuity porézního prostředí:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) - Q = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (8)$$

Kde

$K_{xx}$ ,  $K_{yy}$ ,  $K_{zz}$  = hydraulická vodivost podél  $x$ ,  $y$  a  $z$  souřadnic [ $L \cdot T^{-1}$ ];

$h$  = piezometrická výška [ $L$ ];

$Q$  = objemový tok [ $L^3 \cdot T^{-1}$ ];

$S_s$  = specifická storativita [ $L^{-1}$ ] (Kumar, 2001).

## 3.4 Parametry, popisující prostředí podzemní vody

### 3.4.1 Hydraulická vodivost

Koeficient proporcionality  $K$ , který se objevuje v různých formách Darcyho zákona popsaných výše, se nazývá hydraulická vodivost. V izotropním prostředí může být definován jako specifický výboj na jednotkový hydraulický gradient. Je to skalární veličina [ $L/T$ ], která vyjadřuje snadnost, s jakou tekutina protéká porézním prostředím. Proto je to koeficient, který závisí jak na vlastnostech prostředí, tak i na vlastnostech



tekutiny. Relevantní vlastnosti kapaliny jsou hustota  $\rho$  a viskozita  $\mu$  (nebo kinematická viskozita  $\nu$ ). Relevantní vlastnosti prostředí jsou zejména distribuce velikosti zrna (nebo pórů), tvar zrna (nebo pórů), křivost, specifický povrch a pórovitost. Hydraulická vodivost  $K$  může být vyjádřena jako:

$$K = k\rho g/\mu = kg/\nu \quad (9)$$

Kde

$k$  = permeabilita nebo propustnost porézního prostředí [ $L^2$ ] (Nutting, 1930).

Propustnost závisí výhradně na vlastnostech porézního média. Z toho vyplývá, že pro porézní medium existuje široká škála hodnot propustnosti. Nekonsolidované hrubé sedimenty, jako jsou štěrky a písky, mají vyšší permeabilitu a umožňují, aby voda prošla volněji než přes jíly, které mají nižší vnitřní permeabilitu (Fetter, 2001).

### 3.4.2 Transmisivita

Transmisivita neboli průtočnost je vlastnost prostředí, která ukazuje schopnost zvodnělé vrstvy propouštět kapalinu.

Pro homogenní prostředí platí následující vzorec:

$$T = b \cdot K \quad (10)$$

kde

$T$  = Transmisivita [ $L^2 \cdot T^{-1}$ ];

$b$  = výška zvodnělé vrstvy [ $L$ ] (Pech, 2010).

### 3.4.3 Storativita

Storativita je pojem, který se vztahuje k vlastnostem prostředí. Je to v podstatě množství vody na jednotku objemu nasyceného porézního prostředí, které dokáže uvolnit nebo přijmout.

Specifická storativita zvodnělé vrstvy je definována jako objem vody, který se uvolní z jednotkového objemu této vrstvy při jednotkovém poklesu tlaku. Uvolnění vody v porézním prostředí se řídí dvěma procesy:

- zhutnění zvodnělé vrstvy vyvolané zvětšením efektivního napětí;
- rozpínavost vody způsobená poklesem tlaku ve vodě (Pech, 2010).

Specifická storativita je popsána následujícím vzorcem:

$$S_s = \rho_w g (\alpha + n\beta_v) \quad (11)$$

Kde

$\rho_w$  = hustota vody [ $M \cdot L^{-3}$ ]

$\alpha$  = stlačitelnost porézního prostředí [ $1/(M \cdot L \cdot T^{-2})$ ];

$\beta_v$  = stlačitelnost kapaliny [ $1/(M \cdot L \cdot T^{-2})$ ];

$n$  = porovitost [ $L^3 \cdot L^{-3}$ ]. (Fetter, 2001).

#### 3.4.4 Pórovitost

Pórovitost zvodnělého prostředí je vyjádřena jako podíl celkového objemu pórů, které jsou ve vymezeném objemu zvodnělého prostředí  $V_t$  :

$$n = \frac{V_t - V_s}{V_t} \quad (12)$$

kde

$V_t$  = celkový objem vzorků [ $L^3$ ];

$V_s$  = objem pevné části [ $L^3$ ] (Pech, 2010).

#### 3.4.5 Efektivní pórovitost

Pro řešení problematiky proudění podzemní vody je důležitým parametrem efektivní pórovitost  $n_e$  :

$$n_e = \frac{V_{pe}}{V_t} \quad (13)$$

kde

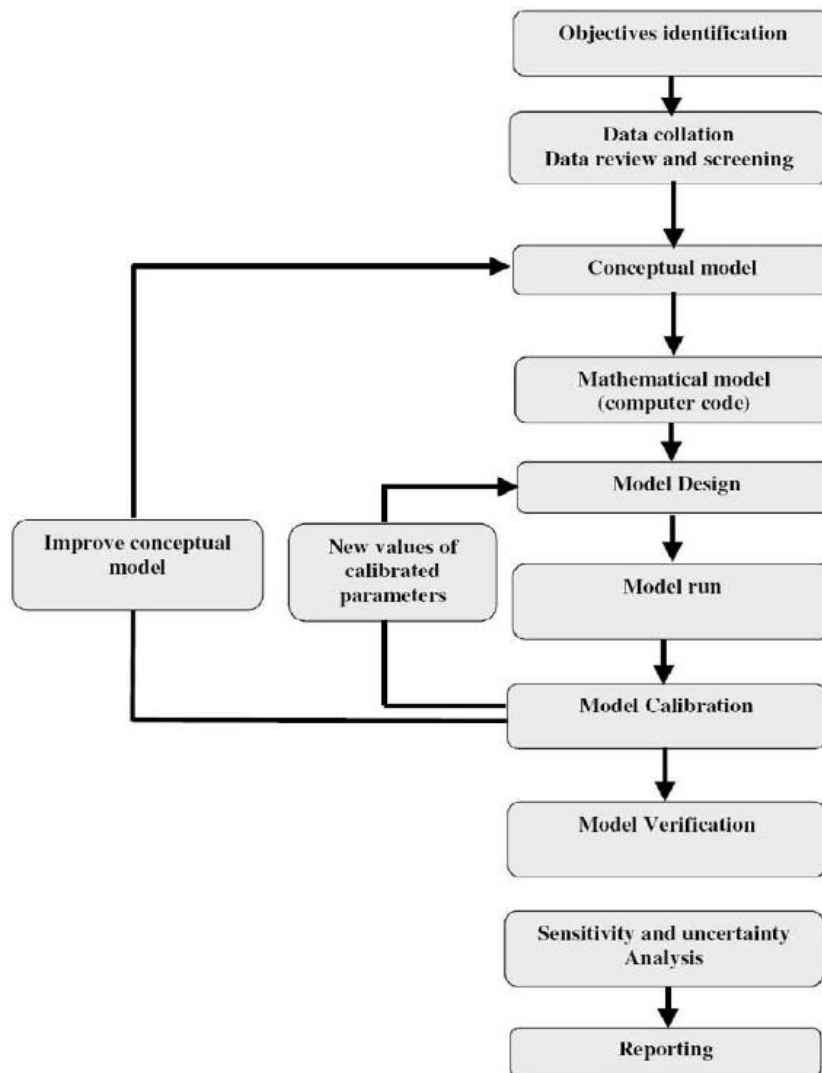
$V_{pe}$  = součet objem pórů, kde se při proudění podzemní vody porézním prostředím voda skutečně pohybuje (Pech, 2010).

### 3.5 Matematické modelování proudění podzemní vody

Modelování podzemních vod je způsob, jak reprezentovat systém v jiné formě, která zkoumá odezvu systému za určitých podmínek, nebo předvídat chování systému v budoucnu (Konig & Weiss, 2009).

Modelování a simulace jsou často používány v dnešních vědeckých a inženýrských oblastech, kdy je nepraktické a časově náročně experimentovat s reálnými systémy (James, 1978).

Prvním krokem v modelování je identifikace modelových cílů. Sběr a zpracování dat je klíčovou otázkou v procesu modelování. Nejdůležitějším a základním krokem v modelování je však konceptualizace modelu. Kalibrace, verifikace a citlivostní analýza můžou být provedeny po dokončení modelu a po prvním spuštění (Konig & Weiss, 2009).



Obrázek 1 Postupná metodika modelování toku podzemních vod (Tsang, 1991)

Koncept modelu je základní grafické znázornění komplexního systému přírodních vodonosných vrstev, které lze snadněji přizpůsobit tomu, aby se vynaložilo úsilí na rozvoj numerického modelu. Tento krok je ale často přehlížen, protože modeláři jsou omezeni zvoleným softwarem a/nebo typem numerické mřížky nebo sítě. Čím blíže se konceptuální model přibližuje situaci v terénu, tím přesnější je numerické řešení. „Strive for parsimony“ - nejjednodušší je nejlepší, ale zachovává dostatek složitosti, aby přiměřeně reprodukovala chování reálného systému (Andersson & Woesser, 1992).

Při vytváření modelové koncepce je třeba, abychom měli podrobné informace o:

- geologických útvarech;
- směru proudění podzemní vody;
- hydrologických podmínkách (řeky, jezera, mokřady);
- hydrogeologických parametrech (vodivost, storativita, pórovitost atd.);

- objemech čerpání z vrtu a zasakování do vrtu;
- pozorování změny HPV a kvality vody (Andersson & Woesser, 1992).

Definice hydrologických podmínek je nejsložitějším problémem při sestavení modelu. Přírodní podmínky, jako jsou velké oblasti zdrojů nebo propadů nebo vůbec nepropustné hranice, mohou být umístěny příliš daleko od modelované plochy, aby do něj mohly být zahrnuty. V praxi se to řeší tak, že se navrhuje větší modelované území, aby měly chyby v okrajových podmínkách malý vliv na HPV uvnitř sítě (Wang & Anderson, 1982).

Po dokončení hydrogeologické charakterizace místa a vyvinutí konceptualizace modelu následuje výběr vhodného softwaru, který by měl být schopen simulovat podmínky, vyskytující se na modelovaném území. Podobně by měly být na základě hydrogeologické diskreditace a konceptualizace modelu vybrány vhodné softwarové balíky pro řešení jednotlivých účelů modelu, například balík pro simulaci transportu kontaminantů (Kumar, 2001).

Koncept hydrogeologického modelu v procesu modelování podzemních vod tvoří základ pro vývoj numerického modelu. Neúspěch numerických modelů pro přesné předpovědi lze často připsat chybám v modelové koncepci (Andersson & Woesser, 1992).

Při numerickém modelování je prvním krokem vytváření mřížky/sítě neboli volba numerické metody. Je logické, že mřížka neboli síť musí být nakreslena před přiřazením vlastností, podmínek, umístěním vrtů atd. (Andersson & Woesser, 1992).

Také musí být definovány výstupy modelu, aby bylo možno určit, zda byly splněny cíle modelování (James, 1978).

Cílem modelování je tedy předpovědět hodnotu neznámé proměnné, například teploty podzemní vody nebo koncentraci kontaminantu v uzlových bodech. Před provedením prediktivní simulace by měl však být model kalibrován a verifikován (Wang & Anderson, 1995).

### **3.5.1 Matematické modely proudění podzemní vody**

Model je nástroj, který má představovat zjednodušenou verzi reality. Vzhledem k této široké definici modelu je zřejmé, že je všichni v každodenním životě používáme. Podobné modely podzemních vod jsou rovněž reprezentacemi reality, a pokud jsou správně postaveny, mohou být cennými prediktivními nástroji. (Wang & Anderson, 1995).

Matematické modely toku podzemní vody se používají od konce roku 1800. Tyto modely se většinou dělí na dva typy:

- Data-driven modely;
- Process-based modely.

Data-driven nebo „black-box“ modely používají empirické nebo statistické rovnice odvozené z dostupných dat pro výpočet neznámé proměnné z informací o jiné proměnné, kterou lze snadno změřit (Anderson & all, 2015).

Process-based modely využívají procesy a principy fyziky pro reprezentaci proudění podzemní vody v zájmové oblasti. Jsou buď stochastické nebo deterministické. Model se nazývá stochastickým, pokud má některý z jeho parametrů normální distribuci. Jinak je model deterministický. Skládají se ze sady diferenciálních rovnic, které popisují tok podzemní vody. Dále jsou součástí modelu okrajové podmínky, které určují výšky nebo toky podél hranic řešeného území. Pro časově závislé problémy je potřeba určit i počáteční podmínky, které specifikují hodnoty hydraulické výšky na počátku simulace (Anderson & all, 2015).

Modely podzemní vody mohou být jednoduché, jako jsou jednorozměrná analytická řešení, nebo tabulkové modely (Olsthoorn, 1985), nebo velmi sofistikované trojrozměrné modely. Vždy se doporučuje začít s jednoduchým modelem, pokud koncept modelu splňuje cíle modelování, a později se může složitost modelu zvýšit (Hill 2006). Bez ohledu na složitost používaného modelu je vývoj modelu stejný.

Správnost předpovědí modelu podzemní vody závisí na tom, jak dobře se model přibližuje reálné situaci. Je nutné zjednodušit předpoklady pro konstrukci modelu, protože situace v terénu je příliš složitá, aby byla přesně simulována (Anderson & all, 2015).

Matematické modely je tedy možno řešit analyticky nebo numericky. Obvykle jsou předpoklady potřebné pro analytické vyřešení matematického modelu poměrně restriktivní – například mnoho analytických řešení vyžaduje, aby prostředí, ve kterém jev se jev odehrává, bylo homogenní a izotropní. Abychom se vypořádali s realističtějšími situacemi, je nutné vyřešit matematický model aproximace pomocí numerických metod (Armstrong & Narayan, 1998).

### **3.5.2 Numerické metody**

S rozvojem numerické matematiky se do popředí v řešení úloh popsanych parciálními diferenciálními rovnicemi dostaly numerické metody. Pomocí numerických metod se vytvářejí modely, které umožňují na počítači simulovat požadovaný děj, např. proudění podzemní vody v dané oblasti (Valentová, 2007).

Numerické metody jsou založeny na rozdělení zájmové oblasti na menší buňky pomocí modelové mřížky (prostorová diskretizace) a času do řady „stresových“ období, během nichž zůstává napětí konstantní. Období „stresu“ je dále rozděleno na časové kroky a řídicí rovnice toku jsou vyřešeny pro každou buňku v každém časovém kroku, dokud se vypočtená hladina vody ve všech buňkách nemění o více než předem stanovené množství po sobě jdoucími výpočty. Takové rozdělení času je známo jako časová diskretizace (Armstrong & Narayan, 1998).

Numerické metody používají aproximaci řídicích rovnic. Na rozdíl od analytických řešení a AEM, není numerické řešení kontinuální v prostoru nebo čase. Nicméně

pomocí numerických metod můžeme řešit rovnice pro ustálené a neustálené proudění vody a kontaminantů, heterogenní a anizotropní prostředí se složitými počátečními a okrajovými podmínkami (Anderson & kol, 2015).

Přesnost řešení závisí především na přesnosti vstupních dat a potom na volbě numerické metody (Anderson & kol, 2015).

Podle Beneše (1995) jsou numerické modely obvykle rozděleny do dvou submodelů:

- Submodel proudění podzemní vody – výsledkem tohoto modelu je plošná distribuce potenciálů podzemní vody. Z těchto výsledků je možno vypočítat hodnoty vektorů rychlostí v jednotlivých bodech nebo prvcích sítě.
- Submodel transport látek – výstupem je časoprostorová distribuce koncentrace látek ve zkoumané oblasti.

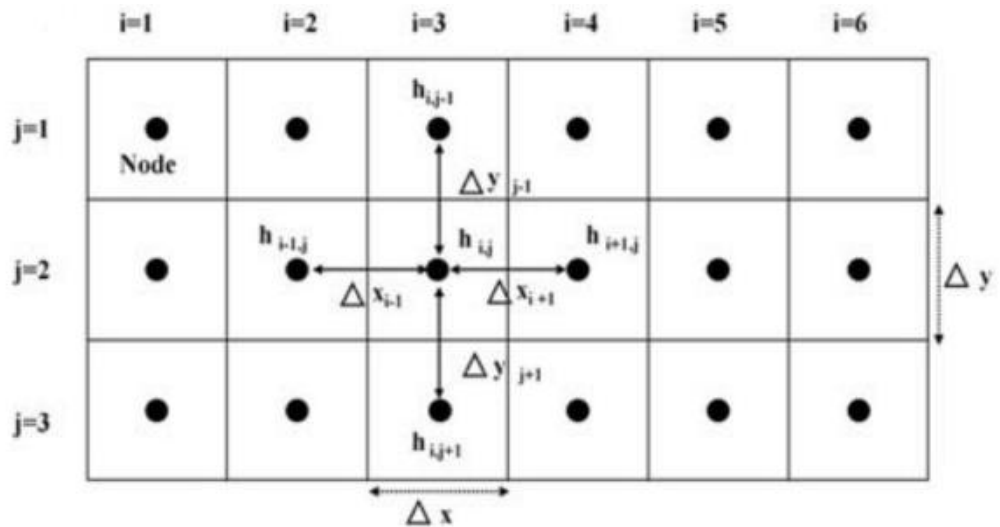
Při modelování toku podzemních vod a transportu kontaminantů se nejčastěji používá metoda konečných diferencí anebo metoda konečných elementů (Anderson & kol, 2015).

### **Metoda konečných diferencí**

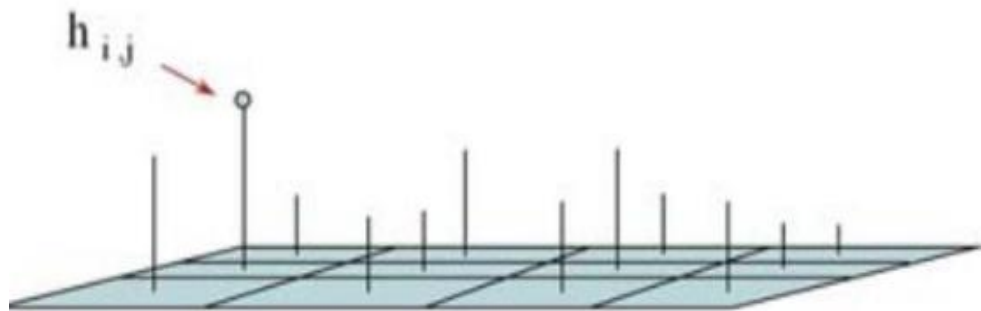
Metoda konečných diferencí (Finite Difference Method – FDM) je pro svou jednoduchost velice často používána k numerickému řešení řídicích rovnic proudění a transportu.

Podobně jako u ostatních numerických metod, je při aplikaci MKD prvním krokem časová a prostorová diskretizace nezávisle proměnných. Oblast proudění, která je prostorově kontinuální, je nahrazena množinou uzlových bodů a kontinuálně se měnící časová souřadnice je nahrazena posloupností časových úrovní. Následujícím krokem je nahrazení derivací vystupujících v PDR poměrnými diferencemi mezi uzlovými hodnotami. Tak se na jednotlivé časové úrovni získá soustava algebraických rovnic pro určení přibližných hodnot neznámé funkce v uzlových bodech (Císlarová & Vogel, 1998).

