

Zbigniew Fąfara*

**ANALIZA WPLYWU WYBRANYCH PARAMETRÓW
NA WYNIKI SYMULACJI PROCESU FILTRACJI SUBSTANCJI
ROPOPOCHODNEJ W OŚRODKU GRUNTOWYM****

1. WPROWADZENIE

Analiza procesów towarzyszących migracji ropopochodnej substancji zanieczyszczającej w środowisku gruntowo-wodnym oparta na studiach literaturowych oraz własnych doświadczeniach uzyskanych dzięki zrealizowanym eksperymentom pozwoliła na wyrowadzenie matematycznego modelu migracji substancji ropopochodnej dla przypadku trójwymiarowego. Stanowi on układ czasowych i przestrzennych równań różniczkowych cząstkowych. Parametrami modelu są stałe lub zmienne opisujące właściwości ośrodka porowatego, właściwości płynów nasycających pierwotnie ośrodek gruntowy, właściwości użytej ropopochodnej substancji zanieczyszczającej oraz wielkości charakteryzujące warunki termodynamiczne, w jakich miało miejsce zdarzenie, w wyniku którego węglowodory wniknęły do gruntu. Rozwiązanie układu równań modelu wymaga zastosowania przybliżonych metod numerycznych sprowadzających go do układu równań algebraicznych. Po zastąpieniu ciągłej zmiennej czasowej i przestrzennej zmiennymi dyskretnymi, przyjmującymi wartości ze stałym krokiem, równania różniczkowe transformują się do równań różnicowych.

Celem niniejszej pracy jest analiza wpływu sposobu dyskretyzacji zmiennej przestrzennej (wielkości kroku) na wyniki symulacji migracji substancji ropopochodnej w ośrodku gruntowo-wodnym. Wykorzystano model matematyczny migracji w wersji opisującej jednowymiarową migrację węglowodorów w kierunku pionowym. Wykonano szereg symulacji procesu migracji wybranych substancji ropopochodnych dla warunków odpowiadających zrealizowanym eksperymentom. Z uwagi na ograniczone ramy pracy, zamieszczono wyniki uzyskane dla etyliny i modelu gruntu piaszczystego. Dla innych substancji ropopochodnych i modeli gruntu rozważania prowadzą do podobnych wniosków. Różnice posiadają jedynie charakter ilościowy.

* Wydział Wiertnictwa, Nafty i Gazu AGH, Kraków

** Praca zrealizowana w ramach badań statutowych WWiG AGH

2. Dyskusja modelu matematycznego

Proces migracji substancji ropopochodnej w ośrodku gruntowo-wodnym jest skomplikowany i przez to trudny do opisu za pomocą zależności matematycznych. Komplikacja ta wynika z dużej liczby postaci, pod jakimi mogą występować węglowodory w gruncie [2, 5], oraz z dużej liczby procesów składowych, kształtujących końcowy obraz migracji. Nie wszystkie z tych procesów zostały wystarczająco dokładnie zbadane i opisane równaniami matematycznymi. Obecnie uważa się, że niektóre z nich nie nadają się do zapisania w postaci zależności funkcyjnej z wystarczającą dokładnością. Przykładem tego może być biodegradacja węglowodorów [2].

Opracowanie modelu matematycznego migracji substancji ropopochodnej w gruncie polega na wykorzystaniu fundamentalnych praw fizyki opisujących zasadę zachowania masy. Do opisu niektórych procesów lub zależności konieczne jest użycie szeregu równań empirycznych. Wiele z nich ma charakter ogólny (np. prawo filtracji Darcy'ego), jednak niektóre opracowano dla szczególnych przypadków i kontrowersje może wzbudzać próba ich uogólnienia.

