

## TERJEDÉSI ÉS EGYÉB MODELLEZŐ ESZKÖZÖK KATEGORIZÁLÁSÁNAK SZEMPONTJAI

Az utóbbi évtizedek során tapasztalt informatikai fejlődés részeként nagyon sok olyan szoftver vált elérhetővé a környezetvédelem és vízgazdálkodás területén, amelyek matematikai modellezés segítségével írják le a különböző kémiai anyagok felszíni és felszín alatti vizekben végbemenő transzportfolyamatait. Éppen ebből, a napjainkban már rendelkezésre álló bőséges kínálatból következik, hogy azon transzport modellek – optimális esetben legalkalmasabb transzport modell – kiválasztása, amelyek egy bizonyos konkrét probléma megoldására alkalmas(ak), a nem-szakértő felhasználók számára egyre inkább bonyolult feladat.

A fő kérdés az, hogy a kiválasztott és később alkalmazásra kerülő modell „képes-e választ adni” a feltett kérdésekre, vagyis megoldható-e vele az adott terület-specifikus hidraulikai illetve transzport probléma, ezért az eredményes modellválasztáshoz általában több tudományterület (*talajfizika, hidrológia, hidrogeológia, geokémia, mikrobiológia, matematika, informatika*) szerves együttműködése szükséges. A mindennapok során azonban, az egyes döntési helyzetekben általában nem áll mindenki számára rendelkezésre egy szakértői team, ezért - felhasználva az informatika nyújtotta lehetőségeket - egy előre jól definiált, összetett tudásbázison alapuló és folyamatosan fejleszthető döntéstámogató szakértői rendszer segítségével a szükséges szakértelem néhány percen belül „előhívható”.

Ennek a döntéstámogató rendszernek egyik fő pillérét képezi egy, a transzport folyamatokat leíró modellek specifikációit magában foglaló modell adatbázis. Az adatbázis alkalmazhatóságát megkönnyíti annak minél rugalmasabban és feladat specifikusan kialakított szerkezete, amely a későbbiekben biztosítja a modellek jellemzőinek csoportosított lekérdezését, valamint a rendszer igény szerint történő további bővíthetőségét.

Ehhez először a szakmában jelenleg elterjedt és alkalmazott transzport modelleket össze kell gyűjteni, kategorizálni, és utána adatbázisba rendszerezni a főbb jellemzőiket.

A modellek kategorizálási rendszerének kialakításában fontos szerepet játszanak úgy a **szakmai**, mint a **felhasználói szempontok** szerint összegyűjtött információk, megfontolások. Utóbbi kategória két nagyobb csoportra bontható fel: a modellt azonosító információkra és a modell használatával kapcsolatos információkra. Az így kialakított adatbázis lehetőség szerint tartalmazza az egyes szoftverek nevét, fejlesztőjét, elérhetőségét, forgalmazójának adatait, árkategóriáját, adattípus-igényét, az eredmények megjelenítésének lehetőségét és módját, a rendszer térinformatikai támogatottságát, valamint a modell adott feladatra történő felépítésének becsült időigényét, mint a **potenciális felhasználó számára** legfontosabb kérdéseket.

A modellek **szakmai szempontú** osztályozásánál abból indulhatunk ki, hogy a kőzetekben és a felszín alatti vizekben végbemenő oldat transzportot fizikai, kémiai és biológiai folyamatok komplex rendszere befolyásolja. Ebből következik, hogy a szennyezés összetételén, eredetének jellegén és a vizsgált komponensek számán túlmenően kulcstényezők még a földtani közeg, vagyis a modellezett tér fizikai és geometriai jellemzői, a probléma megoldás dimenziója, a kezdeti- és a peremfeltételek jellege is. Mindezek már alapvetően determinálják az adott modell alkalmazási területét, valamint a transzportegyenlet modellben célszerűen alkalmazott elemeit.

Az oldat transzport modellek kategorizálása több oldalról történő megközelítéssel is lehetséges. Két nagy átfogó, és egymástól jelentősen eltérő csoportot alkotnak azonban a **determinisztikus** (vagy más néven folyamat-orientált), valamint a **sztochasztikus** modellek (Addiscott és Wagenet, 1985; Nielsen et al., 1989).

A további osztályozás kidolgozásánál az ismert és alkalmazott transzport modellek mintegy 99 %-át alkotó, determinisztikus függvények alapján működő rendszereket vesszük figyelembe.

A modellek **alkalmazási területe** alapján, elsődlegesen hat nagyobb csoportba soroltuk azokat a folyamat-orientált fejlesztésű szoftvereket, amelyek a projekt célkitűzéseivel összhangban, rendelkeznek a megkívánt funkciókkal:

- Felszín alatti szivárgáshidraulikai és transzport modellek,
- Felszíni vizek vízminőségi modelljei,
- Vízyűjtő szintű hidraulikai és transzport modellek,
- Humán egészségügyi kockázatbecslő szoftverek,
- A mezőgazdasági növénytermesztés és a felszín alatti vizek minőségének kapcsolatát leíró modellek,
- Hidrológiai adatbázis és értékelő programok.