V metodě konečných diferencí se uzly nacházejí ve 3D prostoru pomocí indexů  $i, j, k$ . Tyto indexy slouží k určení relativních poloh v pravoúhlé mřížce. Například, v softwaru MODFLOW  $i$  = řádky,  $j$  = sloupce,  $k$  = vrstva (Anderson & kol, 2015).



Obrázek 2 2D horizontální mřížka metody konečných diferencí (Anderson & Wang, 1982)

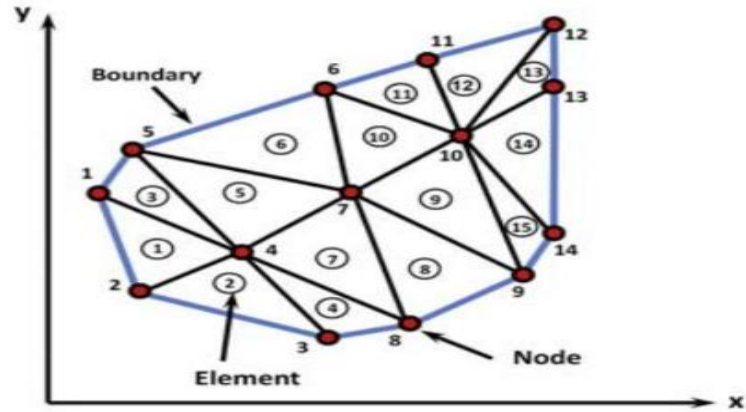


Obrázek 3 Definice  $h_{i,j}$  v MKD (Anderson & Wang, 1982)

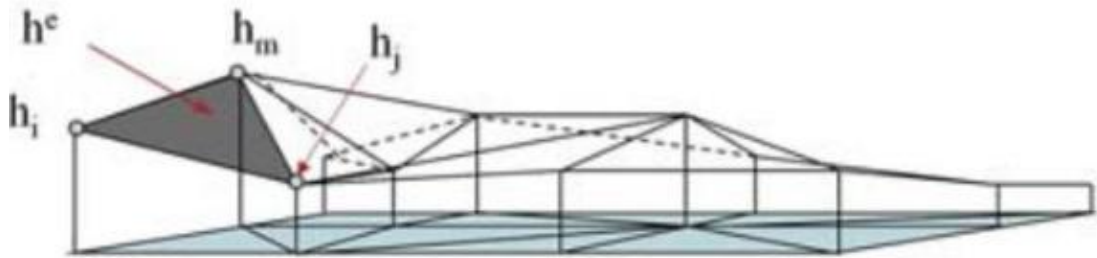
### Metoda konečných elementů

Metoda konečných prvků (Finite Element Method – FEM) má mnoho společného s MKD. V případě řešení jednorozměrných problémů jsou obě metody téměř stejné. Výhodou metody konečných prvků je snadnost, s jakou se vypořádává s geometrickou nepravidlostí hranic vícerozměrných oblastí proudění a s formulací/lokalizací okrajových podmínek, zdrojů a propadů (Císlerová & Vodel, 1998).

Umístění uzlů v síti FE je určeno pomocí souřadnic  $x, y, z$  (Anderson & kol, 2015).



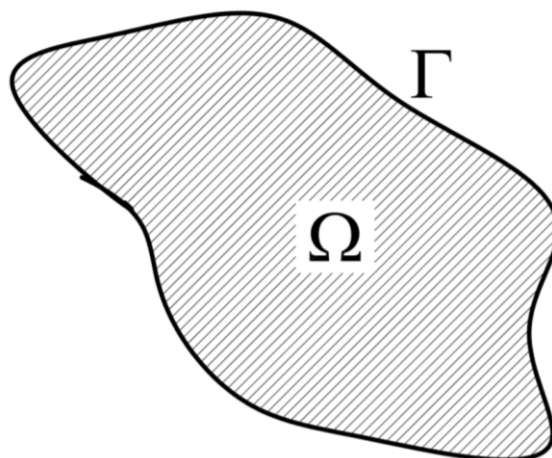
Obrázek 4 2D horizontální síť metody konečných prvků (Anderson & Wang, 1982)



Obrázek 5 Definice  $h_e$  v MKE (Anderson & Wang, 1982)

### 3.5.3 Podmínky

Aby byla řídicí rovnice proudění řešitelná, musíme ji doplnit počátečními a okrajovými podmínkami. Řešení se většinou provádí pro konkrétní časový úsek (zájmové období) a prostorovou oblast (oblast proudění). Oblast proudění označíme symbolem  $\Omega$  a její hranice symbolem  $\Gamma$  (Císlerová & Vogel, 1998).



Obrázek 6 Oblast  $\Omega$  ohraničená hranicí  $\Gamma$  (Kuráž, 2014)



### Počáteční podmínky

Na počátku časového období, pro které řešíme řídicí rovnice proudění, musí být známy hodnoty tlakové výšky ve všech bodech oblasti proudění.

$$h(\mathbf{x},0) = h_0(\mathbf{x}) \quad \text{pro } \mathbf{x} \in \Omega \quad (14)$$

kde  $h_0(\mathbf{x})$  = předepsané pole tlakových výšek v čase  $t=0$  (Císlarová & Vogel, 1998).

### Okrajové podmínky

Identifikace okrajových podmínek je prvním krokem v konceptualizaci modelu. Nesprávná identifikace okrajových podmínek ovlivňuje řešení a může mít za následek zcela nesprávný výstup. Okrajové podmínky lze z matematického hlediska rozdělit do tří hlavních typů (Konig & Weiss, 2009):

#### 1. Dirichletova podmínka (Tlaková okrajová podmínka)

Na části hranice oblasti proudění může být znám časový průběh tlakové výšky, to umožňuje předepsat na této části hranice Dirichletovou okrajovou podmínku:

$$h(\mathbf{x},t) = h_D(\mathbf{x},t) \quad \text{pro } \mathbf{x} \in \Gamma_D \quad (15)$$

kde  $h_D(\mathbf{x},t)$  = funkce popisující průběh tlaku na hranici  $\Gamma_D$  (Císlarová & Vodel, 1998).

#### 2. Neumannova podmínka (Toková okrajová podmínka)

Na jiné části hranice může být známo, jak velké množství vody touto hranicí protéká. V tomto případě požadujeme Neumannovu okrajovou podmínku:

$$\mathbf{nq} = -\mathbf{n}(\mathbf{K}\text{grad}h + \mathbf{K}_*3) = q_N(\mathbf{x},t) \quad \text{pro } \mathbf{x} \in \Gamma_N \quad (16)$$

kde  $q_N(\mathbf{x},t)$  = předepsaný objemový tok kolmo k dané části hranice (ve směru normály  $\mathbf{n}$ ).

Zvláštním případem může být okrajová podmínka charakterizující nepropustnou hranici (Císlarová & Vodel):

$$-\mathbf{n}(\mathbf{K}\text{grad}h + \mathbf{K}_*3) = 0 \quad (17)$$

#### 3. Newtonova podmínka

Tato okrajová podmínka se zavádí, je-li aquifer oddělen od sousedního aquiferu (nebo jiného vodního tělesa) relativně tenkou polopropustnou vrstvou (poloizolátorem). V takovém případě lze použít Newtonovu okrajovou podmínku:

$$-\mathbf{n}(\mathbf{K}\text{grad}h + \mathbf{K}_*3) = \frac{H - H'(\mathbf{x},t)}{C_r} \quad \text{pro } \mathbf{x} \in \Gamma_C \quad (18)$$

Člen na pravé straně představuje intenzitu průsaku polopropustnou vrstvou,  $H - H'$  je rozdíl hydraulických výšek na vnitřním a vnějším líci polopropustné vrstvy,  $C_r = B'/K'$  je rezistence (odpor) vrstvy o tloušťce  $B'$  a hydraulické vodivosti  $K'$  vůči průsaku. Předpokládá se, že  $H'(\mathbf{x},t)$  je známá funkce (Císlarová & Vodel).

Tato okrajová podmínka se velmi podobá Neumannově podmínce. Důvodem pro zavedení zvláštní kategorie je skutečnost, že se v rovnici 13 vyskytuje jak  $h$  (na pravé

straně je  $H = h+z$ ), tak grad  $h$ . Jedná se vlastně o kombinaci podmínek Dirichletovy a Neumannovy (Císlerová & Vodel, 1998).

V problematice proudění podzemní vody nejsou okrajové podmínky pouze matematickým omezením, ale představují také zdroje a jímky uvnitř systému (Reilly & Harbaugh, 2004). Výběr okrajových podmínek je pro vývoj přesného modelu kritický (Delleur, 2007).

Je výhodné použít jako hranice modelu fyzické hranice, pokud je to možné (např. nepropustné hranice, jezera, řeky), protože mohou být snadno identifikovány a konceptualizovány. Při určování přirozených hranic je třeba dbát zvýšené opatrnosti. Například dělení podzemních vod je hydraulickou hranicí a může měnit polohu podle toho, jak se mění podmínky v terénu. Pokud se pro nastavení okrajových podmínek v přechodovém modelu použijí kontury vodní hladiny, je obecně lepší specifikovat tok než HPV. V případě transienční simulace, pokud zasahují transienční efekty (např. čerpání) do hranic, působí specifická HPV jako nekonečný zdroj vody, zatímco specifický tok omezuje množství vody, které je k dispozici. Pokud je systém podzemní vody silně namáhán, mohou se mezní podmínky časem měnit. Z tohoto důvodu by měly být okrajové podmínky během simulace průběžně kontrolovány (Konig & Weiss, 2009).

#### **3.5.4 Kalibrace modelu**

Po prvním spuštění modelu se mohou výsledky modelu od měření v terénu lišit. Očekává se to proto, že modelování je pouze zjednodušením reality a nevyhnutelně jsou nezbytné aproximace a výpočetní chyby. Proces kalibrace modelu je zaměřen na jemné doladění výsledků modelu tak, aby odpovídaly měření v terénu (Konig & Weiss, 2009).

Prvním krokem v kalibraci je navržení modelu ustáleného proudění, který má být použit jako počáteční podmínky v pozdější přechodné simulaci. Ovšem abychom ověřili správnost řešení, je nutné, aby vypočítané HPV byly v souladu s HPV naměřenými v několika bodech v terénu. HPV, které byly vypočítány v prvním cyklu modelu, neodpovídají vždy hodnotám ve skutečnosti (Zheng & Wang, 1999).

Modelová kalibrace vyžaduje, aby byly skutečné podmínky řádně charakterizovány. Nedostatek správného popisu může mít za následek vytvoření modelu, kalibrovaného na soubor podmínek, které nevystihují skutečné podmínky v terénu (Kumar, 2001).

Kalibrace tedy znamená, že vzhledem k určité kombinaci parametrů a okrajových podmínek vytvoří model pole s naměřenými hodnotami hladiny vody v určitých bodech mřížky. Nicméně není záruka, že kombinace parametrů zjištěná pokusem a chybou je jedinečná (Zheng & Wang, 1999).

Kalibrační proces je důležitý proto, aby byl model prediktivní, a může být také použit pro inverzní modelování (Konig & Weiss, 2009).

### 3.5.5 Verifikace modelu

Dalším krokem po kalibraci je verifikace modelu. Jejím cílem je ověřit, zda kalibrovaný model funguje dobře na jakémkoliv datovém souboru. Protože kalibrační proces zahrnuje změnu různých parametrů (např. hydraulická vodivost, rychlost čerpání atd.) (Konig & Weiss, 2009).

Při verifikaci modelu se používají vybrané hodnoty hydrogeologických parametrů, zdrojů i propadů a okrajových podmínek, které by měly odpovídat historickým podmínkám v terénu. Obecně platí, že během verifikace bude nutné provést další vylepšení parametrů. Tato vylepšení by měla být taková, aby nezměnila kalibraci ustáleného stavu (Kumar, 2001).

Poté, co byl model kalibrován a verifikován, je připraven k použití pro predikci. V ideálním případě by kalibrace a ověření modelu měly být provedeny, když probíhá měření v terénu, takže data, požadovaná tímto modelem, mohou být snadno shromažďována (Wang & Anderson, 1995).

## 3.6 Kontaminace podzemních vod

Kontaminací podzemních vod se rozumí každá změna fyzikálních, chemických, popřípadě i biologických vlastností vody v porovnání s jejich přírodním stavem, a to přímým nebo vedlejším působením člověka. Znečištění vodu omezuje nebo zcela znemožňuje její využití (Hlavínek & Říha, 2004).

Existuje mnoho typů znečišťujících látek, které se dostanou do půdy, nenasycené zóny a podzemní vody. Jejich zdroje se mohou značně lišit.

Chemickou kontaminaci podzemních vod mohou způsobovat anorganické i organické látky. Řada z nich je v určitém množství přirozeně přítomna v přírodním prostředí a často i v hodnotách vysoce překračujících požadavky např. na pitnou vodu, tento stav však nelze označit jako kontaminaci podzemní vody. Naopak řada jiných látek (především látky organické apod.) jsou pouze umělého původu, jejich sebemenší výskyt v prostředí je důkazem jeho kontaminace (MŽP ČR, 2011; Vodohospodářský věstník, 2003).

Podzemní voda je oproti povrchové méně vystavena znečištění. Její znečištění většinou znamená také znečištění horninového prostředí, kde je likvidace znečištění složitá (Hlavínek & Říha, 2004).

Pokud se podzemní voda kontaminuje, obnovení kvality a odstranění znečišťujících látek směřováním a vyluhováním čistou podzemní vodou je velmi pomalý, a proto někdy prakticky nemožný proces (tj. proces je prakticky nezvratný). To je způsobeno velmi pomalým pohybem podzemních vod zejména ve vrstvách z velmi jemného materiálu. Tyto jevy jsou zvláště významné, jestliže jemné zrnité materiály, jako je hlína, jsou přítomny ve vodonosné vrstvě. V tomto případě jsou adsorbované částice polutantů po delší dobu opakovaně přiváděny do proudění podzemní vody (Bear, 1979).

Hlavním zdrojem informací o pohybu a hromadění vody a znečišťujících látek nesených vodou je měření HPV a koncentrací kontaminantů v pozorovacích vrtech (Bear, 1979).

### 3.6.1 Zdroje znečišťujících látek

Znečištění podzemních vod v důsledku antropogenních činností se vyskytuje v různých podobách. Znečištěná voda může proniknout do podzemní vody z kontaminovaného útvaru povrchové vody nebo kvůli netěsnosti v technologických přístrojích, jako jsou například ropovod, rezervoáry odpadních vod atd.. Kontaminující látka může být také vyluhována z půdy deštěm a dopravována do saturační zóny průsakem. Podobně je zdrojem znečištění prosakování skládek a odpadů (Kinzelbach, 1986).

Zdroje znečištění třídíme podle tvaru a rozlohy zasaženého území:

- bodové – např. skládky průmyslového odpadu, čerpací stanice pohonných hmot, sklady toxických látek atd.;
- liniové – dálkové ropovody a jiné produktovody, netěsné kanalizační stoky apod.;
- maloplošné až středněplošné – chemické závody, rafinerie, továrny, čistírny apod.;
- velkoplošné – aplikace průmyslových hnojiv a pesticidů, průmyslové imise.

Z hlediska působení v čase rozlišujeme, zda jde o jednorázové zatížení (např. havárie cisteren), nebo zda jde o trvající zátěž (havárie podzemních zásobních rezervoárů) (Císlerová & Vogel, 1998).

BTEX může být zaváděn do vody průmyslovými odpady a znečištěním ovzduší, ale úniky BTEX sloučenin do vody jsou spojeny především s únikem benzínu a ropných produktů nebo z důvodu existence přírodních ložisek ropy, uhlí a zemního plynu. Na těchto místech mohou být sloučeniny BTEX transportovány přes několik metrů za příznivých redoxních podmínek, což způsobuje, že jsou perzistentními znečišťujícími látkami jak v půdě, tak ve vodě (Cozzarelli & al., 1999).

BTEX sloučeniny jsou v prostředí hojnější než jejich polyaromatické protějšky. Jsou přítomny buď v plynných, nebo kapalných médiích v životním prostředí (Cozzarelli & al., 1999; Camilli & al., 2010).

Základní zdroje PAU v současné době se dělí na:

- přírodní zdroje – přirozené lesní požáry a vulkanická činnost;
- antropogenní zdroje – v dnešní době jsou v kontaminaci rozhodující, jedná se především o následující:
- spalování fosilních paliv v elektrárnách, domácích topeništích, ve vznětových a zážehových motorech;

- zahřívání a pyrolýzu prakticky jakékoliv organické látky;
- ochlazování kouřových plynů (kondenzují na sazích a polétavém popílku);
- odpady z koksáren, ropných závodů, výroben sazí a metalurgických provozů;
- uvolňování z materiálů, které je obsahují (např. asfaltové izolace střech nebo otěr asfaltových povrchů vozovek a pneumatik) (Popl & Fahrnich, 1995).

### 3.6.2 Transport kontaminantu

Přenos polutantů v nenasycené zóně je v podstatě omezen na vertikální proudění mezi spodní vrstvou a povrchem nasycené zóny. V nasycené zóně, kde jsou rozpuštěny polutanty, se šíří ve směru proudění podzemní vody, tj. v horizontálních směrech, a je možné rozšíření kontaminační skvrny na dlouhou vzdálenost (Kinzelbach, 1986).

Rozsah kontaminace v určitém čase závisí na rychlosti proudění a stabilitě znečišťujících látek. V závislosti na hustotě může polutant ovlivňovat i směr průtoku (hydrodynamicky aktivní rozpuštěná látka) (Kinzelbach, 1986).

Modely regionálního transportu znečišťujících látek lze rovněž popsat horizontálně dvourozměrnými modely, pokud jsou koncentrace ve vertikálním směru zprůměrovány. V blízkosti infiltrace nebo v silně stratifikovaných vodonosných vrstvách mohou být důležité trojrozměrné parametry transportu (Fetter, 1993).

Jakýkoli transportní model vyžaduje jako základní vstup rychlostní proudy průtoku. Předpokládáme, že tokové pole je buď známo a priori, nebo je modelováno jako paralelní pro transport pomocí modelu toku. Transportní model poskytuje výšky, ze kterých se vypočítávají specifické průtoky podle zákona Darcy. Transportní model vyžaduje také pórovou rychlost. Ta je získána ze specifického průtoku dělením efektivní pórovitosti  $n_e$  (Kinzelbach, 1986).