W trakcie wyprowadzania modelu matematycznego wykorzystanego między innymi następujące zależności empiryczne [2]:

- uogólnione trójwymiarowe prawo filtracji Darcy'ego dla przepływów wieloskładnikowych w ośrodkach niejednorodnych;
- prawo dyfuzji Ficka;
- relacje Coatsa opisujące ciśnienia kapilarne za pomocą współczynników nasycenia płynami przestrzeni porowej;
- model przepuszczalności względnych Stone'a i Coatsa dla przepływów trójskładnikowych w układzie woda-ropa-gaz;
- model podziału substancji ropopochodnej pomiędzy fazę organiczną, wodną i gazową, oparty na bezwymiarowych współczynnikach podziału wynikających z prawa Henry'ego;
- model dyfuzji/dispersji substancji ropopochodnej w ośrodku gruntowym oparty na zależnościach Scheideggera;
- równania opisujące właściwości fazy ropopochodnej w zależności od jej składu (np. lepkość zanieczyszczenia naftowego z równania Arrheniusa, równanie stanu gazu doskonałego);
- zależność właściwości płynów (np. gęstości, lepkości) od warunków termodynamicznych (temperatury i ciśnienia), w jakich przebiega migracja.

W równaniach występuje duża liczba parametrów charakteryzujących właściwości gruntu i nasycających go płynów, właściwości ropopochodnej substancji zanieczyszczającej oraz warunki termodynamiczne, w jakich zachodzi opisywany proces migracji. Do przeprowadzenia symulacji z wykorzystaniem takiego modelu matematycznego należy ponadto opisać warunki początkowe badanego zdarzenia, w tym przypadku początkowy stan nasycenia ośrodka porowatego i sposób wprowadzania do niego zanieczyszczenia, a także warunki brzegowe charakteryzujące zachowanie się składników gruntu na granicach rozważanego fizycznego modelu.

Opracowany model matematyczny procesu migracji substancji ropopochodnej w gruncie [2] stanowi bardzo rozbudowany zestaw zależności, który nie jest prezentowany w tym miejscu w całości czy we fragmentach, z uwagi na ograniczone ramy pracy. Próba jego wykorzystania w praktyce do obliczeń numerycznych przebiegu migracji węglowodorów wymaga wprowadzenia uproszczeń. Podstawowym powodem jest brak pełnej informacji na temat właściwości ośrodka gruntowego i migrujących płynów. Z drugiej strony nie jest możliwe uzyskanie takiej pełnej informacji. Każda metoda badań laboratoryjnych w celu poznania właściwości gruntu czy filtrujących płynów ma charakter przybliżony, wynikający między innymi z przyjętych uproszczeń. Ponadto niejednokrotnie nie posiada się nawet eksperymentalnych ocen niektórych parametrów. Oparcie rozważań na ich wartościach literaturowych może być ryzykowne. Często lepiej jest uprościć model matematyczny, niż prowadzić obliczenia z użyciem przypadkowo dobranych wartości liczbowych wymaganych parametrów. Sytuacja taka jest dużo bezpieczniejsza, chociaż ogranicza ogólny charakter rozważań.

3. ANALIZA WPŁYWU WYBRANYCH CZYNNIKÓW NA WYNIK SYMULACJI

Końcowy wynik symulacji przebiegu procesu migracji substancji ropopochodnej w ośrodku gruntowo-wodnym, otrzymany z wykorzystaniem opracowanego modelu matematycznego [2], stanowi jedynie przybliżony jej opis. Podobna sytuacja dotyczy wszystkich innych przypadków poświęconych identycznej tematyce, które opisano w literaturze, np. [1, 4, 6].

Fakt ten wynika co najmniej z trzech następujących powodów:

- 1) wprowadzonych uproszczeń na etapie wyprowadzania zależności matematycznych opisujących rozważane procesy składowe migracji zanieczyszczeń naftowych;
- 2) niepewności oceny właściwości ośrodka gruntowego i migrujących płynów;
- 3) niedokładności wprowadzonej przez przybliżone metody numeryczne, wykorzystane do rozwiązania otrzymanego układu równań różniczkowych.

Obecnie nie ma możliwości uwzględnienia podczas rozważań modelowych pełnego przebiegu procesów towarzyszących migracji w rzeczywistości oraz dokładnego opisanie właściwości naturalnych gruntów w skali mikroskopowej i właściwości filtrujących płynów.