Az első, egyben a legszámosabb csoportot alkotó felszín alatti szivárgáshidraulikai és transzport modelleket tovább osztályoztuk a 3 fázisú telítetlen zónában, a 2 fázisú telített zónában, valamint a mindkettőben lezajló folyamatok számítására képes rendszerekre.

A második nagyobb osztályozási szempontot a **transzportegyenlet modellekbe beépített elemeinek a típusa** jelentette, amelyeket mérlegelve, 9 főbb, önálló kategóriát alakítottunk ki. Ezek a diffúzió, a diszperzió, az advekción, az adszorpción, a képződés/produkción, a lebomlás/degradáción, a filtráción, valamint a rendszerbeli források/nyelők figyelembevételével. Jóllehet folyadék fázis esetében hagyományosan konvektív-diszperzív, egy- vagy többdimenziós transzportot tételeznek fel a legtöbb modellben, de ezen túl a rendszerek jelentős hányada már egy vagy több további folyamatot is képes kezelni, például egyensúlyi, vagy kémiai-kinetikus szorpciót, elsőrendű lebomlást, nulladrendű produkciót, vagy éppen mátrix diffúziót a repedezett kőzetek esetében. Ezen transzport-elemek további lehetséges kombinációi az adatbázisban figyelembe vehetők.

Szakmai szempontból nézve, a **talajok és a víztartók térbeli sajátosságainak** pontos jellemzése a helyes modellválasztás egyik legkritikusabb lépése. Az adatbázis kialakításánál két fő kategorizálási szempontot vettünk figyelembe a talajok csoportosításában.

Az egyik ilyen osztályozási szempont azt dönti el, hogy a víztartó rétegzett, vagy nem-rétegzett (egységes) szerkezetű-e. Ennek eldöntése fontos szempont, mivel a két talajtípus adott esetben két különböző matematikai modellt igényelhet.

Hasonlóképpen, eltérő típusú transzport modell válhat szükségessé akkor, ha a talajszelvény nem homogén (strukturált) és ugyanakkor önálló aggregátum, vagy ha a vizsgált rendszer repedezett szerkezetű.

A **vizsgált kémiai elemek száma** szerint megkülönböztettünk egy kémiai elemre (*single-ion*) alkalmazható és több komponensre/kémiai elemre (*multi-component/multi-ion*) alkalmazható transzport modelleket. Itt jegyezzük meg, hogy a viszonylag egyszerű több-komponensű transzport modellek közé sorolhatók a radioaktív anyagok transzportját leíró modellek is, amelyek folyamatos, elsőrendű lebomlási láncokat képeznek.

A **modell geometriája alapján** három szempont szerint osztályoztuk a modelleket. Az első ilyen csoportot a megoldandó probléma dimenziója jelentette, amely szerint lehetnek egy-, két- és 3 dimenziós térbeli megoldással rendelkező modellek. A második csoportnál az alkalmazott koordináta rendszer szerint differenciáltuk a modelleket, azaz megkülönböztettük a szennyezőanyag terjedését derékszögű, radiális és hengeres

rendszerben leíró modelleket. Harmadik osztályozási szempontként a geometriai tér, vagyis a koordináta tengelyek kiterjedése szerint osztályoztunk, amely szerint lehetnek véges, félig korlátos és végtelen kiterjedésű rendszereink.

A **szennyezés eredetének térbeli jellege** szerint megkülönböztettünk az adatbázisban pontszerűen, vonal-mentén jelentkező és területi jellegű szennyező forrásokat.

A **modell kezdeti feltételei** azokat a potenciál értékeket, illetve koncentrációkat jelenti, ahonnan a számítás indul, ezért elsősorban a nempermanens számításoknál van jelentősége. Minthogy a permanens vizsgálat eredménye tulajdonképpen a végtelen idő múlva kialakuló állapotot jelenti, ennek nyilvánvalóan függetlennek kell lennie a kiindulási állapottól. A legtöbb rendelkezésre álló szoftver numerikus megoldása - ettől függetlenül - általában a számítás elindításához permanens esetben is igényel kiindulási vízszintet és koncentrációt, de ennek csak a megoldáshoz szükséges iterációk számára van hatással, maga a megoldás ettől nem változik. Az adatbázisban megkülönböztettünk konstans, lépcsős, impulzus, valamint „egyéb” típusú kezdeti feltételeket. Az impulzus típusú kezdeti feltételeket tovább csoportosítottuk négyzet-, gömb- és henger-szerűen változó feltételekre.