Matematický koncept nekonzervativního transportu popisuje součet advekčního a disperzního toku:

$$\vec{q}_c = \vec{q}_a + \vec{q}_d \quad (19)$$

Kde

$\vec{q}_c$  = hmotnostní tok rozpuštěné látky [M.L<sup>-2</sup>.T<sup>-1</sup>];

$\vec{q}_a$  = advekční tok [M.L<sup>-2</sup>.T<sup>-1</sup>];

$\vec{q}_d$  = disperzní tok [M.L<sup>-2</sup>.T<sup>-1</sup>] (Kuráž, 2014).

### 3.6.3 Advekční tok

Advekční transport je pohyb kontaminantů pouze díky toku podzemní vody. Množství látky, která se účastní transportu, je funkcí její koncentrace v podzemní vodě a hodnoty toku podzemní vody. U jednorozměrného transportu se, vzhledem k průřezové ploše pórovitého prostředí, hodnota průtoku vody rovná průměrné lineární rychlosti v čase

pouze póry, které se mohou podílet na proudění kapaliny při uvažovaných hydraulických gradientech. (Fetter 2001).

Pro stanovení advekčního toku platí následující rovnice:

$$\vec{q}_a = \vec{q}_w c \quad (20)$$

Kde

$\vec{q}_w$  = objemový tok [L.T<sup>-1</sup>];

$c$  = koncentrace rozpuštěných látek [M.L<sup>-3</sup>] (Kuráž, 2014).

Měření stupně dominance advekčního toku podle Zhenga & Wanga (1999) lze provést pomocí bezrozměrného Pecletova čísla:

$$Pe = \frac{|v|L}{D} \quad (21)$$

Kde

$|v|$  = absolutní hodnota vektoru rychlosti [L.T<sup>-1</sup>];

$L$  = délka [L];

$D$  = koeficient disperse [L<sup>2</sup>.T<sup>-1</sup>].

Větší hodnota Pecletova čísla znamená, že advekční tok je dominující (Zheng & Wang, 1999).

Hodnota advekčního toku se používá pro přibližný odhad rychlosti šíření kontaminantu. Pro tento odhad ale budeme potřebovat zavedení disperzního toku (Kuráž, 2014).

#### 3.6.4 Disperzní tok – hydrodynamická disperze a molekulární difúze

Disperzní tok v porézním prostředí znamená zvětšení oblastí kontaminačního mraku kolem těžiště kontaminačního toku, který je popisován advekčním tokem (Anderson, 1979).

Celkový koncentrační tok je tedy definován následujícím způsobem:

$$\vec{q}_d = -D \nabla c \quad (22)$$

Kde

$\vec{q}_d$  = disperzní tok [M.L<sup>-2</sup>.T<sup>-1</sup>];

$D$  = tenzor koeficientu hydrodynamické disperze [L<sup>2</sup>.T<sup>-1</sup>];

$\nabla c$  = gradient koncentrace (Kuráž, 2014).

Proces disperzního toku je způsoben mechanickou disperzí i molekulární difúzí. Souhrn těchto dvou jevů se nazývá hydrodynamická disperze (Anderson, 1979).

Stanovení hydromechanické disperze je provedeno následovně:

$$D = D_{hd} + D_m I \quad (23)$$

Kde

$D_{hd}$  = hydrodynamická disperze [ $L^2 \cdot T^{-1}$ ];

$D_m$  = molekulární difúze;

$I$  = matice identity (Kuráž, 2014).

Podle Kuráže (2014) vypadá rovnice pro stanovení hodnoty koeficientu hydrodynamické disperze takto:

$$D_{hd} = \alpha / \|\vec{q}\| \quad (24)$$

Kde

$\alpha$  = matice, která popisuje veličinu disperzivity;

$\|\vec{q}\|$  = absolutní hodnota objemového toku [ $L \cdot T^{-1}$ ].

Proces molekulární difúze popisuje šíření kontaminace z oblasti s větší koncentrací do oblasti, kde je koncentrace nižší. K rozptylu látky tedy dochází, pokud existuje gradient koncentrace, i když se tekutina nepohybuje. Molekulární difúze jako jev je důležitá v případech, když je rychlost proudění podzemní vody velmi nízká, jinak se zanedbává vůči mechanické disperzi (Zheng & Wang, 1999).

Koeficient molekulární difúze se vypočítá pomocí Fickova zákona:

$$D_m = \tau(\theta) D_m^* \quad (25)$$

Kde

$\tau(\theta)$  = koeficient tortuozity porézního prostředí [-];

$D_m^*$  = koeficient molekulární difúze pro čistou vodu (Kuráž, 2014).

### 3.6.5 Parciální diferenciální rovnice pro 3D transport kontaminantů

Parciální diferenciální rovnice popisující transport kontaminantů v trojrozměrné doméně toku podzemní vody lze psát následovně:

$$\frac{\partial(\theta C^k)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \theta D_{ij} \frac{\partial C^k}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta v_i C^k) + q_s C_s^k + \sum R_n \quad (26)$$

Kde

$C^k$  = koncentrace kontaminantu  $k$  [ $M \cdot L^{-3}$ ];

$\theta$  = pórovitost media [-];

$t$  = čas [T];

$x_i$  = vzdálenost podél příslušné souřadnice [L];

$D_{ij}$  = koeficient hydrodynamické disperze [ $L^2 \cdot T^{-1}$ ];

$V_i$  = rychlost [ $L \cdot T^{-1}$ ]; v souvislosti se specifickým tokem Darcy  $V_i = \frac{q_i}{\theta}$ ;

$q_s$  = specifický tok, který reprezentuje zdroj (+) nebo propad (-) [ $L^2 \cdot T^{-1}$ ];

$C_s^k$  = koncentrace zdroje/propadu pro  $k$  [ $M \cdot L^{-3}$ ];

$\sum R_n$  = konstanta chemické reakce [ $M \cdot L^{-3} \cdot T^{-1}$ ] (Zheng & Wang, 1999).

### 3.6.6 Transportní modely kontaminace

Aby bylo možno analyzovat, jak jednotlivé látky kontaminují zájmové území a předpovídat transport této kontaminace, můžeme používat matematické modelování. Migrace jednotlivých polutantů v podpovrchové vrstvě je silně ovlivněna vlastnostmi a heterogenitou prostředí (Feenstra et al., 1996).

Nejnáročnějším problémem v matematickém modelování transportu látek v půdách a podzemních vodách je charakterizace a kvantifikace geometrických, hydraulických a chemických vlastností porézního prostředí. Aby se snížila složitost modelování transportního procesu, je mnoho modelů založeno na předpokladech homogenní půdní struktury a instabilní sorpce (Elango & Jayakumar, 2001).

Základní problém transportu kontaminantů řeší koncentraci jednoho chemického druhu (Anderson & all, 2015).

### 3.6.7 Podmínky

Řídící rovnice modelu transportu kontaminace popisuje tranzientní změny koncentrace rozpuštěné látky v podzemních vodách. Proto jsou nezbytné počáteční podmínky pro získání a řešení řídicí rovnice. Počáteční podmínka v obecné podobě je napsána následovně:

$$C(x, y, z, t) = c_o(x, y, z) \text{ na } \Omega; t=0 \quad (27)$$

Kde

$c_o(x, y, z)$  = známá distribuce koncentrace;

$\Omega$  = modelová doména.

Řešení řídicí rovnice vyžaduje také specifikaci okrajových podmínek. Uvažujeme tedy tři obecné typy okrajových podmínek :

#### 1. Koncentrace podél hranice (Dirichletova podmínka)

Pro Dirichletovu okrajovou podmínku je koncentrace určena podél hranice po celou dobu simulace:

$$C(x, y, z, t) = c_o(x, y, z, t) \text{ na } \Gamma_1, t \geq 0 \quad (28)$$

kde

$\Gamma_1$  = hranice koncentrace;

$C(x, y, z, t)$  = koncentrace podél  $\Gamma_1$ .



## 2. Koncentrační gradient přes hranici (Neumannova podmínka)

$$\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} = f_i(x, y, z, t) \text{ na } \Gamma_2, t \geq 0 \quad (29)$$

kde

$f_i(x, y, z, t)$  = funkce, která reprezentuje normál disperzního toku k hranici domény  $\Gamma_2$ ;

## 3. Cauchyho podmínka (kombinace Dirichletovy a Neumannovy podmínky)

$$\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - q_i C = g_i(x, y, z, t) \text{ na } \Gamma_3, t \geq 0 \quad (30)$$

kde

$g_i(x, y, z, t)$  = funkce, která reprezentuje normál celkového toku (disperzní a advekční) k hranici domény  $\Gamma_3$ . V případě fyzicky nepropustné hranice jsou disperzní a advekční toky rovny nule, takže  $g_i(x, y, z, t) = 0$  (Zheng & Wang, 1999).

Obecně platí, že advekční tok dominuje nad disperzním tokem, takže rovnice č. 25 může být zapsaná i takto (Zheng & Wang, 1999):

$$-q_i C = g_i(x, y, z, t) \quad (31)$$

## 3.7 Charakteristika kontaminantů vyskytujících se v lokalitě

### 3.7.1 Nepocházející extrahovatelné látky

NEL zahrnuje rozsáhlou skupinu převážně nepolárních uhlovodíků. Z technického hlediska patří do skupiny nepolárních extrahovatelných látek (NEL):

- alkany;
- isoalkany;
- alkeny;
- cykloalkany;
- aromáty (nejběžnější jsou označovány jako skupina BTEX – benzen, toluen, ethylbenzen, xyleny);
- polyaromáty – polyaromatické uhlovodíky (PAU) (Šedivý, 1992).

Podle Císlerové & Vogela, (1998) spadají polutanty BTEX do skupiny těkavých organických látek (VOC). PAU a ropné uhlovodíky spadají do obtížně těkavých organických látek. Kontaminace těmito sloučeninami působí delší dobu v horninovém prostředí a spolu s vodou migruje v tomto prostředí. Organické kontaminanty se mohou vyskytovat ve 4 formách: plyn, kapalina, emulze a roztok (Pelikán, 1983).

Většina těchto uhlovodíků pochází zejména z minerálních olejů, benzínu, motorové nafty a ostatních sloučenin, kontaminujících podzemní vody již při malých množstvích. Při proniknutí kontaminantů až k hladině podzemní vody může též docházet k tvorbě filmu, a to již při koncentraci nad 0,1 až 2 mg/l (Šedivý, 1984).

### 3.7.2 Polycyklické aromatické uhlovodíky

Polycyklické aromatické uhlovodíky (PAU) tvoří velkou a heterogenní skupinu organických znečišťujících látek, které vznikají a jsou emitovány jako důsledek neúplného spalování organického materiálu. Proto tvoří majoritní skupinu látek přítomnou v dehtu (Lundstedt, 2003).

Jsou to krystalické látky bílého až nažloutlého zbarvení, které obsahují dvě a více benzenových jader a jsou složeny z atomů uhlíku a vodíku. Jejich teplota varu a tání stoupá s rostoucí molekulární hmotností. Rozpustnost ve vodě je minimální a s rostoucí molekulární hmotností se snižuje: pohybuje se v intervalu 3,30 (naftalen) až 6,63 (benzo(ghi)perylene) (IRZ, 2017st).

Jsou to toxické a karcinogenní látky. Mají mutagenní a teratogenní účinky. Jsou obsaženy v celé řadě průmyslových produktů – nafta, černouhelný dehet a produkty z něho získané, asphalt apod. (Рябов, 2009).

Tabulka 1 Rozpustnost a limity pro podzemní vodu pro jednotlivé PAU (Havel & Pertlík, 2010)

Název uhlovodíku	Rozpustnost [ $\mu\text{g/l}$ ]	Limit [ $\mu\text{g/l}$ ]
Antracen	73	1300
Benzo(a)antracen	14	0,029
Benzo(a)pyren	3,8	0,0029
Benzo(b)fluoranten	1,2	0,029
Benzo(ghi)perylene	6,63	----
Benzo(k)fluoranthen	0,76	0,29
Naftalen	3,30	0,14
Fenanthren	$1,29 \cdot 10^3$	----
Fluoranthen	260	630
Chrysen	2	2,9
Indeno(1,2,3-cd)pyren	62	0,029
Pyren	135	87

### 3.7.3 BTEX

BTEX je zkratka používaná pro čtyři příbuzné sloučeniny: benzen, toluen, etylbenzen a xyleny. Jsou to bezbarvé a vysoce hořlavé kapaliny, nemísitelné s vodou. Tyto sloučeniny se nacházejí v uhelném dehtu, ropě a širokém sortimentu ropných produktů (Leush & Bartkow, 2010).

BTEX sloučeniny jsou těkavé monocyklické aromatické sloučeniny s šestiuhlíkovým benzenovým kruhem jako jejich jádrovou strukturou. Vzhledem k jejich uzavřeným strukturám se tyto sloučeniny, a zejména benzen, obecně považují za nereaktivní

druhy. Nicméně je dobře známo, že tyto sloučeniny mají schopnost podstoupit hydrogenaci a určité substituční reakce (Bunnett & all, 1953). Jejich lepší schopnost rozpouštění ve vodě vzhledem k jejich polyaromatickým protějškům je způsobena nízkými hodnotami rozdělení koeficientu oktanol/voda ( $K_{ow}$ ), které upřednostňují hydrofilní rozpouštění, a to i přes jejich hydrofobní povahu (Anderson, 2000, Pruden & all, 2003, Poulsen & all, 1992).

Vzhledem k vysoké koncentraci sloučenin BTEX v ropě a uhlí a masivnímu využívání ropných produktů jako zdroje energie, jako rozpouštědel a při výrobě jiných organických chemikálií vytváří jejich přítomnost ve vodě nebezpečí pro veřejné zdraví a životní prostředí (Pillai, 2010).

Kontaminaci podzemních vod sloučeninami BTEX je obtížné napravit, protože tyto sloučeniny jsou relativně rozpustné ve vodě a mohou rychle proniknout do vodonosné vrstvy (Pillai, 2010).

Tabulka 2 Rozpustnost a limity pro podzemní vodu pro jednotlivé BTEX (Havel & Pertlík, 2010)

Název uhlovodíku	Rozpustnost [ $\mu\text{g/l}$ ]	Limit [ $\mu\text{g/l}$ ]
Benzen	1790	0,39
Toluen	Nerozpustný	860
Ethylbenzen	150	1,3
Xylen	200	190

### 3.8 Využitý software

#### 3.8.1 MODFLOW (Three-Dimensional Finite-Difference Ground-Water Flow Model)

MODFLOW (Harbaugh et al., 2000) je software pro modelování proudění podzemní vody, vyvinutý US Geological Survey.

Hlavními cíli při navrhování modelu MODFLOW bylo vytvořit takový program, který může být snadno modifikován, zároveň je snadno použitelný a udržovatelný, dále může být proveden na různých počítačích s minimálními změnami a má schopnost spravovat velké soubory dat vyžadované při řešení problémů (Harbaugh et al., 2000).

Výhodou modelu MODFLOW jsou četná zařízení pro formátování dat, snadná výměna dat ve standardní podobě, rozšířené celosvětové zkušenosti, nepřetržitý vývoj a dostupnost zdrojového kódu (Hill & Zheng, 2011).

MODFLOW-2005 (Harbaugh, 2005) simuluje ustálené a neustálené proudění v nepravidelně tvarovaném průtokovém systému, ve kterém mohou být vodonosné vrstvy propustné, nepropustné nebo jejich kombinací. Lze simulovat průtok z vnějších napětí, jako je přítok do studní, plošné zdroje, evapotranspirace, přítok do kanalizace a přítok přes koryta. Hydraulické vodivosti nebo transmisivita pro jakoukoliv vrstvu se mohou lišit prostorově a mohou být anizotropní, ale koeficient specifické storativity

může být heterogenní. Specifikované hranice výšky a toku mohou být simulovány tak, že tok může být závislý na výšce přes vnější hranici modelu, která umožňuje, aby voda byla dodávána do hraničního bloku v modelované oblasti rychlostí úměrnou aktuálnímu rozdílu výšek mezi „zdrojem“ vody mimo modelovanou oblast a hraniční blok.

MODFLOW je tedy počítačový program, který numericky řeší trojrozměrnou rovnici průtoku podzemní vody pro porézní médium pomocí metody konečných rozdílů. Ačkoli MODFLOW byl navržen tak, aby byl snadno vylepšen, design byl zaměřen na doplnění rovnice průtoku podzemní vody. Často je třeba řešit další rovnice: například transportní rovnice a rovnice pro odhad hodnot parametrů (Harbaugh et al., 2000).

Prostorová diskretizace v mřížce metody MKD v software MODFLOW je obdélníková ve vodorovném směru, ale může být zkreslena i vertikálně, aby tento model lépe popisoval podrobnosti modelu v oblastech zájmu (Harbaugh et al., 2000).

Modulární struktura MODFLOW se skládá z hlavního programu a řady vysoce nezávislých podprogramů, které se nazývají moduly. Moduly jsou seskupeny v balíčcích. Každý balíček se zabývá specifickou vlastností hydrologického systému, který má být simulován, například tok z řeky nebo proudění do kanalizace atd. (Anderson & Woessner, 1982).

Rozdělení MODFLOW do modulů umožňuje uživateli prověřit specifické hydrologické vlastnosti systému modelů samostatně. To také usnadňuje rozvoj dalších funkcí, protože nové moduly nebo balíčky mohou být přidány do programu bez úpravy stávajících (Anderson & Woessner, 1982).

Vzhledem k rozsáhlé veřejně dostupné dokumentaci a schopnosti tohoto softwaru simulovat široké spektrum různorodých problémů, se stal MODFLOW celosvětovým standardem modelování průtoku podzemní vody. MODFLOW se používá k simulaci systémů pro vodní nádrže, sanace kontaminovaných území a odvodňování důlních vod. Při správném použití je MODFLOW uznávaným standardním modelem (Hill & Zheng, 2011).

### **3.8.2 MT3DMS (A Modular 3D Solute Transport Model)**

MT3DMS je modulární multispeciální trojrozměrný transportní model, který lze použít k simulaci změny koncentrací nekonzervativního transportu kontaminantů v podzemních vodách s ohledem na advekci, disperzi, difúzi, některé základní chemické reakce a s různými typy okrajových podmínek. Základní chemické reakce zahrnuté v modelu jsou řízeny rovnováhou nebo jsou omezeny rychlostí lineární nebo nelineární sorpce a nevratné nebo reverzibilní kinetické reakce prvního řádu (Zheng & Wang, 1999).

MT3DMS může vyhovět velmi obecným systémům prostorové diskretizace a okrajových podmínky, včetně:

- omezené, neomezené nebo variabilně omezené/neomezené vrstvy vodních vrstev;

- nakloněné vrstvy modelu a proměnlivou tloušťku buňky ve stejné vrstvě;
- stanovené hranice koncentrace nebo hmotnostního toku (Zheng&Wang, 1999).

MT3DMS v sobě zahrnuje tři dominantní třídy řešení transportních problémů:

- metodu konečných diferencí;
- metodu, která je založena na Euler-Lagrangeově rovnici;
- TDV metodu konečných objemů.