Konieczne jest wprowadzenie uproszczeń, które dotyczą:

- **Modelowanego zestawu zjawisk** składających się na rozważany proces migracji – niektóre zjawiska, uznane za niewystępujące lub nieistotne dla końcowego obrazu przebiegu migracji w rzeczywistości zostają pominięte.
- **Przybliżonego opisu modelowanych zjawisk** za pomocą aparatu matematycznego – podczas opracowywania modelu matematycznego migracji substancji ropopochodnej w gruncie wykorzystuje się fundamentalne prawa fizyczne uzupełnione o szereg zależności empirycznych, które niejednokrotnie są źródłem dodatkowych niedokładności.
- **Właściwości ośrodka gruntowego** – najistotniejsze uproszczenie dotyczy założenia jednorodności w czasie i/lub przestrzeni właściwości ośrodka gruntowego. Niekiedy wprowadza się makroskopową niejednorodność, opisując model fizyczny gruntu jako

złożony z pewnej liczby „kostek” o skończonych rozmiarach. W każdej z nich zadaje się niezależnie właściwości ośrodka porowatego. Takie postępowanie prowadzi do znacznego rozbudowania modelu matematycznego migracji, stanowiąc nadal tylko pewne przybliżenie niejednorodności naturalnych gruntów. Autor w opisywanych rozważaniach zadał zmienny z głębokością profil zawilgocenia gruntu. Stała uśredniona wilgotność przypisana została warstwowi o miąższości 10 cm. Wydzielono dwanaście takich warstw. Okazało się to jednak niewystarczające do adekwatnego opisu zmienności z głębokością prędkości przesiąkania węglowodorów [2]. Niejednorodności rzeczywistych gruntów w skali mikroskopowej nie da się wyrazić za pomocą stosowanego aparatu matematycznego.

- **Właściwości płynów uczestniczących w procesie migracji** – zazwyczaj traktuje się zanieczyszczającą substancję ropopochodną jako jednorodną mieszaninę węglowodorów o uśrednionych właściwościach, niezmiennych w czasie i przestrzeni. W opisanych rozważaniach założono, że każda substancja zanieczyszczająca składa się z dwóch składników organicznych – jeden może występować tylko w fazie ropopochodnej, natomiast drugi jest w stanie przekraczać granice fazowe i po rozpuszczeniu przechodzić do fazy wodnej lub po odparowaniu przechodzić do fazy gazowej [2]. Każdemu składnikowi przypisano odmienne właściwości. Ich średnią ważoną są właściwości całej fazy ropopochodnej, zmieniające się w czasie i przestrzeni. Metoda ta umożliwiła stosunkowo łatwo wyrazić zależność właściwości fazy ropopochodnej od jej składu, prowadząc do znacznego rozbudowania modelu matematycznego. Tym niemniej stanowi ona nadal uproszczony sposób opisu właściwości substancji ropopochodnej, będącej mieszaniną wielu węglowodorów o odmiennych właściwościach.
- **Warunków termodynamicznych** charakteryzujących przebieg badanego procesu – zwykle przyjmuje się warunki izotermiczne i zakłada się, że faza gazowa znajduje się pod stałym ciśnieniem atmosferycznym. Postępowanie takie jest generalnie uzasadnione w przypadku rozważania krótkotrwałej migracji substancji ropopochodnej w przypowierzchniowej warstwie gruntu. Niewątpliwie upraszcza ona w sposób istotny równania modelu matematycznego.

Na podstawie powyższych rozważań można stwierdzić, że wykorzystywane podczas obliczeń numerycznych oceny parametrów modelu matematycznego muszą stanowić pewne przybliżenie rzeczywistych właściwości ośrodka gruntowego i migrujących płynów, ponieważ nie ma możliwości uwzględnienia ich naturalnej niejednorodności. Dodatkowo niepewność tych ocen będzie zależeć od sposobu wyboru wartości liczbowych. Ze względu na bardzo duże zróżnicowanie właściwości rzeczywistych gruntów preferuje się ich ocenę na podstawie wyników bezpośrednich pomiarów laboratoryjnych. Jest to metoda bardzo niewygodna i kosztowna, ale gwarantująca największą dokładność. W czasie prowadzenia badań, których dotyczą niniejsze rozważania, w miarę posiadanych skromnych możliwości starano się przyjąć parametry wykorzystywanych fizycznych modeli gruntu przy wykorzystaniu danych eksperymentalnych. W razie ich braku sięgano dopiero po informacje literaturowe.