A **modell perem feltételeinek** meghatározásakor azt adjuk meg, hogy mi a hatása a modellezésből kihagyott területnek rendszerünkre, ezért ennek helyes definiálása fontos tényező lehet a modell kiválasztásnál. A modell perem feltételeit három nagyobb kategóriába soroltuk. Az első csoportba a koncentráció-értékkel megadott, vagy más néven Dirichlet típusú peremfeltételeket, másodikba a konstans koncentráció-gradienssel jellemezhető peremfeltételeket, a harmadik csoportba pedig a fluxussal, azaz anyagárammal megadható (Cauchy-típusú) peremfeltételeket soroltuk. Az első és a harmadik típusúak tovább specializálhatók konstans-, lépcsős-, impulzus-, exponenciális- és értékeiben adott koncentráció függvény szerint változó peremfeltételek szerint.

A szennyeződés-terjedési modellek és az ezeken belül működő szivárgáshidraulikai modellek, illetve a speciális esetekben indokolt többfázisú modellek mindegyike mögött egy differenciálegyenlet (-rendszer) húzódik. Ezek **matematikai megoldása szerint** megkülönböztetünk analitikus, numerikus és egyéb módszereken alapuló modelleket. Ezek tovább is csoportosíthatók (véges differenciák módszere, integrál-kifejezésre vezető módszerek, valamint véges elemes és peremelemes módszerek), de a kategorizálási opciót jelenleg ezen a szinten építettünk be az adatbázisunkba. Az esetek többségében (a bonyolultabb térbeli folyamatok modellezéséhez) numerikus módszereket alkalmazunk az áramlási- és transzportegyenletek közelítő megoldására.

### A modellt azonosító információk

|----- Modell neve

|----- Modellt fejlesztő cég neve

|----- Modellt fejlesztő cég elérhetősége

|----- Modell elérhetősége

|----- szabadon letölthető

|----- kereskedelmi forgalomban érhető el

|----- becsült árkategória [Ft]

|----- 100 000 Ft alatt

|----- 100 000 Ft - 1 000 000 Ft

|----- 1 000 000 Ft felet

|----- Külföldi forgalmazó neve

|----- Külföldi forgalmazó elérhetősége

|----- Magyarországi forgalmazó(k) neve

|----- Magyarországi forgalmazók (1,2,...) elérhetősége

## A modell alkalmazási körét leíró információk

### ----- Modell alkalmazási területe

- |----- felszín alatti szivárgáshidraulikai és transzport modellek
  - |----- 3 fázisú telítetlen zóna
  - |----- 2 fázisú telített zóna
  - |----- mindkettő
- |----- felszíni vizek vízminőségi modelljei
- |----- vízgyűjtő szintű hidraulikai és transzport modellek
- |----- humán egészségügyi kockázatbecslő szoftverek
- |----- mezőgazdasági növénytermesztés és a felszín alatti vizek minőségének kapcsolatát leíró modellek
- |----- hidrológiai adatbázis és értékelő programok

### ----- A modellben alkalmazott transzportegyenlet elemek

- |----- diffúzó (*hidrodinamikai diszperzió*)
- |----- diszperzió
- |----- hőtranszport
- |----- advekción
- |----- adszorpción
- |----- képződés (*production*)
- |----- lebomlás (*degradáció*)
- |----- rendszerbeli forrás-nyelő

### ----- Talaj, víztartó típusa

- |----- rétegzett
  - |----- homogén
  - |----- strukturált
- |----- nem rétegzett
  - |----- homogén
  - |----- strukturált

### ----- Vizsgált kémiai elemek száma

- |----- egy kémiai elemre alkalmazható
- |----- több kémiai elemre alkalmazható

### ----- A modell geometriája

- |----- probléma megoldás dimenziója
  - |----- egy dimenziós (1D)
  - |----- két dimenziós (2D)
  - |----- három dimenziós (3D)
- |----- geometriai tér kiterjedése
  - |----- véges
  - |----- félig korlátos
  - |----- végtelen

### ----- Szennyezés eredetének térbeli jellege

- |----- pontszerű
- |----- vonal-menti
- |----- területi

### ----- Kezdeti feltételek

### ----- Peremfeltételek

- |----- permanens
- |----- nem permanens

- |----- Matematikai megoldások
  - |----- analitikus
  - |----- numerikus
  - |----- egyéb

### **A modell használatával kapcsolatos információk**

- |----- Adatigény
  - |----- pontszerű
  - |----- térbeli
  - |----- idősoros
  - |----- térképi adatok
  - |----- GIS rétegek
- |----- Térinformatikailag támogatott
  - |----- igen
  - |----- nem
- |----- Kapcsolódó GIS szoftver típusa
  - |----- megnevezés
- |----- Eredmények megjelenítési lehetőségei
  - |----- van beépített lehetőség
    - |----- táblázat
    - |----- grafikon
    - |----- diagram
    - |----- térkép-szerű
    - |----- egyéb
  - |----- külső programmal végezhető
    - |----- adatkinyerési lehetőség
      - |----- van
      - |----- nincs