Předpokládá se, že kombinace těchto technik řešení, z nichž každá má své silné a slabé stránky, nabízí nejlepší přístup k řešení nejrozsáhlejších transportních problémů s požadovanou efektivností a přesností (Zheng&Wang, 1999).

### 3.8.3 FREEWAT

Platforma FREEWAT (Free and open source software tools for water resource management) je velký plugin neboli zásuvný model integrovaný do pracovního prostředí QGIS. Je nástrojem pro analýzu, interpretaci a vizualizaci hydrogeologických a hydrochemických dat a problematiku kvality, zaměřeným také na analýzu pokročilých časových řad (Serrano & kol, 2017).

Architektura FREEWAT je založena na integraci různých softwarových nástrojů (tzv. FREEWAT pilířů): SQLITE relační databázový manažer, externí (volné a otevřené zdrojové kódy), jako jsou programy MODFLOW, stejně jako kódy speciálně vyvinuté pro FREEWAT. Způsob propojení těchto nástrojů se provádí pomocí programovacího jazyka Python (Serrano & kol, 2017).

Transport kontaminantů se v prostředí FREEWAT řeší pomocí MT3DMS balíku (Serrano & kol, 2017).

### 3.8.4 Quantum GIS (QGIS)

QGIS je svobodný a multiplatformní geografický informační systém (GIS) a nabízí mnoho společných funkcí jako software ArcGIS, které jsou poskytovány základními funkcemi a pluginy.

Tento software umožňuje zejména prohlížení, tvorbu, editaci rastrových a vektorových geodat a tvorbu mapových výstupů.

Geografický informační systém je definován jako počítačově podporované mapování a kartografická aplikace, soubor prostorových analytických nástrojů, typ databázových systémů (Stafford 1991).

Geografická data mohou být reprezentována v QGIS jako objekty nebo pole. V objektovém přístupu jsou prvky reálného světa reprezentovány jednoduchými objekty, jako jsou body a čáry. Objekty (reprezentující prvky) jsou charakterizovány geometrií, topologií a hodnotami, které nejsou prostorové. Na druhou stranu jsou v terénním přístupu funkce reálného světa reprezentovány jako pole dat atributů bez

definování objektů. Tento přístup poskytuje hodnoty atributů v libovolném místě. V GIS je rozdíl mezi objekty a poli spojen s vektorovými datovými modely a rastrovými datovými modely (Goodchild 1992). Vektorový datový model je objektově orientovaný přístup k reprezentaci vlastností reálného světa a nejlépe se používá k reprezentaci diskrétních objektů.

Geografický informační systém (GIS) se ukázal být účinným nástrojem pro zpracování prostorových dat a k rozhodování v několika oblastech včetně inženýrských a environmentálních oborů (Stafford 1991). Kombinované použití dálkového průzkumu Země a GIS je navíc cenným nástrojem pro analýzu rozsáhlých hydrogeologických dat a pro simulační modelování komplexních podpovrchových toků a transportních procesů za nasycených a nenasyčených podmínek (Loague a Corwin 1996).

### **3.8.5 Surfer**

Surfer je komerční software pro vytvoření map různých typů, povrchových analýz a gridingu. Tento software je založen na mřížce, kde se nepravidelně rozmístěné souřadnice x, y a z interpolují na pravidelně rozložené síť. Mřížky do prostředí tohoto softwaru mohou být importovány z jiných zdrojů, jako je například USGS (US Geological Survey) (Surfer, 2017).

## 4 Praktická část

Tato kapitola je praktickou částí diplomové práce. První podkapitola je zaměřena na popis zájmového území, konkrétně na klimatické, geomorfologické, hydrologické, geologické a hydrogeologické poměry a na situaci kontaminace v lokalitě.

Ve druhé podkapitole popisují metodický přístup pro tvorbu jednotlivých modelů proudění podzemní vody a transportu kontaminujících látek. Popisuje se zde práce s datovými soubory, konceptuální model, jednotlivé postupy samotného modelování, vstupní parametry, podmínky a způsoby vizualizace modelových výstupů.

Třetí podkapitola obsahuje výstupy modelů formou map.

### 4.1 Charakteristika zájmového území

Zájmový areál Innogy Energie a.s. je situován v západní části lázeňského města Karlovy Vary, v městské části Tuhnice. Předmětný areál je umístěn v údolní nivě meandru řeky Ohře, která protéká podél severovýchodní hranice území zájmu. Areál se nachází pod ústím jak Chodovského potoka, tak Rolavy a nad ústím Teplé. Jižní okrajovou částí areálu prochází kanál (využíván do r. 1960), který přetíná meandr řeky Ohře ve směru západ-východ.

Území je ploché s nadmořskými výškami v rozmezí 373–374 m. Tato část představuje prakticky největší sníženinu terénu blízkého okolí lokality. Leží jen nepatrně (cca 3 m nad běžnou úrovní hladiny řeky (vtok Rolavy na dolní straně meandru – 369,6 m n. m.). Reliéf terénu stoupá mírně směrem k jihovýchodu, kde nadmořské výšky vrcholů kopců překračují výjimečně 500 m (Bukový vrch, 700 m n. m.) (EMSA Ekosystem © 2017).

Lokalizace předmětného areálu je patrná z přílohy 1. Letecký snímek vybraného území je obsahem přílohy 2.

Předmětné území bylo v minulosti dlouhodobě využíváno k výrobě plynu vysokoteplnou karbonizací černého uhlí (1867–1967), v současné době jsou v areálu lokalizovány činnosti údržbářského charakteru (plynárenských zařízení), administrativy a garážování vozidel (EMSA Ekosystem © 2017).

Znečištění zemin a podzemních vod svázané s areálem pochází z bývalé výrobní činnosti – výroby plynu vysokoteplnou karbonizací černého uhlí. Ukončení aktivní dotace znečištění do horninového prostředí je možno datovat k ukončení provozu výroby plynu, k demolici a demontáži bývalé výrobní technologie, tj. do období před více než 40 lety. Přes dlouhodobé odstavení a odstranění převážné většiny původní výrobní technologie se v areálu stále nachází masivní kontaminace podzemní vody a zemin. K úniku závadných látek do nesaturované a saturované zóny docházelo především netěsnostmi dehtových jímek a nebezpečným ukládáním meziproductů a odpadů z výroby svítiplynu v areálu plynárny (EMSA Ekosystem © 2017; San-Tuhnice © 2019).

Z hlediska ochrany vod je lokalita součástí chráněné oblasti přirozené akumulace vod (CHOPAV) Chebská pánev a Slavkovský les. CHOPAV Chebská pánev a Slavkovský les byla vyhlášena pro ochranu území infiltrace a akumulace významných zdrojů podzemní vody (EMSA Ekosystem © 2017; San-Tuhnice © 2019).

Areál je součástí území ochranného pásma stupně II a přírodních léčivých zdrojů lázeňského místa Karlovy Vary. V této souvislosti je významným faktem pro neprodlenou realizaci sanačních opatření nová skutečnost, zjištěná v rámci předsanačního průzkumu, tj. prokázání komunikace kontaminovaných vod mělkého kvartérního kolektoru a minerálních vod karlovarské termy (EMSA Ekosystem © 2017; San-Tuhnice © 2019).

#### **4.1.1 Klimatické poměry**

Klima zájmové lokality spadá podle Quitta (1971) do mírně teplé oblasti MT 4. Podnebí je charakterizováno jako mírně teplé a vlivem mírného srážkového stínu poměrně suché. Zvláště během zimních měsíců dochází k silným regionálním teplotním inverzím. Teplota vzduchu se pohybuje v rozsahu mezi 7° až 8,5 °C, absolutní roční maxima od 29,8° do 37 °C, absolutní roční minima od -13,9° do -22 °C. Průměrné roční srážky dosahují 662 mm. (EMSA Ekosystem © 2017).

#### **4.1.2 Geomorfologické poměry**

Z geomorfologického hlediska je zájmová lokalita zapojena do podcelku Sokolovská pánev a okrsku Chodovská pánev. Chodovská pánev je tektonická sníženina, která je vyplněna mírně zvlňeným reliéfem a složena ze souvrství oligocenních a miocenních písků a jílu s obsahem hnědouhelných slojí, které spočívají na podloží fylitů, svorů a kvarcitů krušnohorského krystalinika a biotitických žul karlovarského masívu, místy silně kaolinicky zvětralých. Oblast je charakterizována erozně denudačním reliéfem s menšími tektonicky podmíněnými sníženinami a hřbety (Demek, 1987).

#### **4.1.3 Hydrologické poměry**

Z hydrologického hlediska je areál situován na pravém břehu meandru Ohře, která protéká v bezprostřední blízkosti. Jižní okrajovou částí areálu prochází kanál (využíván do r. 1960), který přetíná meandr řeky ve směru západ-východ. V blízkosti areálu napájí tok Ohře tři povrchové vodoteče. Jako levostranný přítok se ve vzdálenosti cca 300 m západním směrem od areálu vlévá Chodovský potok, říčka Rolava vtéká též z levé strany cca 200 m severně od areálu a říčka Teplá jako pravostranný přítok napájí Ohři cca 1,5 km východně od závodu (EMSA Ekosystem © 2017; San-Tuhnice © 2019).

Území s předmětným areálem hydrologicky náleží do hlavního povodí Labe s číslem hydrologického pořadí 1-13-01 Ohře po Teplou, dílčího povodí Ohře od soutoku se Stokou po soutok s Chodovským potokem charakterizovaného číslem hydrologického pořadí 1-13-01-140 a plochou 25,346 km<sup>2</sup>. Správcem řeky Ohře v karlovarském



regionu je s. p. Povodí Ohře, závod Karlovy Vary. Řeka Ohře je v předmětném povodí č. 1-13-01-140 vyhlášky č. 267/2005 Sb., kterou se mění vyhláška č. 470/2001 Sb., ve znění vyhlášky č. 333/2003 Sb., řazena mezi významné toky. Dle nařízení vlády č. 61/2003 Sb. patří mezi citlivé oblasti. Podél zájmového části koryta řeky Ohře je vymezeno zátopové území Q100 (Dibavod, 2019).

Výřez ze základní vodohospodářské mapy je obsahem přílohy 3.

#### **4.1.4 Geologické poměry**

Z regionálně geologického hlediska je lokalita součástí Krušnohorské oblasti Českého masívu. Při bližším přiblížení se jedná o Karlovarský pluton, který je součástí krušnohorského plutonu. Horniny Karlovarského plutonu tvoří na lokalitě předkvartérní podklad a lze je charakterizovat jako středně až hrubě zrnitou biotitickou porfyrickou žulu, pro kterou je charakteristické intenzivní rozpukání a fosilní kaolinické zvětrávání. Úroveň předkvartérního podkladu se v lokalitě pohybuje od cca 6 do 10 m pod terénem (EMSA Ekosystem © 2017).

Terciérní sedimenty jsou v širším okolí reprezentovány slojovým pásmem Josef nepravdělné mocnosti, kde vedle nekvalitního hnědého uhlí tvoří podstatnou část komplexu jíly a jílovce, místy i písky a pískovce. Terciér je zde reprezentován slojkou uhlí o mocnosti 0,6 m a dále jíly, písčité jíly a jemnozrnnými jílovitými písky (EMSA Ekosystem © 2017).

Kvartérní pokryv tvoří v lokalitě nivní sedimenty Ohře. Jedná se o hlíny, písčité jíly a štěrkopísky až štěrky o celkové mocnosti 5,5 až 10,0 m. Povrch terénu je dorovnan antropogenními navážkami různorodého charakteru, které jsou často tvořeny nebo obsahují určitý podíl odpadů z plynárenské výroby (popel, struska, škvára), na který je primárně vázána kontaminace toxickými kovy (EMSA Ekosystem © 2017).

Výřez ze základní geologické mapy je obsahem přílohy 4.

#### **4.1.5 Hydrogeologické poměry**

Z hydrogeologického hlediska náleží lokalita do hydrogeologického rajónu 2120-Sokolovská pánev, útvar podzemních vod 21200 Sokolovská pánev (Dibavod, 2019).

Horniny karlovarského masívu představují hydrogeologicky významný celek s puklinovým oběhem podzemních vod. Značné rozpukání, většinou propustná výplň puklin a propustné písčité zvětraliny umožňují vznik význačných pramenních nebo zřidelních center. V puklinovém systému žulového masívu má významnou roli karlovarská zřidelní soustava, která je součástí celé hydrogeologické struktury a je v určité souvislosti s podzemními vodami širokého okolí (EMSA Ekosystem © 2017).

Pro řešení dané problematiky má v lokalitě zásadní význam mělký podpovrchový kolektor vázaný na kvartérní nivní sedimenty Ohře. Kolektor je charakterizován průlinovou propustností a volnou hladinou. Hladina podzemní vody je v průběhu roku

závislá na chodu srážek a na úrovni hladiny v řece Ohři (EMSA Ekosystem © 2017; San-Tuhnice © 2019).

#### 4.1.6 Situace kontaminace v lokalitě

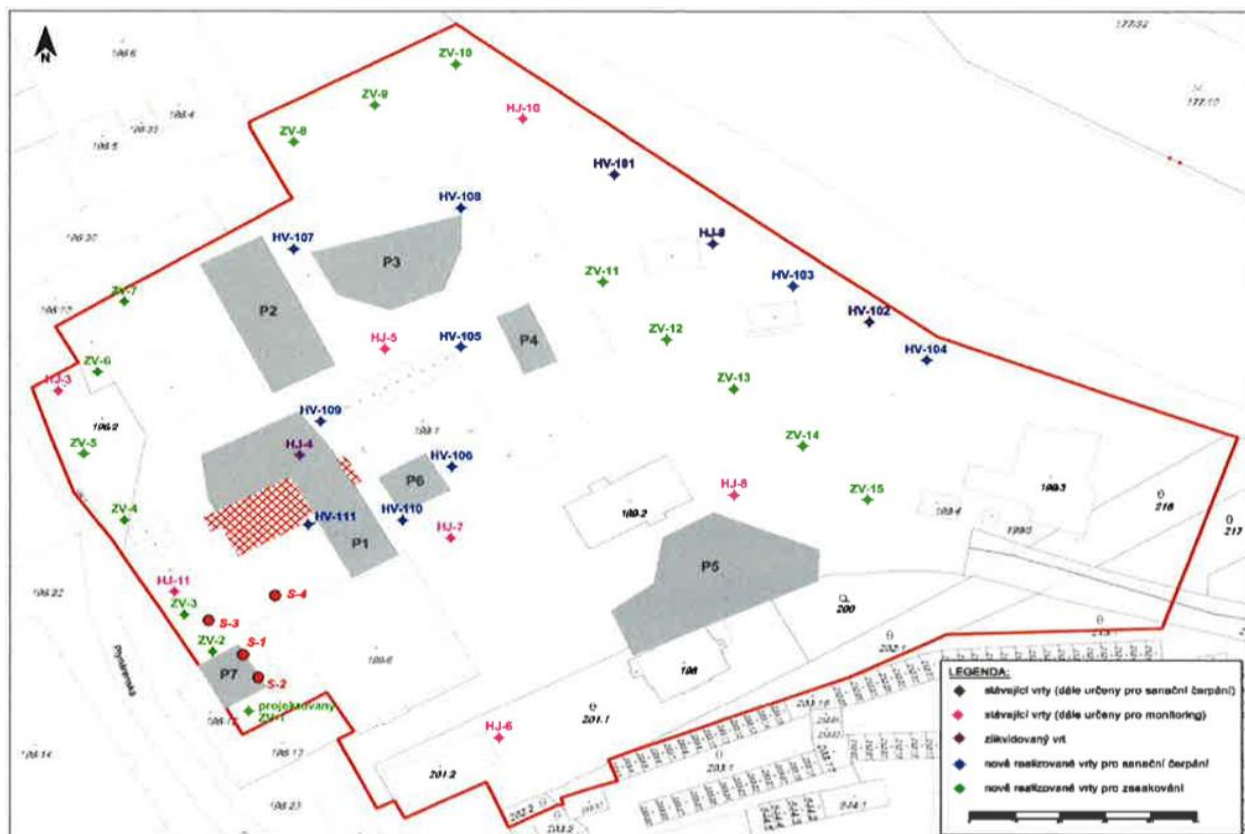
Jelikož vybrané území je součástí projektu opatření vedoucích k nápravě ekologických zátěží, byla řešenou problematikou i kontaminace podzemních vod, která byla v lokalitě reprezentována následujícími látkami:

- NEL (Uhlovodíky C<sub>10</sub>-C<sub>40</sub>);
- Kyanidy;
- Kovy (Arsen, Berzlium, Olovo);
- PAU;
- BTEX(San-Tuhnice © 2019).

Dynamické vzorkování podzemní vody ze všech existujících vrtů probíhalo v následujících krocích:

- zaměření HPV;
- spuštění čerpadla do vrtů;
- čerpání do ustálení fyzikálně-chemických parametrů podzemní vody – měření (pH, teplota, vodivost, ORP, rozpuštěný O<sub>2</sub>), měření volného CO<sub>2</sub>;
- odběr vzorků podzemní vody na konci dynamického čerpání (po ustálení teploty, pH a vodivosti čerpané podzemní vody) (San-Tuhnice © 2019).

Vzorky byly odebrány z historických objektů a nově realizovaných čerpacích vrtů v celkovém počtu 19 ks (HJ-3, HJ-4, HJ-5, HJ-6, HJ-7, HJ-8, HJ-9, HJ-10, HJ-11, HV-101, HV-102, HV-103, HV-104, HV-105, HV-106, HV-107, HV-108, HV-109, HV-110, HV-111). Dále jsou na území umístěny zasakovací vrty v celkovém počtu 14ks (ZV-2, ZV-3, ZV-4, ZV-5, ZV-6, ZV-7, ZV-8, ZV-9, ZV-10, ZV-11, ZV-12, ZV-13, ZV-14, ZV-15), plynometrické sondy (PM-1, PM-2, PM-3, PM-4, PM-5, PM-6, PM-7, PM-8, PM-9), sanační plochy (P1, P2, P3, P4, P5, P6, P7) a sondy (S-1, S-si2, S-3, S-4) (San-Tuhnice © 2019).



Obrázek 7 Situace vrtů, strojních kopaných sond a sanačních ploch v areálu (San-Tuhnice © 2019)

In situ měření byla prováděna dvoufázově, resp. ve dvou vzorcích odebraných v průběhu vrtání. První vzorek reprezentoval odběr cca. 1 m pod naraženou HPV, druhé vzorkování probíhalo těsně před dovrácením do konečné projektované hloubky (San-Tuhnice © 2019).