Ostatnim źródłem niedokładności symulacji komputerowej procesu migracji zanieczyszczającej substancji ropopochodnej w ośrodku gruntowym są metody numeryczne. Mimo zastosowanych uproszczeń opracowany model matematyczny stanowi bardzo rozbudowany

układ równań różniczkowych cząstkowych, w którym występują pochodne czasowe i przestrzenne z koncentracji poszczególnych składników ośrodka porowatego. Rozwiązanie numeryczne tego systemu zależności wiąże się z dyskretyzacją zmiennej czasowej i przestrzennej, przez co otrzymuje się układ przybliżonych równań algebraicznych. W praktyce zastąpienie zmiennych ciągłych zmiennymi przyjmującymi wartości dyskretne prowadzi do zastąpienia operatorów pochodnych ilorazami różnicowymi (1). Jeżeli jakaś wielkość charakteryzująca ośrodek gruntowo-wodny zmienia się w sposób ciągły w czasie i przestrzeni $P(x, y, z, t)$, to na podstawie definicji pochodna cząstkowa z P w punkcie czasoprzestrzeni $A(x_1, y_1, z_1, t_1)$ po zmiennej x może być przybliżona następującym ilorazem różnicowym

$$\left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_A \approx \frac{P(x_1 + \Delta x, y_1, z_1, t_1) - P(x_1, y_1, z_1, t_1)}{\Delta x} \quad (1)$$

Z matematycznego punktu widzenia aproksymacja (1) będzie tym dokładniejsza, im mniejszą wartość przyjmie Δx . Przy $\Delta x \rightarrow 0$, z definicji lewa strona (1) będzie równa prawej. Praktyka pokazuje jednak, że uzyskanie rozwiązań numerycznych bliskich faktycznemu scenariuszowi migracji substancji ropopochodnej w gruncie wymaga utrzymania Δx w pewnych ustalonych skończonych granicach [1, 2, 4, 6]. Zastosowanie zbyt małej wartości Δx powoduje, że w kolejnych punktach x_i parametr P zmienia się nieznacznie, a zmiany te są na poziomie niepewności prowadzonych obliczeń. W rezultacie może to prowadzić do generowania tzw. niestabilnych rozwiązań.

Metody numeryczne mogą dawać jakościowo różne rozwiązania w porównaniu z rzeczywistym obrazem migracji węglowodorów. Praktyka pokazuje [1, 2], że w przypadku dyskretyzacji zmiennej przestrzennej, wielkość wydzielonej „kostki” ośrodka gruntowego (dla zagadnienia jednowymiarowej filtracji pionowej staje się ona poziomą warstwą) będzie decydować o kształcie linii frontu migrujących zanieczyszczeń ropopochodnych. Dla dużych kostek (duże Δx) obliczenia numeryczne dostarczają rozwiązań o rozciągniętej linii frontu i łagodnie zmieniającej się koncentracji węglowodorów z głębokością. Zmniejszanie rozmiaru kostki sprawia, że front staje się ostrzejszy, a zmiany koncentracji gwałtowniejsze. Wybór rozwiązania jakościowo najodpowiedniejszego wymaga za każdym razem uwzględnienia właściwości gruntu i migrujących płynów. Generalnie stwierdza się, że w gruntach o dużej przepuszczalności migracja substancji ropopochodnej o niskiej lepkości cechuje się rozciągniętym frontem filtrujących węglowodorów. W miarę pogarszania się właściwości filtracyjnych ośrodka gruntowego i/lub wzrostu lepkości płynu front staje się bardziej ostry.

