

Zbigniew Fąfara*

**PORÓWNANIE WYNIKÓW
BADAŃ EKSPERYMENTALNYCH I ANALIZY NUMERYCZNEJ
MIGRACJI SUBSTANCJI ROPOPOCHODNEJ
W OŚRODKU GRUNTOWO-WODNYM****

1. WPROWADZENIE

Celem pracy jest porównanie wyników badań eksperymentalnych migracji wybranych substancji ropopochodnych w ośrodku gruntowo-wodnym z rezultatami symulacji numerycznej tego procesu. Pomiary eksperymentalne zrealizowano z wykorzystaniem specjalnie przygotowanego stanowiska laboratoryjnego, obejmującego trzy fizyczne modele gruntu niespoistego, odpowiadające właściwościom gruntów piaszczystych i piaszczysto-pyłastych. Dla każdego modelu wykonano badanie rozprzestrzeniania się trzech mieszanin węglowodorów, po uprzednim rozlaniu ich na powierzchnię. W roli ropopochodnej substancji zanieczyszczającej użyto etyliny bezołowiowej, oleju napędowego oraz lekkiej ropy kopalnianej.

Symulacja numeryczna została przeprowadzona z użyciem matematycznego modelu procesu migracji ropopochodnej substancji zanieczyszczającej w ośrodku gruntowo-wodnym, który opracowano, korzystając z fundamentalnych praw fizycznych uzupełnionych wybranymi zależnościami empirycznymi. W wyniku rozważań modelowych uzyskano układ równań różniczkowych cząstkowych opisujących proces migracji w sposób ogólny dla przypadku trójwymiarowego. Na tej podstawie wyprowadzono model matematyczny dla przypadku jednowymiarowego, filtracji węglowodorów w kierunku pionowym. Ten zestaw zależności zaimplementowano po określeniu warunków, w jakich wykonano eksperyment i zrealizowano przykładowe obliczenia.

Dla każdego z dziewięciu wariantów wykonano szereg symulacji procesu migracji substancji ropopochodnej w gruncie w kierunku pionowym, starając się uzyskać jak naj-

* Wydział Wiertnictwa, Nafty i Gazu AGH, Kraków

** Praca zrealizowana w ramach badań własnych WwNiG AGH

lepsze dopasowanie wyników obliczeń do danych eksperymentalnych. Nie zawsze okazało się to możliwe. W niniejszej pracy zaprezentowano przykładowe efekty takiej próby dopasowania dla czterech wybranych przypadków.

2. BADANIA EKSPERYMENTALNE

Badania eksperymentalne migracji substancji ropopochodnej w ośrodku gruntowo-wodnym zrealizowano na specjalnie do tego celu przygotowanym laboratoryjnym stanowisku pomiarowym obejmującym trzy fizyczne modele gruntu niespoistego [2, 3]. Do ich wykonania wykorzystano odpowiednio dobrane kruszywa, gwarantujące uzyskanie istotnie różnych właściwości, w szczególności współczynnik przepuszczalności absolutnej otrzymanych modeli różnił się w skrajnym przypadku prawie dwudziestokrotnie. Projektując stanowisko pomiarowe, przeprowadzono analizę podobieństwa przebiegu rozważanych procesów migracji w skali laboratoryjnej i w naturalnych gruntach, która pozwoliła na opracowanie kryteriów podobieństwa, określających między innymi minimalne wymiary geometryczne fizycznego modelu. W rezultacie modele te przygotowano w postaci sześcianów o krawędzi 1,25 m każdy.

Ropopochodną substancję zanieczyszczającą rozlewano w sposób kontrolowany w centralnej części powierzchni modelu. Badania dynamiki procesu migracji w ośrodku gruntowo-wodnym wykonano metodą atmogeochemiczną [2–4], określając koncentrację par węglowodorów w gazach gruntowych, gromadzących się w rurkach pomiarowych zamontowanych na określonej głębokości modelu gruntu.

Użyto trzech następujących produktów naftowych:

- 1) etyliny bezołowiowej 95-oktanowej, stanowiącej typowe paliwo silników benzynowych,
- 2) oleju napędowego, będącego paliwem silników diesla,
- 3) lekkiej ropy kopalnianej z kopalni Grobla.