Tabulka 3 Výsledky měření in situ v podzemní vodě (San-Tuhnice © 2019)

Objekt	Datum	K [uS/cm]	T [°C]	Datum	K [uS/cm]	T [°C]
HV-103	05.10.2018	1050	12,1	05.10.2018	1040	12,2
HV-104	08.10.2018	1010	13,1	05.10.2018	1050	13,1
HV-105	17.12.2018	2800	11,9	17.12.2018	3010	12
HV-106	19.12.2018	2000	12,5	19.12.2018	1950	12,6
HV-107	07.11.2018	1010	11,2	07.11.2018	1110	11,2
HV-108	19.11.2018	1050	10,8	21.11.2018	1060	10,7
HV-109	18.12.2018	1900	11,9	19.12.2018	2280	11,8
HV-110	18.12.2018	990	12,9	18.12.2018	1160	12,9
HV-111	03.01.2019	1100	11,3	03.11.2019	1150	11,3
ZV-2	04.01.2019	910	11,6	04.01.2019	1020	11,5
ZV-3	23.10.2018	920	11,6	23.10.2018	920	11,5
ZV-4	29.10.2018	980	11,9	30.10.2018	950	12
ZV-5	02.01.2019	1220	11,2	02.01.2019	1120	11,2
ZV-6	19.10.2018	720	11,5	19.10.2018	740	11,5
ZV-7	09.10.2018	640	11,7	09.10.2018	600	11,7

ZV-8	04.10.2018	680	11,3	04.10.2018	690	11,5
ZV-9	02.10.2018	580	11,1	03.10.2018	550	11,4
ZV-10	01.10.2018	870	11	02.10.2018	870	11,3
ZV-11	12.11.2018	980	12,6	13.11.2018	1320	12,5
ZV-12	10.10.2018	990	13,2	10.10.2018	1090	13,5
ZV-13	10.10.2018	1100	13,5	10.10.2018	1080	13,5
ZV-14	08.10.2018	1030	13,4	08.10.2018	1050	13,1
ZV-15	09.10.2018	960	12	09.10.2018	940	12,1

Všemi sondami bylo v úrovni kolísání HPV zajištěno masivní znečištění látkami charakteru ropných uhlovodíků, které byly ve formě fáze patrné jak na hladině podzemní vody, tak přítomné na povrchu zrn písků. Z hlediska plošného rozložení kontaminace C<sub>10</sub>-C<sub>40</sub> je tedy zřejmá vazba na příslušný litologický typ v konkrétním místě. Analyticky stanovené koncentrace nad úroveň podpůrného technického parametru C<sub>10</sub>-C<sub>40</sub> byly ověřeny v sondě S-3 (pouze mírné překročení) a v sondě S-4 (více než dvojnásobné překročení). Potvrzeno je i nadlimitní znečištění PAU na vstupním profilu do areálu (ZV-3) (San-Tuhnice © 2019).

Teplota podzemních vod je v lokalitě zvýšená a pochybuje se od 10,7 po 13,5 °C. Ve dvou vrtech je zaznamenáno extrémně nízké pH (2–3) (San-Tuhnice © 2019).

## 4.2 Metodika

### 4.2.1 Přejatá data

Z průzkumů v zájmové oblasti, na kterých se podílelo více firem, tedy společnost Innogy a.s. a sdružení San-Tuhnice (tvořené společnostmi AVE CZ, odpadové hospodářství s.r.o., REKULTIVACE Ústí nad Labem s.r.o. a VODNÍ zdroje, a.s.) jsem dostala datové soubory, popisující zájmové modelové území a postup sanačního zásahu. Dále byla obsahem geodetická data, která reprezentovala výškovou a prostorovou lokalizaci jednotlivých vrtů, kopaných sond a sanačních ploch. V této dokumentaci byly i záznamy naražených a ustálených hladin podzemní vody, naměřených ve všech existujících vrtech. K dispozici byly také záznamy o hodnotách transmisivity, specifické storativity a vodivosti pro některé vrty.

Data, která byla potřeba pro vytvoření transportního modelu kontaminace, obsahovala bodová data popisující počáteční koncentrace znečišťujících látek.

Tato data bylo potřebné setřídít do tabulek, které vystupovaly jako podklad pro vytvoření modelových mřížek a vrstev.

### 4.2.2 Koncept modelového postupu

Daný matematický model proudění podzemní vody je vytvářen jako platforma pro vyhodnocování monitorovaných dat a vytváření předpovědí v rámci sanačních prací v lokalitě Innogy Energie, s.r.o. – Karlovy Vary – Tuhnice.

Základním cílem modelování bylo simulovat ustálené proudění podzemní vody za běžných podmínek a proudění podzemní vody v souladu s probíhajícími sanačním čerpáním v zájmové lokalitě.

Další nutností bylo vytvořit modelové řešení transportů reziduálních kontaminantů. Transportní modely bylo potřebné vytvořit jak pro ustálené varianty, tak i pro varianty proudění podzemních vod během sanačních zásahů.

Na základě rozboru přesnosti, kvality a kvantity vstupních dat byl použit dvoudimenzionální model proudění nehomogenním izotropním prostředím. Zvodeň byla diskretizována dvěma vrstvami. Okrajové podmínky budou popsány v podkapitole 4.2.5

### **4.2.3 Postup sestavení jednotlivých matematických modelů**

Samotná modelace byla provedena za použití software QGIS, kam jsem naistalovala zásuvný modul FREEWAT. Modul FREEWAT umožňuje využití balíčku MODFLOW pro simulaci toku podzemní vody a modulárního transportního modelu MT3DMS pro simulace šíření kontaminačního mraku.

Prvním krokem při modelaci bylo vytvoření základního geometrického prostředí. Jak již bylo uvedeno, modelové území se nachází v oblasti meandru řeky Ohře, takže levý dolní roh základní mřížky je umístěn v bodě  $[x = - 851954, y = - 1011149]$ . Model je orientován v souřadném systému S-JTSK (systém jednotné trigonometrické sítě katastrální), který je široce používán na území České republiky a Slovenska. Plocha zájmového území se rozkládá 650 metrů ve směru V-Z, a 540 metrů ve směru S-J.

Pro diskretizaci modelovaného území byla vytvořena modelová síť, která se skládá celkem ze 14040 (108 řádků a 130 sloupců) čtvercových elementů o velikosti 5×5 m. Modelová mřížka je natočena o 26°.

Model je koncipován jako dvouvrstevný, takže vertikálně bylo území rozděleno podle geologické dokumentace vrtů do dvou nerovnoběžných vrstev s proměnlivou mocností dle jednotlivých materiálů, jejichž popis byl převzat z hydrogeologické dokumentace jednotlivých vrtů. Tyto vrstvy byly použity jako podklad pro všechny matematické modely.

Mapovým podkladem po dobu celé modelovací práce v softwaru QGIS vystupoval plugin OSM (Open Street Map), který je součástí nainstalovaného zásuvného modelu QuickMapServices.

Dalším krokem při modelaci bylo navržení základního modelu proudění podzemní vody pro popis přirozeného stacionárního toku v zájmovém území. Tento matematický model proudění podzemní vody bude následně využit jako základ pro simulace transportu reziduálních kontaminantů.

Třetím krokem při modelaci bylo zavádění podmínek sanace do modelu přirozeného toku podzemní vody. Tento model bude popisovat proudění podzemní vody v zájmovém území za podmínek sanace.

Čtvrtým krokem bylo vytvoření základního modelu transportu kontaminantu typu NEL, BTEX a PAU, který ukazuje přirozený tok kontaminačního mraku v modelovém území.

Posledním krokem bylo vytvoření modelu transportu kontaminantu typu NEL, BTEX a PAU za aktivace sanačního zásahu.

Všechny modely budou následně podrobně popsány v následujících kapitolách, kde bude také reprezentována i jejich vizualizace.

#### 4.2.4 Vstupní parametry

Jako vstupní hodnoty pro vytvoření vrstvy, která znázorňuje strop modelové zvodně, byly použity číselné hodnoty HPV na vrtech, které se nacházejí v areálu. Svrchní vrstva je v atributové tabulce charakterizována jako „convertible“ Vstupní hodnoty pro spodní vrstvu, která znázorňuje dno modelové zvodně, byly spočítány tak, že od z-souřadnice každého vrtu byla odečtena hloubka ukončení štěrkopísku na základě hydrogeologické dokumentace. Spodní vrstva je v atributové tabulce charakterizována jako „confined“.

Na základě těchto hodnot byly vytvořeny bodové vrstvy, které byly následně interpolovány za použití metody „nejbližší sused“ v softwaru Surfer'16. Interpolovanou hodnotou byla z-souřadnice [m n. m.].

Tabulka 4 Hodnoty HPV [m p.OB.] z dubna 2019

<b>Objekt</b>	<b>HJ-3</b>	<b>HJ-5</b>	<b>HJ-6</b>	<b>HJ-7</b>	<b>HJ-8</b>	<b>HJ-9</b>	<b>HJ-10</b>	<b>HJ-11</b>	<b>HV-101</b>
<b>HPV</b>	3,26	2,47	2,92	3	3,04	2,7	3,45	3,16	3,05
<b>Objekt</b>	<b>HV-102</b>	<b>HV-103</b>	<b>HV-104</b>	<b>HV-105</b>	<b>HV-106</b>	<b>HV-107</b>	<b>HV-108</b>	<b>HV-109</b>	<b>HV-110</b>
<b>HPV</b>	3,56	3,41	3,4	2,81	3	2,99	3,18	2,17	2,86
<b>Objekt</b>	<b>HV-111</b>	<b>ZV-1</b>	<b>ZV-2</b>	<b>ZV-3</b>	<b>ZV-4</b>	<b>ZV-5</b>	<b>ZV-6</b>	<b>ZV-7</b>	<b>ZV-8</b>
<b>HPV</b>	2,67	---	2,95	2,92	3	2,98	2,95	2,84	2,78
<b>Objekt</b>	<b>ZV-9</b>	<b>ZV-10</b>	<b>ZV-11</b>	<b>ZV-12</b>	<b>ZV-13</b>	<b>ZV-14</b>	<b>ZV-15</b>	<b>OH-1</b>	<b>OH-2</b>
<b>HPV</b>	3,06	3,29	3,27	3,13	3,11	3,39	3,01	2,79	3,54

Do atributových tabulek vytvořených vrstev bylo nutné zadat také informace o hydraulické vodivosti  $K$ , specifické storativitě  $S_s$  a transmisivitě  $T$ . Počáteční hodnoty těchto parametrů byly dohledány z archivních údajů z předchozích průzkumných prací v této lokalitě.

Následující tabulka ukazuje hodnoty, které jsou obsahem převzatých dat.

Tabulka 5 Vstupní parametry

Objekt	T [m <sup>2</sup> /s]	K [m/s]	S [m <sup>-1</sup> ]	T [m <sup>2</sup> /s]	K [m/s]
--------	-----------------------	---------	----------------------	-----------------------	---------

HJ-6	8,51E-06	3,27E-06	---	3,75E-06	1,44E-06
HJ-7	7,81E-05	2,23E-05	2,92E-03	9,33E-05	2,67E-05
HJ-8	6,54E-04	1,82E-04	2,74E-03	1,51E-03	4,20E-04
HJ-9	7,00E-04	2,05E-04	---	7,04E-04	2,03E-04
HJ-10	9,80E-04	2,52E-04	1,30E-02	---	---

Hydrodynamickými zkouškami provedenými v roce 2011 pro účely zpracování projektu sanace zájmového areálu byly pro průlinový kolektor ve štěrkopískových sedimentech údolní terasy Ohře vybudovaných v areálu zjištěny průměrné hodnoty koeficientů transmisivity  $T = 6,59 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$  (vrt HV-1) a  $9,02 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$  (vrt HV-2) a hodnoty koeficientů filtrace  $k_f = 1,49 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$  (vrt HV-101) resp.  $k_f = 3,00 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$  (vrt HV-102). Filtrační rychlost proudění podzemní vody ve štěrkopískových sedimentech údolní terasy Ohře byla vypočtena na cca 12,8 až 26 m/den (EMSA Ekosystem © 2017).

Mezi vstupní modelové parametry, využité zejména při tvorbě transportních modelů kontaminace, patří infiltrace, pórovitost a disperzivita, které jsou pro celé modelové území konstantní.

Dále byly použity počáteční koncentrace znečišťujících látek v jednotlivých vrtech. Postup pro vytvoření vrstev transportního modelu byl obdobný jako u hydraulického, tj. pro vytvoření bodové vrstvy, která následně byla interpolována, bylo použito údajů o naměřených koncentracích znečišťujících látek místo známých hodnot HPV.

Tabulka 6 Počáteční koncentrace kontaminantů [mg/l]

Objekt	NELxC <sub>10</sub> -C <sub>40</sub>	Benzen	Naftalen
HJ-3	0,05	0,5	0,02
HJ-5	3,11	15,6	9,646
HJ-6	0,521	23,6	0,041
HJ-7	1,84	176	4,117
HJ-8	0,05	0,5	0,071
HJ-10	0,062	15,1	0,136
HJ-11	0,579	0,5	0,299
HV-101	0,065	0,647	13,4
HV-102	2,42	168	2,924
HV-103	0,429	28,9	0,912
HV-104	0,871	253	1,211
HV-105	3,15	25,5	0,317
HV-106	19,4	1450	400
HV-107	0,05	10,9	0,747
HV-108	0,05	0,8	0,02
HV-109	5,13	320	4,294
HV-110	0,593	75,3	1,932
HV-111	11,5	1950	2,801
ZV-2	0,156	0,5	5
ZV-3	0,661	1,4	427
ZV-4	0,112	0,9	23,9
ZV-5	0,05	0,5	5

ZV-6	0,957	0,5	5
ZV-7	0,05	0,5	5
ZV-8	0,05	0,5	5
ZV-9	0,07	0,5	5
ZV-10	0,05	0,5	5
ZV-11	0,06	21,3	134
ZV-12	0,05	41	16,5
ZV-13	0,408	333	259
ZV-14	0,106	237	50
ZV-15	0,05	0,8	5

#### 4.2.5 Podmínky

Při stanovování hranic modelové oblasti bylo třeba brát v úvahu nutnost definice vhodných okrajových podmínek. Okrajové podmínky jsou charakterizovány jako přítoky přes hranice modelového území. Tyto okrajové podmínky v „MODFLOW boundary conditions“ byly zadány jako podmínky typu RIV (River) a GHB (General-Head Boundary).

Podmínka typu RIV (River) umožňuje simulace průsaku vody mezi řekou a zvodní v závislosti na sklonu HPV. Vlastnosti toku řeky se zadávají pro nejvyšší a nejnižší buňky segmentu řeky, zbytek se počítá pomocí lineární interpolační metody.

Podmínka typu GHB (General-Head Boundary) umožňuje simulace toku podzemní vody mezi externím zdrojem a vodonosnou vrstvou v závislosti na gradientu HPV.

Obě dvě podmínky jsou charakterizovány jako podmínky tzv. 3. Typu. Okrajové podmínky byly interpretovány dle záměru HPV z března 2018.

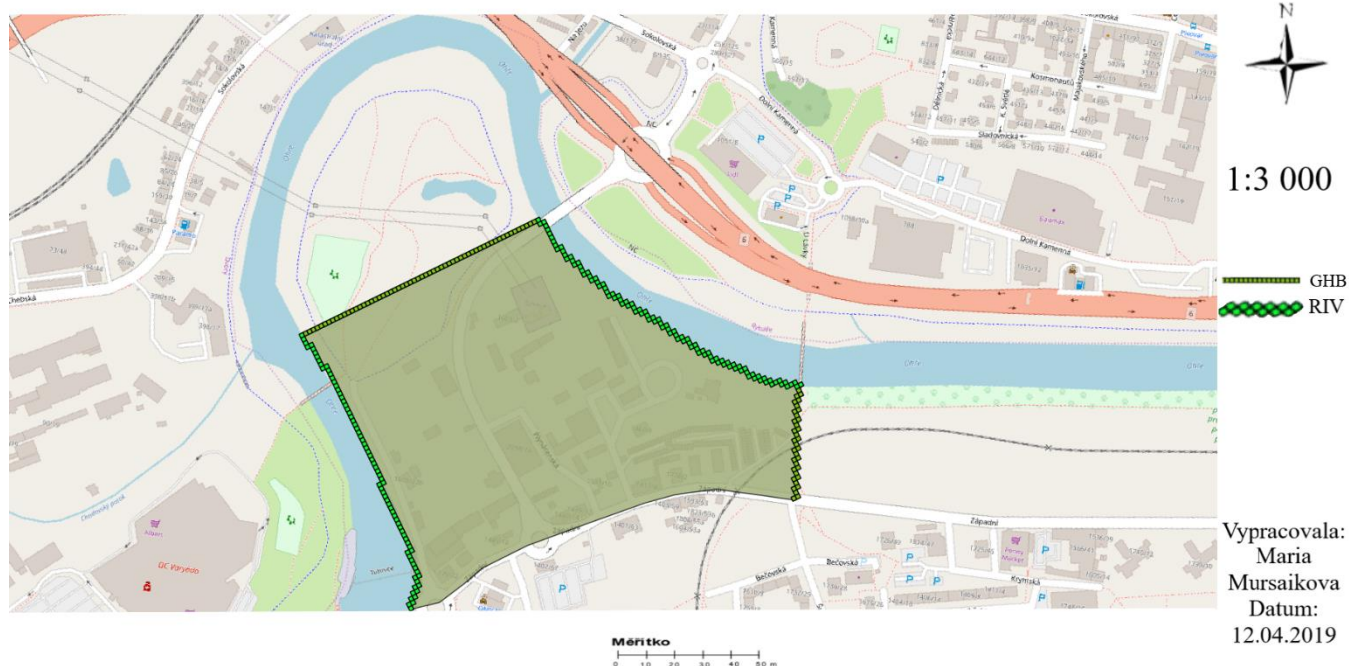
Okrajové podmínky pro model transportu kontaminantů jsou převzaty z hydraulického modelu proudění podzemní vody. Počáteční podmínky pro transportní model jsou charakterizovány jako počáteční znečištění.

Oblast vně zájmového území byla pro proudění podzemní vody zneaktivněna.

Následující obrázek č. 8 znázorňuje umístění těchto podmínek v zájmovém území.



## Okrajové podmínky typu RIV a GHB



Obrázek 8 Okrajové podmínky

### 4.2.6 Vizualizace

Po dokončení modelových výpočtů bylo nutno provést vizualizaci číselných výstupů. Tento krok jsem udělala za pomoci zásuvného modulu „Contour“ pro software QGIS, který na základě výsledku vytvoří izolinii nebo izoplochy distribuce požadované veličiny. V modelech proudění podzemní vody představovaly izoplochy úrovně HPV, v transportních modelech kontaminantu – koncentrace vybrané látky.