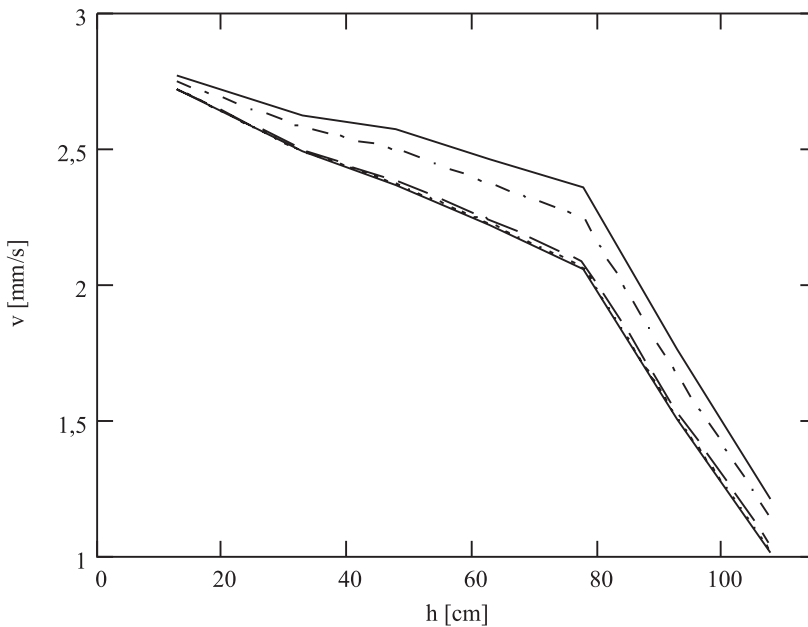
Specyfika obliczeń numerycznych może być również odpowiedzialna za istotne różnice ilościowe w wynikach symulacji, w zależności od przyjętej wielkości kostki. Generalnie chodzi o obserwowany wzrost prędkości rozprzestrzeniania się węglowodorów w gruncie na skutek zwiększania wartości kroku przestrzennego Δx , mimo zachowania niezmiennych właściwości ośrodka gruntowego i filtrujących płynów.

Wyniki przykładowych obliczeń numerycznych obrazujących wpływ wielkości ustalonego kroku przestrzennego Δx na symulowaną prędkość filtracji pionowej węglowodorów przedstawiono w tabeli 1 oraz na rysunku 1.

Tabela 1

Symulowana prędkość pionowej filtracji etyliny w zależności od wielkości kostki

Δx [cm]	2	3	5	10	15
Średnia głębokość interwału h [cm]	Prędkość filtracji pionowej etyliny w modelu gruntu v [mm/s]				
12,5	2,714	2,714	2,717	2,744	2,771
32,5	2,452	2,452	2,459	2,533	2,582
47,5	2,367	2,369	2,381	2,500	2,571
62,5	2,220	2,223	2,239	2,373	2,463
77,5	2,058	2,062	2,083	2,250	2,354
92,5	1,503	1,508	1,531	1,669	1,761
107,5	1,013	1,021	1,042	1,146	1,209

**Rys. 1.** Zależność symulowanej prędkości filtracji pionowej etyliny od rozmiaru kostki

Dane te dotyczą symulacji migracji pionowej etyliny bezołowiowej 95-oktanowej w fizycznym modelu gruntu piaszczystego. W wyniku bezpośrednich pomiarów laboratoryjnych określono wartość jego współczynnika przepuszczalności absolutnej na poziomie 100 darsy [2]. Podczas dopasowywania wyników obliczeń do danych eksperymentalnych starano się uzyskać możliwie największą zgodność wartości prędkości filtracji pionowej

etyliny dla zakresu głębokości 40÷70 cm, stanowiącego środkowy odcinek badanego profilu. Wzięto pod uwagę symulację odpowiadającą krokowi przestrzennemu $\Delta x = 5$ cm. Rezultat końcowy tej operacji stanowi zestaw ocen parametrów modelu matematycznego, opisujący właściwości ośrodka gruntowego i filtrujących płynów. Niezmieniając tych wartości, powtórzono symulację dla kroków przestrzennych równych 2, 3, 10 i 15 cm. Na podstawie wyników symulacji określono prędkość filtracji etyliny.