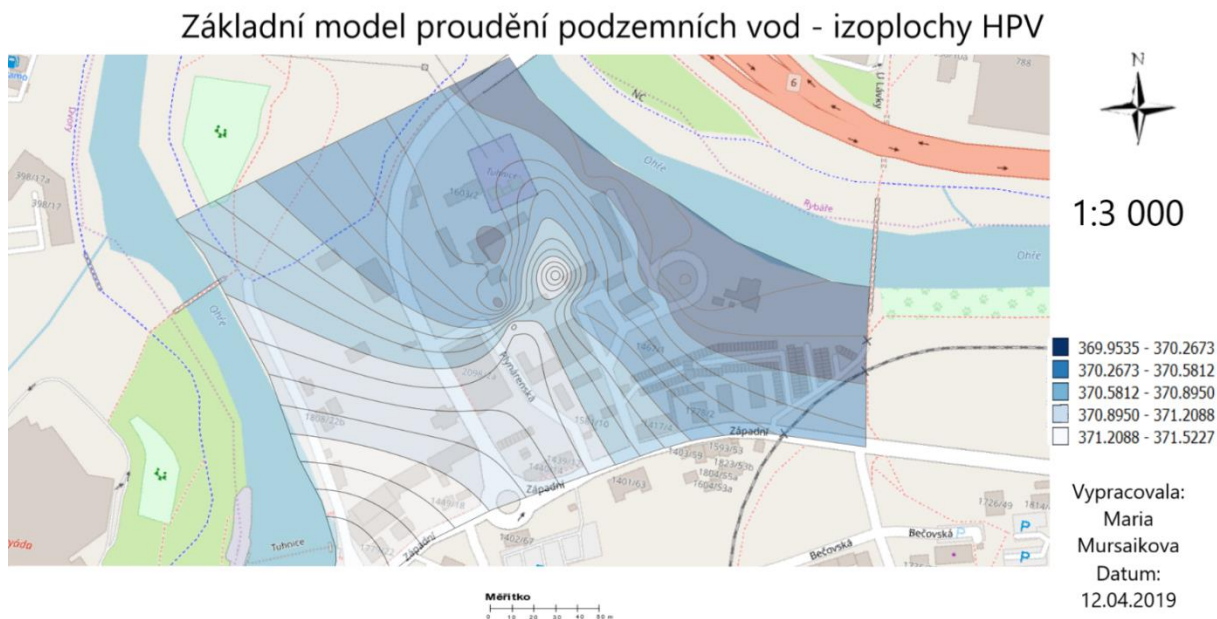
### 4.3 Výstupy modelů

V této podkapitole budou následně představeny výstupy jednotlivých modelů formou mapových obrázků. Jednotlivé úrovně HPV a koncentrací znečišťujících látek jsou zobrazeny pomocí izoploch.

#### 4.3.1 Základní hydraulický model stacionárního proudění podzemní vody

První modelový výstup představuje přirozené proudění podzemní vody přes modelové území. Výsledky jsou znázorněny na obrázku 9 mapou izoploch HPV. Z tohoto obrázku je patrný přirozený směr proudění, které je v souladu se sklonem terénu od jihovýchodu k severozápadu. Situace je ovšem složitější v jižní části modelu, kde je proudění podzemní vody ovlivněno jezem, který se nachází na řece Ohři. Rozdíl mezi hodnotami HPV nad jezem a pod jezem činí 0,75 m. Tato skutečnost má za následek vytvoření lokálního sklonu HPV po jihozápadní straně meandru. Dále je vidět, že ve střední části modelového území, tedy v oblasti nově realizovaných vrtů pro sanační

čerpání, dochází k mírnému vzduť HPV. Podzemní vody jsou drénovány do řeky Ohře. Nejvyšší hodnota HPV činí 372,52 m n.m..



Obrázek 9 Výstup základního hydraulického modelu proudění podzemních vod v zájmovém území

#### 4.3.2 Hydraulický model proudění podzemní vody v areálu za podmínek čerpání

Vizualizace toku podzemní vody během sanačního čerpání přes areál je předvedena na obrázku 10 pomocí izoploch HPV. Na tomto obrázku je patrné, že dochází k poklesu HPV oproti základnímu modelu proudění podzemní vody v areálu v důsledku čerpání podzemní vody za účelem následujícího čištění. Vlivem čerpacího zásahu vzniká depresní kužel, jehož lokalizace je v místě vysoké hustoty čerpacích vrtů.

Vznik depresního kužele je výhodným jevem vzhledem k následujícímu odčerpání kontaminace. Tato situace bude znázorněna na obrázcích 11, 13 a 15.

Sanační čerpání tedy ovlivňuje tok podzemní vody pouze v oblasti vrtů (cca. 100–115 m kolem vrtu). Na okrajích modelovaného území však nejsou patrné změny v přirozeném toku podzemní vody, který byl ukázán na obrázku 9.

Pokles HPV oproti základnímu hydraulickému modelu je přibližně 0,6 m. Lokálně se tyto změny mohou lišit.



Obrázek 10 Výstup hydraulického modelu proudění podzemních vod za podmínek čerpání

### 4.3.3 Základní model kontaminantů typu NEL (C<sub>10</sub>-C<sub>40</sub>)

Vizualizace základního modelu kontaminačního mraku znečišťujících látek typu NEL (C<sub>10</sub>–C<sub>40</sub>) přes zájmové území je předvedena na obrázku 11.

Daný model znázorňuje situaci kontaminace v lokalitě na základě počáteční koncentrace NEL (C<sub>10</sub> – C<sub>40</sub>), která byla zjištěna díky analýze vzorků podzemní vody.

Z obrázku je patrné, že kontaminační mrak se pohybuje ve směru přírodního toku podzemní vody, který bylo možno sledovat na obrázku 9. Podle modelu je znečištění drénováno vodou řeky Ohře.

Hodnota nejvyšší koncentrace je 14, 21 mg/l.





#### 4.3.4 Model transportu kontaminantů typu NEL (C10-C40) za podmínek sanačního čerpání

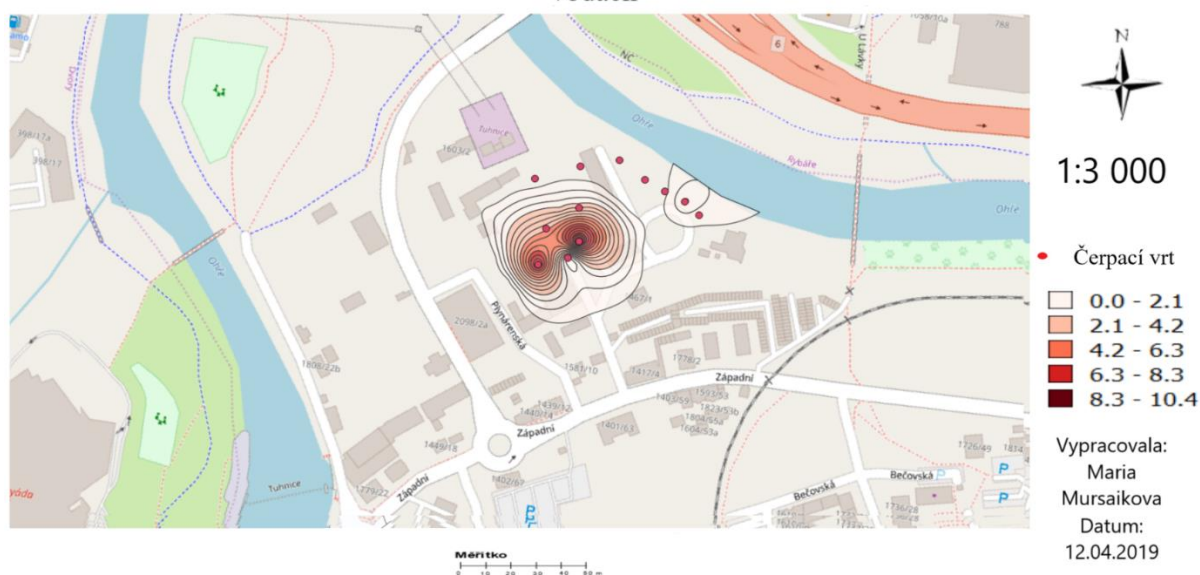
Dalším výstupem modelové části této práce je model transportu kontaminantu při aktivaci sanačního zásahu. Vizualizace byla vytvořena stejně jako u základního modelu transportu reziduálních kontaminantů za pomoci izoploch koncentrace znečišťující látky.

Z této vizualizace je zřejmé, že díky sanačnímu čerpání dochází k roztržení a zmenšení plochy kontaminačního mraku, který se na zájmovém území nachází. Dále zde díky sanačnímu zásahu dochází ke zmenšení plochy infiltrace kontaminující látky do koryta řeky Ohře, která protéká podél severovýchodní hranice území zájmu.

Po navrhovaném sanačním čerpání zůstává však ještě velké množství kontaminující látky. Proto se dá říci, že prosté čerpání na sanačních vrtech nedokáže větší část kontaminačního mraku ze zájmové oblasti odstranit v plánovaném časovém úseku. Tato zbylá část kontaminace bude po ukončení sanačního zásahu představovat potenciální zdroj znečištění.

Při porovnání transportních modelu (Obr. 10 a Obr.11) je vidět, že koncentrace zkoumané látky se zmenšila o cca. 4 mg/l.

Transportní model kontaminace za podmínek sanace - izoplochy koncentrace NEL v podzemních vodách



Obrázek 12 Izoplochy koncentrace NEL za podmínek sanačního čerpání

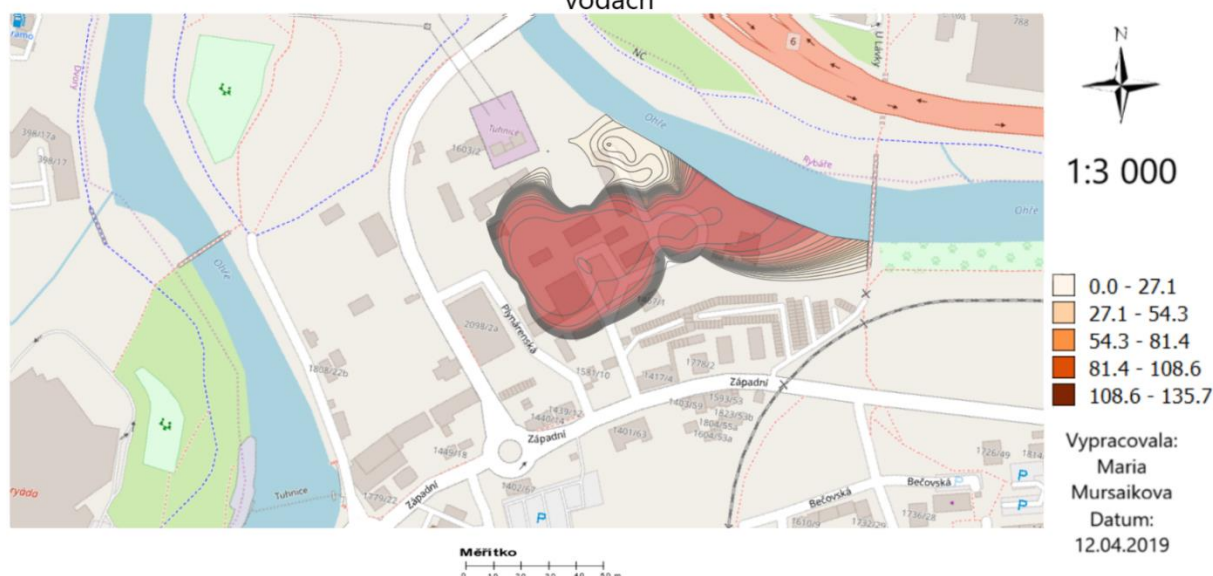
#### 4.3.5 Základní model transportu kontaminantu typu BTEX (benzen)

Na obrázku 11 je představen transportní model kontaminantu typu BTEX, konkrétně zástupce této skupiny – benzenu. Z tohoto obrázku je patrné, že kontaminační mrak, který vytváří tento polutant, má obdobný charakter jako v případě transportního modelu ukázaného na obrázku 11.

Znečištění podzemní vody benzenem bylo v areálu zjištěno v souvislém kontaminačním mraku, který má centrum ve zdroji znečištění v prostoru jámek na dehet a pokračuje přes celý areál severovýchodním směrem až k toku Ohře. Plocha kontaminačního mraku přesahujícího sanační limit pro benzen je 7 152 m<sup>2</sup>. Jedná se tedy o masivní plošnou kontaminaci, která má spojitý charakter.

Nejvyšší hodnota koncentrace benzenu se pohybuje kolem 136 mg/l.

Základní transportní model kontaminace - izoplochy koncentrace benzenu v podzemních vodách



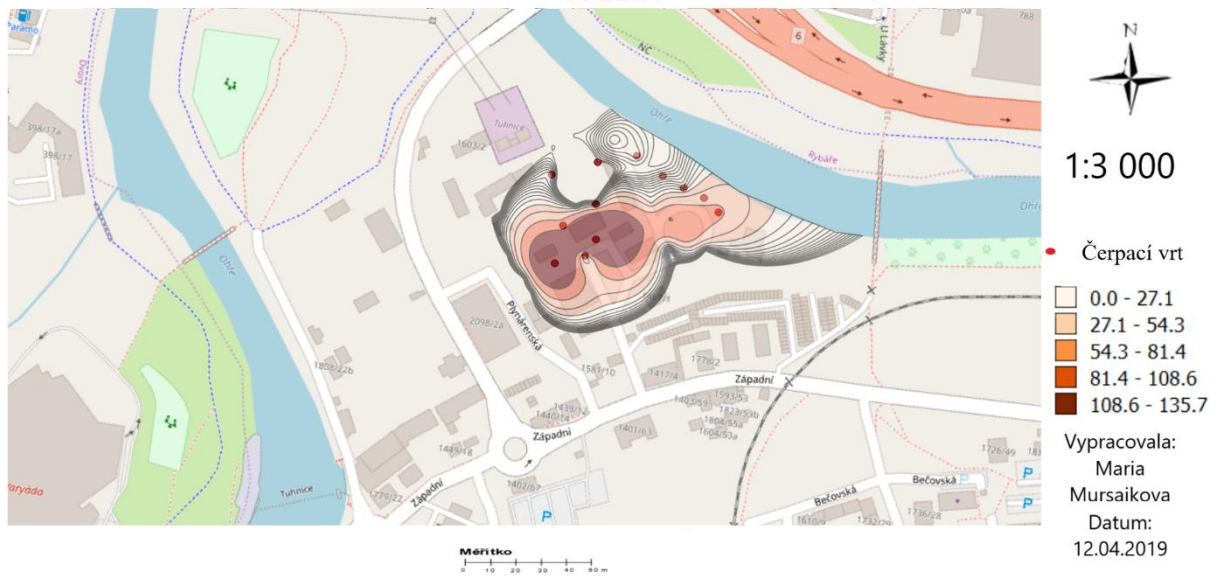
Obrázek 13 Izoplochy koncentrace benzenu v podzemních vodách

#### 4.3.6 Model transportu kontaminantu typu BTEX (benzen) za podmínek sanačního čerpání

Na obrázku 14 je představen kontaminační mrak za aktivace sanačních odběrů. Je dobře vidět, že čerpání znečištěné podzemní vody napomáhá snížit koncentraci polutantu tohoto typu, zejména v místě infiltrace do povrchových vod řeky Ohře. Nedochází však k roztržení kontaminačního mraku. To tedy znamená, že kontaminace má stále masivní plošný charakter.

Směr šíření zůstává i v případě sanačního čerpání stejný, tedy ve směru přirozeného proudění podzemních vod.

Transportní model kontaminace za podmínek sanace - izoplochy benzenu v podzemních vodách

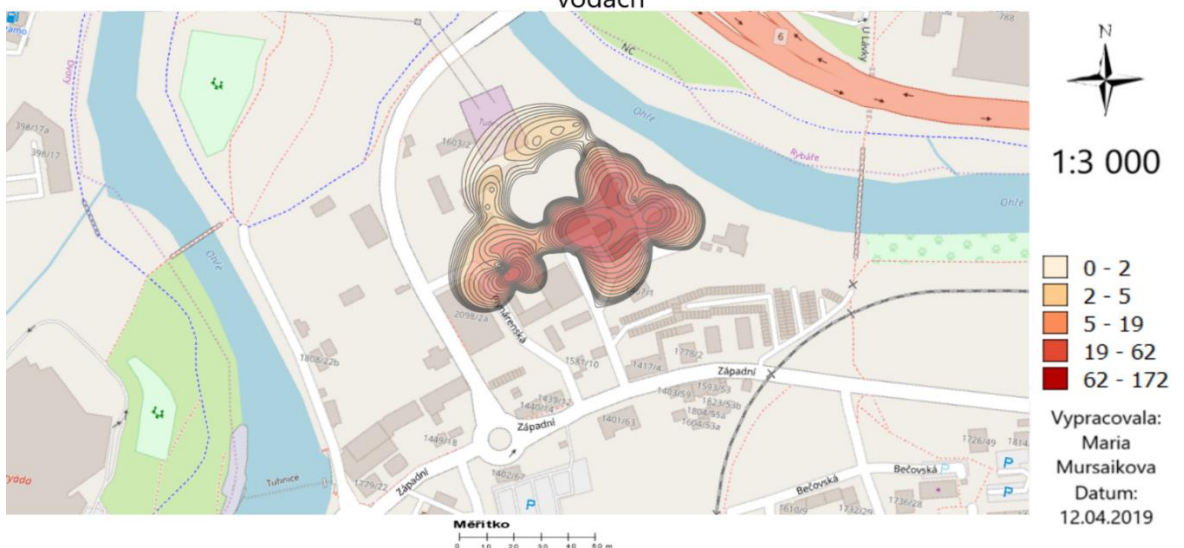


Obrázek 14 Izoplochy koncentrace benzenu za podmínek sanačního čerpání

#### 4.3.7 Základní model transportu kontaminantu typu PAU (naftalen)

Znečištění podzemní vody naftalenem, který je nejhojnější samostatnou složkou černého uhlí, bylo v areálu zjištěno v souvislém kontaminačním mraku, který má centrum ve zdroji znečištění v prostoru jímek na dehet a pokračuje přes celý areál severovýchodním směrem až k toku Ohře. Kontaminační mrak se prakticky kryje s rozsahem kontaminačního mraku benzenu, ale nedochází k infiltraci kontaminující látky do řeky Ohře. Plocha kontaminačního mraku s překročením sanačního limitu je 2 211 m<sup>2</sup>. Celková plocha kontaminačního mraku je 7663 m<sup>2</sup>.

Základní transportní model kontaminace - izoplochy koncentrace naftalenu v podzemních vodách



Obrázek 15 Základní model transportu kontaminantu – izoplochy koncentrace naftalenu

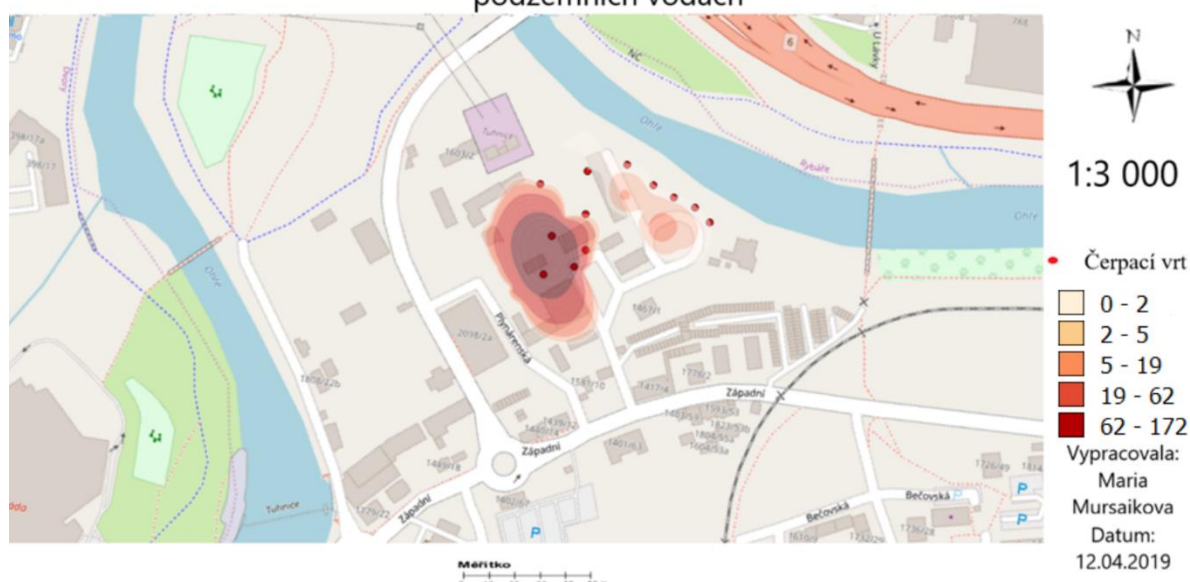
#### 4.3.8 Model transportu kontaminantu typu PAU (naftalen) za podmínek sanačního čerpání

Konečným výstupem modelového řešení je transportní model kontaminující látky typu PAU. Vizualizace tohoto modelu je na obrázku 16, kde je koncentrace znázorněna pomocí koncentračních izoploch.

Model ukazuje, že při navrhovaném sanačním odběru dojde k roztržení kontaminačního mraku. Celkově dochází ke zmenšení plochy kontaminačního mraku zejména ve východní části modelového území. Ohnisko znečištění zůstává v prostoru jámek na dehet.

Na rozdíl od výše uvedených transportních modelů (obr. 11 a obr. 13) je vidět, že tento model prokazuje dvě ohniska znečištění.

Transportní model kontaminace za podmínek sanace - izoplochy koncentrace naftalenu v podzemních vodách



Obrázek 16 Transportní model kontaminantu – izoplochy koncentrace naftalenu za podmínek sanace



## 5 Diskuze

Podle (Kumar 2001) matematické modely podzemních vod se většinou používají v oblasti environmentálních věd pro zkoumání široké škály hydrogeologických podmínek. V poslední době se používají i pro předvídání transportu kontaminantů pro hodnocení rizik. Ve své práci (Kumar 2001) uvádí, že modely popisují procesy proudění podzemních vod a transportu kontaminantů na určitých zjednodušených předpokladech. Tyto předpoklady typicky zahrnují směr proudění, geometrii vodonosné vrstvy, heterogenitu nebo anizotropii sedimentů, mechanismy transportu kontaminantů a chemické reakce.

(BGS ©2004) popisuje vliv různých zjednodušení systému vodonosných vrstev pro věrohodnost matematických modelů. Jako studované území byla zvolena Bangladéšská lidová republika, Variabilita sedimentologických charakteristik vodonosných vrstev v tomto místě je velmi složitá. Ve studii bylo zjištěno že změna tloušťky vodonosné vrstvy způsobuje malý rozdíl ve výsledcích oproti celkovému vzoru proudění. Dále (BGS ©2004) uvádí, že zavedení menší hodnoty koeficientu hydraulické vodivosti pro vrstvu dramaticky snižuje průtok pod touto vrstvou. Dle (BGS ©2004) existuje významný vliv i správné volba koncepčního modelu. Aby bylo možné charakterizovat toky podzemních vod s větší přesností, bude nutné dobře porozumět vrstvení zvodně. V této studii bylo provedeno porovnání homogenního (jednovrstevného) modelu a modelu, který se skládá ze 3 vrstev. Bylo zjištěno, že zvyšování složitosti hydrogeologického vrstvení se výrazně snižuje množství průtoku v nejhlubší vrstvě z drénu do řeky ze 24 % pro případ homogenního modelu do 4 % pro třívrstevní model.

Dle závěrečné zprávy (Aquatest ©2014) model není v prognózních scénářích schopen reflektovat sezónní kolísání infiltrace a tím vliv na úroveň hladiny podzemní vody. Veškeré prognózy vycházejí ze stanovené průměrné infiltrace pro modelovou oblast a odrážejí tak předpokládaný obecný trend vývoje hladiny podzemní vody.

Samotný koncept, který byl základem pro sestavení matematického modelu průtoku podzemní vody a transportu kontaminantů, jeho definice, časová a prostorová diskretizace představuje pouze jednu z mnoha variant, které se mohou nastat v reálných podmínkách při aktivaci sanačního zásahu.

V textu výše bylo již uvedeno, že pro účely této studie byla poskytnutá pouze data z jednorázových měření v přítomných objektech, a nebyly prováděny žádné záměry průtoku na povrchovém toku řeky Ohře. V této fázi nebylo možné model kalibrovat a verifikovat pro reálná data. Za zmínku stojí práce (Kunianský & kol, 2009), která popisuje použití regresní analýzy pro oblastí s nedostatkem dat. Tento přístup zvýšil spolehlivost modelu ustáleného stavu a následně i plně přechodného modelu.

Vzhledem k tomu, že k dispozici byla pouze jediná analýza vzorků kontaminantů v podzemní vodě, je zcela možné, že by kontaminační mraky vykazovaly jiný charakter a směr šíření, než tomu bylo v této době. Dle (Leif, 1993) pro řešení transportu kontaminantů jsou vyžadována delší časová data, protože ke změnám

koncentrace kontaminantů dochází v mnohem větším časovém měřítku než změna úrovně hladiny podzemní vody. Pro správně vypočet bilance kontaminantů v budoucích pracích tedy navrhuji přidat výsledky dalších průběžných průzkumných prací na lokalitě.

(Zoppou & Knight 1994) hodnotili analytická řešení, která jsou stále užitečná pro validaci numerických schémat pro řešení ekvivalence s difuzní rovnicí s prostorově variabilními koeficienty. Logan (1996) získal analytická řešení pro rozptylový koeficient závislý na měřítku, který exponenciálně stoupá s polohou až na určité konstantní mezní hodnoty.

(Singh & Das 2015) zkoumali analytická a numerická řešení jednorozměrného transportu kontaminantů závislých na měřítku v heterogenních médiích, ve kterých byla porovnána analytická a numerická řešení a shledána velmi dobrá shoda mezi nimi.

Při interpretaci výsledků modelových výstupu je třeba brát v úvahu nejistoty, které v důsledku znamenají snížení vypovídající schopnosti modelu a jeho přesností. Dle (Singh 2011) prediktivní simulace musí být chápána jako prognóza, která je závislá na kvalitě a nejistotě vstupních dat. Dále ve své práci uvádí, že nejlepší metoda eliminace chyb v modelování je aplikovat kvalitní hydrogeologickou datovou sadu a zpochybnit výsledky simulace modelu.

Podle (Singh 2011) další nepřesnosti pramení z nejistot používaného softwaru a numerických metod pro řešení řídicích rovnic proudění a transportu kontaminantů.

## Závěr

Cílem prezentované práce bylo nejprve zpracovat literární rešerši, která bude pojednávat o problematice matematického modelování podzemních vod a transportu kontaminantů. Získané poznatky z teoretické části slouží v praktických aplikacích pro matematické modelování.

Pro diplomovou práci byl cíleně vybrán reálný modelový příklad proudění podzemních vod a transportu kontaminantů ve funkčním areálu Innogy a.s. Karlovy Vary – Tuhnice.

Z regionálně geologického hlediska je lokalita součástí Krušnohorské oblasti Českého masívu. Při bližším přiblížení se jedná o Karlovarský pluton. Horniny Karlovarského lze charakterizovat jako středně až hrubě zrnitou biotitickou porfyrickou žulu, pro kterou je charakteristické intenzivní rozpukání a fosilní kaolinické zvětrávání. Úroveň předkvartérního podkladu se v lokalitě pohybuje od cca 6 do 10 m pod terénem. Terciér je zde reprezentován slojkou uhlí o mocnosti 0,6 m a dále jíly, písčité jíly a jemnozrnnými jílovitými písky. Kvartérní pokryv tvoří v lokalitě nivní sedimenty Ohře. Jedná se o hlíny, písčité jíly a šterkopísky až šterky o celkové mocnosti 5,5 až 10,0 m. Povrch terénu je dorovnan antropogenními navážkami různorodého charakteru, které jsou často tvořeny nebo obsahují určitý podíl odpadů z plynárenské výroby (popel, struska, škvára), na který je primárně vázána kontaminace toxickými kovy.

Aktuální matematický model byl zpracován jako úvodní s použitím současně dostupných dat a parametrů proudění podzemní vody. Zjednodušené modely transportu toku kontaminačních mraků byly vytvořeny za účelem posouzení vývoje kontaminace na lokalitě pro varianty přirozeného proudění podzemních vod a pro varianty proudění podzemních vod při sanačním čerpání.

Ze základního modelu proudění podzemních vod je zřejmé, že v modelované oblasti dochází k mírnému vzduší HPV v oblasti nově realizovaných vrtů pro sanační čerpání.

Celkový pokles úrovně HPV se pohybuje kolem 0,7 m. Přirozený směr proudění je od jihovýchodu směrem k severozápadu. Na základě porovnání matematického modelu přirozeného proudění podzemních vod a modelu proudění podzemní vod při aktivaci sanačního zásahů lze konstatovat, že dochází ke snížení HPV během čerpání pro následující čištění.

Z grafické dokumentace predikovaných scénářů transportu kontaminantů je patrný jeden společný rys – znečištění prokazatelně migruje podzemními vodami z lokality do povrchových vod řeky Ohře. Kontaminanty se šíří převážně ve směru přirozeného proudění podzemních vod, tj. od jihozápadu směrem k severovýchodu. Rozsah kontaminace v prostoru dehtových jámek představuje hlavní kontaminační ohnisko.

Dále je zřejmé, že díky sanačnímu čerpání dochází ke snížení koncentraci reziduálních kontaminantů a celkově ke zmenšení ploch kontaminačních mraků. Koncentrace jednotlivých látek se průměrně snížily o 4 mg/l (NEL) až 12 mg/l (Benzen), ale

nedochází zde k úplné vymizení znečištění. To je způsobené skutečností, že veškeré ropné látky mají velkou schopnost se sorbovat na horninové prostředí a již při malých koncentracích se projevují svými organoleptickými vlastnostmi jak v podzemních vodách, tak i v zeminách.

Zjištěné hodnoty lokalizace izoploch koncentrací kontaminantů mohou být zatíženy nepřesnostmi vnesenými do hydraulického modelu neúplností měření (výšky hladiny, okrajové podmínky a koeficienty filtrace) a „pouhým“ odhadem parametrů pro transportní model. Takže by bylo vhodné zvážit použití transportních modelů při měření šíření kontaminace během sanačních zásahů.

Na základě výsledků práce lze konstatovat, že díky odběrům podzemní vody v areálu dochází k vytvoření hydraulického gradientu vedle sanačních vrtů. Hydraulický gradient je potřebný pro úspěšné odčerpávání kontaminačních mraku.

Pro zvýšení přesností jak hydraulického modelu, tak i transportního modelu kontaminace by bylo nutně získat dlouhodobé údaje o úrovni HPV a koncentrace kontaminující látek. Zároveň by bylo nezbytné získat aktuální informace o hydraulických vlastnostech horninového prostředí, a to v celém rozsahu modelové oblasti.

Pro provedení modelu transportu kontaminantů pro transienční variantu je vyžadována delší doba sledování koncentrací znečištění v podzemní vodě. Koeficient disperze by měl být hodnocený analytickou metodou a porovnáván s řešením matematického modelu, aby se zvýšila spolehlivost výsledku.

Jakákoli budoucí studie by se musela nejprve zaměřit na kalibrace a verifikace těchto modelů a posoudit, zda je třeba přezkoumat vstupní kvantitativní parametry. Chyby mezi modelovanými a reálnými daty navrhuji posoudit podle kritéria RMSE (Root Mean Square Error).

## Seznam literatury

- Anderson M. P., Woessner W. W., Hunt R. J., 2015: Applied groundwater modelling, Simulation of flow and advective transport. Elsevier Inc., Amsterdam, 539 s.
- Andersson M.P., Woessner W. W., 1992: Applied groundwater modelling, Simulation of flow and advective transport. Academia press, San Diego, 564 s.
- Armstrong D., Narayan K., 1998: Groundwater processes and modelling. CSIRO publishing, Collingwood, 75 s.
- Bear J., 1979: Hydraulics of groundwater. McGraw-Hill, Inc., Mineola, New York, 1168 s.
- Beneš V., 1995: Hydrodynamika transportních a transformačních procesů polutantů v podzemních vodách. ACADEMIA – nakladatelství Akademie věd České republiky, Praha, 178 s.
- Camilli R., Reddy C. M., Yoerger D. R., Van Mooy B. A. S., Jakuba M. V., Kinse J. C., 2010: Tracking hydrocarbon plume transport and biodegradation at deepwater horizon. Science, 330(6001): 201–204.
- Císlerová M., Vogel T. (1998): Transportní procesy. Vydavatelství ČVUT, Praha, 182 s.
- Cozzarelli M. I., Herman J. A., Baedecker M. J., Fischer J. M., 1999: Geochemical heterogeneity of a gasoline- contaminated aquifer. Journal of Contaminant Hydrology, 40(3): 261–284.
- Delleur J. W., 2007: The handbook of groundwater engineering. CRS Press, NW, 1320 s.
- Demek J., 1987: Zeměpisný lexikon ČSR: Hory a nížiny. Československá akademie věd, Academia Praha, 584 s.
- Elango L., Jayakumar R., 2001: Modelling in Hydrogeology. Allied Publishers Ltd, New Delhi, 257 s.
- EMSA Ekosystem, 2017: Projekt supervise včetně koordinátora BOZP sanačních prací v areálu společnosti Innogy Energie, s.r.o. Karlovy Vary-Tuhnice.
- Feenstra S., Pankow J. F., Cherry J. A., Ryan M. C., 1996: Dense chlorinated solvents in groundwater: background and history of the problem. In Dense Chlorinated Solvents and Other DNAPLs in Groundwater. Waterloo Press, Portland, OR. P 1–52.
- Fetter C.W., 1993: Contaminant Hydrogeology. Macmillan Publishing Company, New York, 458 s.
- Fetter C.W., 2001: Applied Hydrogeology. Prentice-Hall, Inc., Upper Saddle River, New Jersey, 588 s.
- Goodchild M. F., 1992: Geographical information science. Int. J. Geographical information systems, 6(1): 31–45.

- Hill M., 2006: The practical use of simplicity in developing groundwater models. *Ground Water Journal*, 44(6): 775–781.
- Hill., Zheng., Maxwell P., 2011: MODFLOW and More: Integrated Hydrologic Modeling, International Groundwater Modeling Center (IGWMC), Colorado School of Mines, 327 s.
- Hlavínek P., Říha J., 2004: Jakost vody v povodí. Akademické nakladatelství CERM, Brno, 209 s.
- Kinzelbach W., 1986: Groundwater modelling. Elsevier science publishing company Inc., New York, 333 s.
- König L. F., Weiss J. F., 2009: Groundwater: Modelling, Management and Contamination. Nova Science Publishers Inc., New York, 422 s.
- Kumar C. P., 2001: Modelling of groundwater flow and Data Requirements. *International Journal of Modern Sciences and Engineering Technology*, 2(2): 18–27.
- Kuraž M., 2014: Hydrodynamika porézního prostředí. Skriptum ČZU FŽP, Praha, 164 s.
- Logan J. D., 1996: Solute transport in porous media with scale dependent dispersion and periodic boundary conditions. *J. Hydrol.* 184 (3–4), 261–276.
- Loague K., Corwin D. L., 1996: Applications of GIS to the modelling of non-point Source Pollutants in the Vadose Zone. SSSA Special Publication No 48. Science society of America, Madison, P 131–152.
- Lundstedt S., 2003: Analysis of PAHs and their transformation products in contaminated soil and remedial processes. Akademisk avhandling, Umeå.
- Olsthoorn T., 1985: The power of the electronic worksheet - modelling without special programs. *Ground Water Journal*, 23: 381–390.
- Pech P., 2010: Speciální případy hydrauliky podzemní vod. Skriptum. ČZU, Praha, 103 s.
- Popl M., Fahrnich J., 1995: Analytická chemie životního prostředí. Vysoká škola chemicko-technologická, Praha, 262 s.
- Poulsen M., Lemon L., Barker J. F., 1992: Dissolution of mono-aromatic hydrocarbons into groundwater from gasoline-oxygenate mixtures (online) [cit. 2019.02.10], dostupné z <<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/es00036a022>>.
- Pruden A., Sedran N. M., Suidan M., Venosa A., 2003: Biodegradation of MTBE and BTEX in an anaerobic fluidized bed reactor. *Water Sci Technol*, 47(9): 123–128.
- Quitt E., 1971: Klimatické oblasti Československa. Československá akademie věd, Brno.
- Reilly T. E., Harbaugh A.W., 2004: Guidelines for evaluating ground-water flow models. U.S. Geological Survey Scientific Investigations Report, Reston, VA.

Singh R., 2011: Groundwater modelling. Skriptum. Indian Agricultural research institute New Delhi.

Singh M. K., Das P., 2015: Scale dependent solute dispersion with linear isotherm in heterogeneous medium . J. Hydrol. 520, 289–299.

Stafford D. B., 1991: Civil engineering applications of remote sensing and geographic information systems. ASCE, New York.

Surfer, 2017: User's Guide. Contouring and 3D mapping for scientists and Engineers, LLC, Colorado, 1369 s.

Šedivý J., 1984: Stanovení ropných látek ve vodě a půdě. SZN, Praha.

Šedivý J., 1992: Vlastností a chování ropných látek v přírodních podmínkách, analytické stanovení ropných látek. Sborník referátů E 92, Bijo TC, Praha.

Trakal L., 2015: Environmentální hydrogeologie. Skriptum. ČZU, Praha.

Valentová J., 2007: Hydraulika podzemní vody. Nakladatelství ČVUT. Praha, 174 s.

Wang H., Anderson M. P., 1982: Groundwater modelling with finite difference and finite element methods. Elsevier Publishing, Amsterdam, 247 s.