Przedstawione wyniki pokazują, że symulowana prędkość filtracji pionowej etyliny w modelu ośrodka gruntowego silnie zależy od przyjętej wielkości kroku przestrzennego. Dwukrotny wzrost Δx z 5 cm do 10 cm powoduje zwiększenie obliczonej prędkości filtracji proporcjonalnie do głębokości, maksymalnie o około 10% dla najgłębszego rozważanego interwału. Dla rozmiaru kostki $\Delta x = 15$ cm tendencja ta jest jeszcze bardziej wyraźna – maksymalny wzrost o 16%. Zmniejszanie wartości kroku przestrzennego poniżej $\Delta x = 5$ cm powoduje analogicznie spadek symulowanej prędkości filtracji, ale zmiany są znacznie mniejsze i wynoszą dla Δx równego 3 i 2 cm maksymalnie 2%.

4. PODSUMOWANIE

Zamieszczone rozważania i przedstawione wyniki badań pokazują na trudności pojawiające się przy próbie adekwatnego modelowania numerycznego przebiegu procesu migracji substancji ropopochodnej w ośrodku gruntowo-wodnym. Poza niedokładnościami wprowadzanymi przez przybliżone zależności tworzące model matematyczny oraz oceny właściwości gruntu i filtrujących płynów, otrzymane rozwiązania mogą dodatkowo silnie zależeć od metody dyskretyzacji zmiennej przestrzennej. Podobne wnioski formułuje się w odniesieniu do zmiennej czasowej [np. 1]. Niewłaściwy dobór wartości Δx może zniweczyć trud możliwie jak najdokładniejszego opisu parametrów systemu. Praktycznie w każdej sytuacji powinny być indywidualnie dokonywane ustalenia dotyczące szczegółów realizacji obliczeń numerycznych, prowadzących do rozwiązania równań modelu matematycznego migracji, najlepiej w oparciu o wyniki równoległe prowadzonych badań laboratoryjnych. Bez potwierdzającego eksperymentu symulacja komputerowa przebiegu migracji ropopochodnej substancji w gruncie dostarczać będzie jedynie jej hipotetyczny obraz.

LITERATURA

- [1] Abriola L.M.: *Multifase Migration of Organic Compounds in a Porous Medium*. Berlin, Springer-Verlag 1984
- [2] Fałara Z.: *Badanie procesu migracji substancji ropopochodnych w ośrodku gruntowo-wodnym*. Kraków, Uczelniane Wydawnictwa Naukowo-Dydaktyczne AGH 2007 (monografia habilitacyjna, w druku)
- [3] Fałara Z., Jewulski J., Kaszycki P., Kołoczek H., Rychlicki S., Solecki T., Stopa J., Twardowski K., Wojnarowski P., Zagrajczuk D.: *Metody usuwania zanieczyszczeń węglowodorowych ze środowiska gruntowo-wodnego*. Praca zespołowa pod redakcją S. Rychlickiego, Kraków, Uczelniane Wydawnictwa Naukowo-Dydaktyczne AGH 2006

- [4] Guarnaccia J., Pinder G., Fishman M., Kerr R.S.: *NAPL: simulator documentation*. CR-820499, Burlington, the University of Vermont 2000 (www.epa.gov/ada/)
- [5] Lyman W.J., Reidy P.J., Levy B.: *Mobility and Degradation of Organic Contaminants in Subsurface Environments*. Chelsea, Michigan USA, C.K. Smoley, Inc. 1992
- [6] Weaver J.W., Charbeneau R.J., Tauxe J.D., Lien B.K., Provost J.B.: *The hydrocarbon spill screening model (HSSM). Vol. 2. Theoretical Background and Source Codes*. EPA/600/R-94/039, Austin, Texas 1995, (www.epa.gov/ada/)