Zheng C., Wang P. P., 1999: MT3DMS: A Modular Three-Dimensional Multispecies Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion, and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems. Documentation and User's Guide, Department of Geological Sciences, University of Alabama, Tuscaloosa AL.

Zoppou C., Knight J. H., 1994: Comment on a space time accurate method for solving solute transport problems by S. G. Li, F. Ruan, and D. McLaughlin . Water Resour. Res. 30 (11), 3233–3235.

Рябов В. Д., 2009: Химия нефти и газа. Форум, Москва, 336 s.

### **Internetové zdroje:**

Bunnett J.F., Draper J. F., Ryason P., Noble J. P., Tonkyn R., Zahler R., 1953: Comparative activation of nucleophilic substitution in 4-substituted-2-nitrochlorobenzenes (online) [cit 10.02.2019], dostupné z <<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ja01099a036>>.

Dibavod, ©2018: Charakteristiky toku a podvodí ČR (online), [cit. 2018.06.07], dostupné z <<http://www.dibavod.cz/24/charakteristiky-toku-a-povodi-cr.html>>.

Harbaugh A. W., Banta E. R., Hill M. C., McDonald M. G., 2000: MODFLOW-2000, The U.S. Geological Survey Modular Ground-Water model - user guide to modularization concepts and the ground-water flow process (online), [cit. 2019.02.02], dostupné z <<https://pubs.usgs.gov/of/2000/0092/report.pdf>>.

Harbaugh A.W., 2005: MODFLOW-2005, The U.S. Geological Survey modular ground-water model - the Ground-Water Flow Process (online), [cit. 2019.02.02], dostupné z <<https://pubs.usgs.gov/tm/2005/tm6A16/PDF.htm>>.

Havel M., Pertlík J., 2010: Benzen. Arnika (online), [cit. 2019.03.03], dostupné z <<http://arnika.org/benzen>>.

Havel M., Pertlík J., 2010: Ethylbenzen. Arnika (online), [cit. 2019.03.03], dostupné z <<http://arnika.org/ethylbenzen>>.

Havel M., Pertlík J., 2010: Polycyklické aromatické uhlovodíky. Arnika (online), [cit. 2019.03.03.], dostupné z <<https://arnika.org/polycyklicke-aromaticke-uhlovodiky-pahs>>.

Havel M., Pertlík J., 2010: Toluén. Arnika (online), [cit. 2019.03.03], dostupné z <<http://arnika.org/toluen>>.

Havel M., Pertlík J., 2010: Xyleny. Arnika (online), [cit. 2019.03.03], dostupné z <<http://arnika.org/xyleny>>.

IRZ, 2017: Integrovaný registr znečišťování. Ministerstvo životního prostředí České Republiky (online) [cit. 2017.04.03], dostupné z <[http://www.irz.cz/dokumenty/irz/metody\\_mereni/puda/PAU.pdf](http://www.irz.cz/dokumenty/irz/metody_mereni/puda/PAU.pdf)>.

Leush F., Bartkow M., 2010: A short primer on Benzene, Toluene, Ethylbenzene and Xylenes (BTEX) in the Environment and in Hydraulic Fracturing Fluids (online) [cit 12.01.2019], dostupné z <[https://www.researchgate.net/publication/303283816\\_A\\_Short\\_Primer\\_on\\_Benzene\\_Toluene\\_Ethylbenzene\\_and\\_Xylenes\\_BTEX\\_in\\_the\\_Environment\\_and\\_in\\_Hydraulic\\_Fracturing\\_Fluids](https://www.researchgate.net/publication/303283816_A_Short_Primer_on_Benzene_Toluene_Ethylbenzene_and_Xylenes_BTEX_in_the_Environment_and_in_Hydraulic_Fracturing_Fluids)>.

MŽP ČR, 2011: Směrný vodohospodářský plán ČR. Vodohospodářský věstník (online), [cit. 2005-11-11], dostupné z <[www.env.cz/zzp04/kap\\_03.htm](http://www.env.cz/zzp04/kap_03.htm)>.

Pillai M. P., 2010: BTEX- Contamination and Remediation (online) [cit. 2019.02.25], dostupné z <<https://ru.scribd.com/document/60184654/BTEX-Contamination-and-Remediation>>.

Serrano A., Criollo R., Velasco V., Riera G., Vazquez-Sune E., 2017: FREEWAT User Manual, Volume 4 – AkvaGIS (Hydrochemical Analysis Tools and Hydrogeological Analysis Tools) (Online), [cit. 04.03.2019], dostupné z <[http://eeb.lu.lv/pub/GIS/datu\\_analiize/WaterFlow/FreeWat/FREEWAT\\_vol4.pdf](http://eeb.lu.lv/pub/GIS/datu_analiize/WaterFlow/FreeWat/FREEWAT_vol4.pdf)>.



## Seznam použitých symbolů a zkratk

HPV	hladina podzemní vody
BTEX	benzen, toluen, ethylbenzen, xyleny
PAU	polycyklické aromatické uhlovodíky
NEL	nepolární extrahovatelné látky
CHOPAV	Chráněná oblast přirozené akumulace vod
m n. m.	metry nad mořem (nadmořská výška)
m p. OB.	Metry pod observáční bod
[M], [L], [T]	hmotnost, délka a čas – univerzální zápis
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	Symbol změny konečné velikosti v každém ze tří karteziánských směrů
MODFLOW	The US Geological Survey's Modular Groundwater Model
MT3DMS	Modular Three-Dimensional Multispecies Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems
AEM	Analog Equation method

## Seznam obrázků

Obrázek 1 Postupná metodika modelování toku podzemních vod (Tsang, 1991).....	8
Obrázek 2 2D horizontální mřížka metody konečných diferencí (Anderson & Wang, 1982) .....	12
Obrázek 3 Definice $h_{i,j}$ v MKD (Anderson & Wang, 1982).....	12
Obrázek 4 2D horizontální síť metody konečných prvků (Anderson & Wang, 1982) .....	13
Obrázek 5 Definice $h_e$ v MKE (Anderson & Wang, 1982).....	13
Obrázek 6 Oblast $\Omega$ ohraničená hranicí $\Gamma$ (Kuráž, 2014) .....	13
Obrázek 7 Situace vrtů, strojních kopaných sond a sanačních ploch v areálu (San-Tuhnice © 2019) .....	32
Obrázek 8 Okrajové podmínky .....	38
Obrázek 9 Výstup základního hydraulického modelu proudění podzemních vod v zájmovém území .....	39
Obrázek 10 Výstup hydraulického modelu proudění podzemních vod za podmínek čerpání .....	40
Obrázek 11 Isoplochy koncentrace NEL v podzemních vodách .....	41
Obrázek 12 Izoplochy koncentrace NEL za podmínek sanačního čerpání.....	42
Obrázek 13 Izoplochy koncentrace benzenu v podzemních vodách .....	43
Obrázek 14 Izoplochy koncentrace benzenu za podmínek sanačního čerpání .....	44
Obrázek 15 Základní model transportu kontaminantu – izoplochy koncentrace naftalenu.....	44
Obrázek 16 Transportní model kontaminantu – izoplochy koncentrace naftalenu za podmínek sanace .....	45

## Seznam tabulek

Tabulka 1 Rozpustnost a limity pro podzemní vodu pro jednotlivé PAU (Havel & Pertlík, 2010).....	23
Tabulka 2 Rozpustnost a limity pro podzemní vodu pro jednotlivé BTEX (Havel & Pertlík, 2010).....	24
Tabulka 3 Výsledky měření in situ v podzemní vodě (San-Tuhnice © 2019).....	32
Tabulka 4 Hodnoty HPV [m p.OB.] z dubna 2019.....	35
Tabulka 5 Vstupní parametry.....	35
Tabulka 6 Počáteční koncentrace kontaminantů [mg/l].....	36

## Seznam příloh

P 1: Přehledná topografická mapa širšího okolí s vyznačením zkoumané lokality (výřez mapového listu M-33-62-B-c - Karlovy Vary) 1 : 25 000

P 2: Letecký snímek širšího okolí s vyznačením zkoumané lokality cca 1 : 25 000

P 3: Základní vodohospodářská mapa širšího okolí zkoumané lokality (výřez mapového listu 11-21 Karlovy Vary) 1 : 50 000

P 4: Základní geologická mapa širšího okolí zkoumané lokality s vysvětlivkami (výřez mapového listu 11–21 Karlovy Vary) 1 : 50 000

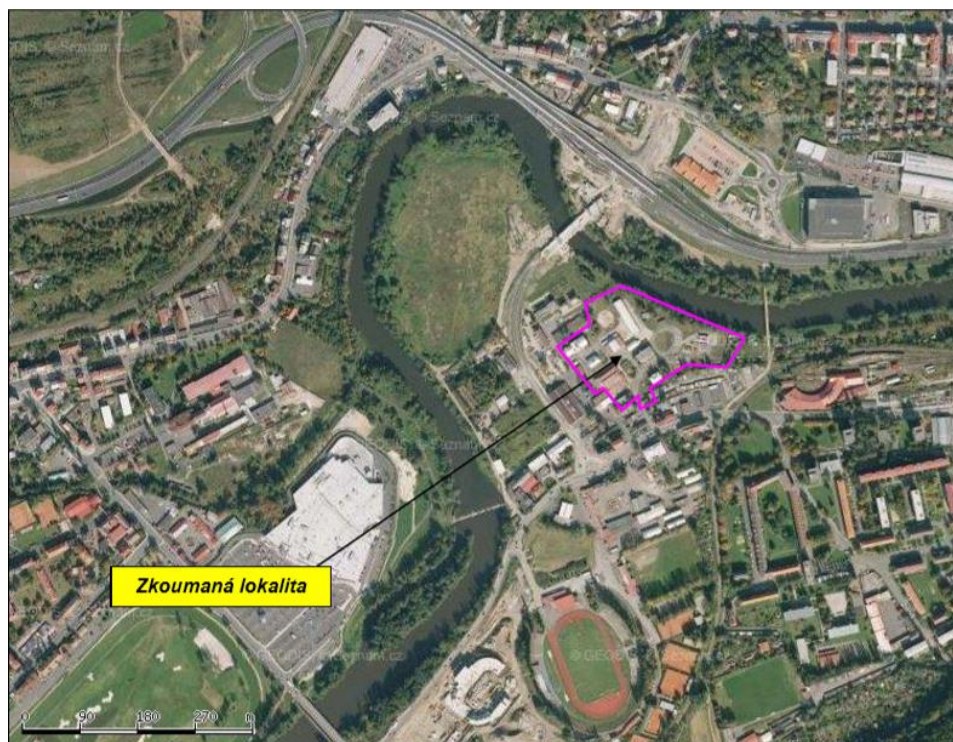
P 5: Situace vrtů, strojních kopaných sond a sanačních ploch v areálu

## Přílohy

Příloha č. 1: Přehledná topografická mapa širšího okolí s vyznačením zkoumané lokality

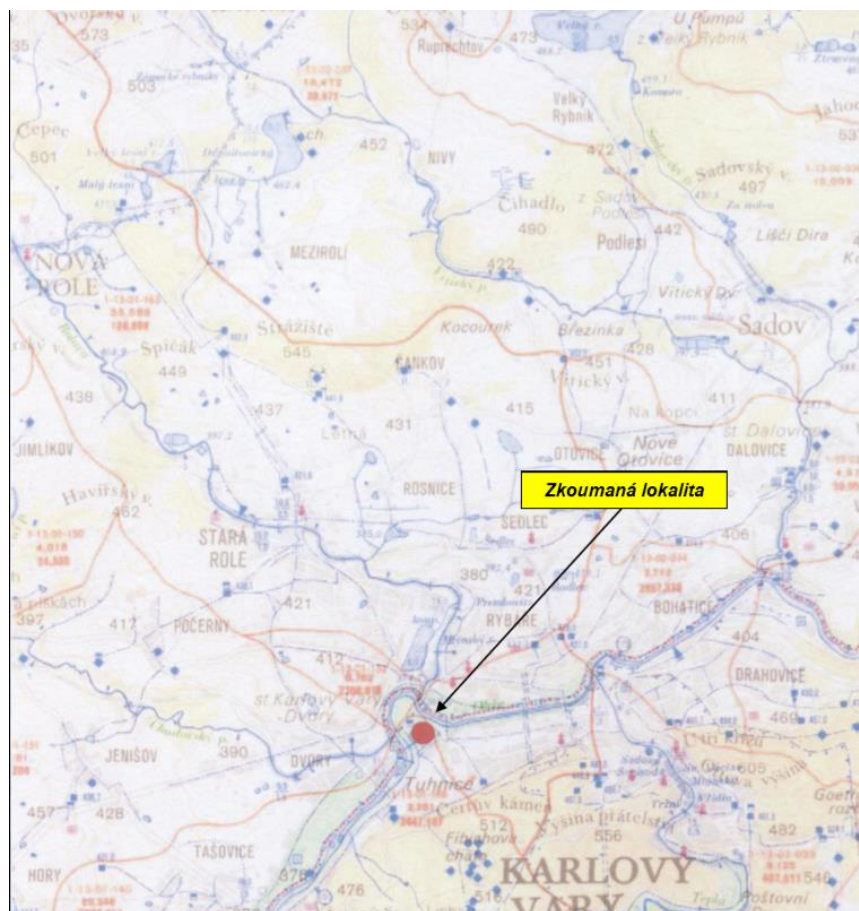


Příloha č. 2: Letecký snímek širšího okolí s vyznačením zkoumané lokality





Příloha č. 3: Základní vodohospodářská mapa širšího okolí zkoumané lokality výřez mapového listu 11–21 Karlovy Vary



Příloha č. 4: Základní geologická mapa širšího okolí zkoumané lokality s vysvětlivkami výřez mapového listu 11–21 Karlovy Vary







**KVARTÉR, holocén:** 1 - antropogenní deponie; 2 - rašeliny a slatiny; 3 - akvária a splachy; 4 - dejekční kuličky;  
**holocén - pleistocén:** 5 - svahoviny; a - člámkovité, b - lité a písčité; 6 - blokové sutě; 7 - aragonyty;  
**pleistocén:** 8 - spraše a sprašové hlíny; 9 - proluvální sedimenty; 10 - fluvialní sedimenty - mladý pleistocén; 11 - fluvialní sedimenty - střední pleistocén; 12 - fluvialní sedimenty - starý pleistocén; a - nižší úroveň, b - vyšší úroveň;  
**TERCIÉR, pliocén-miocén:** 13 - fluvialní sedimenty; 14 - redeponované tufty, misky s uhlavnou substancí;  
**miocén, karpat-ottnang; cyprisové souvrství:** 15 - písčité facie (čankovské písky, štěrčák, štěrky); 16 - jílovitá facie;  
**eggenburg:** 17 - hlavní hnědouhelné souvrství (sloje Antonín a Anežka); 18 - hlavní hnědouhelné souvrství kausticky přeměněné;  
**oligocén - miocén; vyvílený krušnohorský-ohřecký zóny:** 19 - trachytické horniny; 20 - trachyandezit; 21 - bazalt; 22 - leucitický tefrit; 23 - leuciticko-nefelinický bazalt; 24 - leucitický aglát; 25 - komolové brekcie nerozlišené; 26 - bazaltové horniny nerozlišené; 27 - nefelinit; 28 - nefelinický olivinický leucitit; 29 - pyroklastika, tufy a tufty s vrchní částí vulkanického souvrství; 30 - pyroklastika, tufy a tufty tzv. hraničních vrstev; 31 - spodní část vulkanogenního souvrství; 32 - vápence spodní části vulkanogenního souvrství; 33 - pyroklastika nerozlišená;  
**oligocén spodní až střední; hnědouhelné souvrství sloje Josef:** 34 - uhlavná sloj, písky, pískovce;  
**eoocén - oligocén; bazální starosedecké souvrství:** 35 - štěrky, písky;  
**PALEOZOIKUM - pometamorfni, pozdně variské magmatity, žilný doprovod krušnohorského plutonu:** 36 - apfity a apfická granity; 37 - mýněty, spessartský a lamprofýry nerozlišené; 38 - granitový porfyr a přechody do syenitového porfyru; 39 - granitové porfyry mladší intruzivní fáze;  
**Hrubinné vyvílený krušnohorského plutonu, mladší intruzivní fáze - stefan - sp. perm (?):** 40 - drobnozrný, biotit-muskovitický autometamorfovaný granit; 41 - dvojslidný autometamorfovaný granit typ Míllitz; 42 - středně zrnitý muskovit-biotitický granit autometamorfovaný; 43 - hrubozrný, muskovit-biotitický granit autometamorfovaný s turmalinem; 44 - hrubozrný biotitický autometamorfovaný granit; 45 - porfyrický, biotit-muskovitický až muskovit-biotitický autometamorfovaný granit; 46 - granodioritový granit; 47 - granodioritový granit;  
**starší intruzivní fáze - westfal - stefan (?):** 47 - apfický granit; 48 - středně až drobnozrný biotitický granit; 49 - proniký apfických granitů s turmalinem; 50 - středně zrnitý až drobnozrný muskovit-biotitický granit až granodiorit; 51 - nevyrazně porfyrický granit až granodiorit; 52 - porfyrický biotitický granit až granodiorit; 53 - gabrodiorit; 54 - částečně asimilované, kontaktně metamorfované uzavřeniny parahidlic v tělesech magmatitů;  
**silur:** 55 - slabě metamorfovaný fylit;  
**ordovik - kambrium:** 56 - chloritický svorový fylit s albitem; 57 - svorový fylit s albitem a granátem; 58 - biotiticko-muskovitický albitický svorový fylit s granátem a s grafitickou příměsí;  
**SPODNÍ PALEOZOIKUM - SVRCHNÍ PROTEROZOIKUM: ortoruly:** 59 - silně migmatitická dvojslidná ortorula; 60 - deskovitě břidličná migmatitická dvojslidná ortorula; 61 - proniký ortorul do svorů a svorových rul;  
**metamorfované bazické a ultrabazické horniny:** 62 - arnfibolit; 63 - arnfibolit s výrazným obsahem plagioklasu; 64 - granitický až eklogitický arnfibolit;  
**metamorfni komplexy Krušných hor:** 65 - feldspatizovaný muskovit-biotitický svor; 66 - muskovitický svor; 67 - kvarcit s přechody do kvarcitického svoru s porfyrblasty granátu; 68 - granaticko-chloriticko-muskovitický svor se staurolitem; 69 - muskovitický až dvojslidný svor s granátem; 70 - dvojslidný svor s proměnlivým množstvím porfyrblastů plagioklasů a granátů; 71 - kvarcitický dvojslidný svor; 72 - fylitický dvojslidný svor s příměsí pyritu a s vločkami kvarcitických celistvých rul; 74 - muskoviticko-biotitický svor a svorová rula; 75 - dvojslidná až biotitická svorová rula s polohami kvarcitických drobových rul; 76 - svokontaktní dvůr v okolí granitických těles; 77 - křemenné žilv; 78 - kaolinizovaná granit;