Wyniki pomiarów bezpośrednich pozwoliły między innymi na ocenę prędkości filtracji pionowej zastosowanych mieszanin węglowodorów w fizycznych modelach gruntu. Prędkość tę odnoszono do migracji frontu zanieczyszczeń. Za moment dotarcia zanieczyszczeń ropopochodnych na określoną głębokość przyjęto czas odpowiadający pojawieniu się w rurce pomiarowej par węglowodorów o koncentracji trzykrotnie wyższej od rejestrowanego poziomu tła w powietrzu.

Określona tą metodą prędkość filtracji silnie zależy od przepuszczalności modelu gruntu i użytej substancji ropopochodnej [2]. W modelu reprezentującym grunty piaszczyste, którego przepuszczalność absolutną oszacowano za pomocą bezpośrednich pomiarów laboratoryjnych na poziomie 100 darsy, prędkość migracji etyliny zmieniała się wraz z głębokością od 2,5 mm/s przy powierzchni do 0,5 mm/s na głębokości poniżej 1 m, oleju napędowego odpowiednio od 0,8 mm/s do 0,05 mm/s, natomiast dla ropy z kopalni Grobla od 1,4 mm/s do 0,02 mm/s. Zróżnicowanie wartości prędkości filtracji tłumaczono zmiennym z głębokością stopniem zawilgocenia gruntu [2, 5].

Dla modelu gruntu piaszczysto-pylastego o przepuszczalności absolutnej 10 darsy etylina migrowała w kierunku pionowym z prędkością od 1,7 mm/s przy powierzchni do

0,06 mm/s poniżej głębokości 1 m, olej napędowy odpowiednio od 0,7 mm/s do 0,02 mm/s, a ropa z kopalni Grobla z prędkością od 0,5 mm/s do 0,01 mm/s.

W modelu gruntu piaszczysto-pyłastego o przepuszczalności absolutnej wynoszącej około 6 darsy otrzymano prędkość filtracji pionowej etyliny równą 1,2 mm/s przy powierzchni i 0,1 mm/s poniżej 1 m głębokości. Dla oleju napędowego uzyskano odpowiednio 0,7 mm/s i 0,02 mm/s, natomiast w przypadku ropy z kopalni Grobla 0,5 mm/s i 0,01 mm/s.

Prędkość migracji pionowej ropopochodnych substancji zanieczyszczających w gruncie, określona w drodze eksperymentu, została przedstawiona dla czterech wybranych przypadków w formie graficznej na rysunkach 1–4. Zestawiono ją z wynikami symulacji komputerowej.

3. SYMULACJA PRZEBIEGU MIGRACJI SUBSTANCJI ROPOPOCHODNEJ

Symulację przebiegu migracji substancji ropopochodnej w ośrodku gruntowo-wodnym przeprowadzono z wykorzystaniem opracowanego modelu matematycznego dla przypadku jednowymiarowego [2]. Stanowi on bardzo rozbudowany układ równań różniczkowych z pochodnymi po czasie i zmiennej przestrzennej (głębokości), w którym rolę zmiennych niezależnych odgrywają koncentracje płynów, wypełniających przestrzeń porową gruntu. Wykorzystanie metod numerycznych do rozwiązania tego układu wiąże się z dyskretyzacją wartości zmiennej czasowej i głębokości. Po tej operacji sprowadza się on do układu równań algebraicznych.

Wyprowadzając równania matematyczne opisujące proces migracji węglowodorów w gruncie, uproszczono jej obraz, biorąc pod uwagę następujące procesy:

- filtrację fazy ciekłej w kierunku pionowym pod wpływem siły grawitacji,
- dyfuzję/dyspersję węglowodorów w gazach gruntowych w fazie gazowej,
- dyfuzję/dyspersję węglowodorów w fazie ciekłej,
- adwekcję węglowodorów rozpuszczonych/rozproszonych w fazie wodnej.

Pominięto między innymi adsorpcję węglowodorów na fazie stałej, która w pewnych sytuacjach może się znacząco przyczynić do opóźnienia przebiegu migracji substancji ropopochodnej w gruncie, oraz biodegradację węglowodorów. Oba te zjawiska nie powinny mieć istotnego wpływu na dynamikę procesu rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń ropopochodnych na przygotowanym stanowisku pomiarowym [2].

W czasie rozważań modelowych wyróżniono cztery następujące struktury ośrodka gruntowego, zwane dla uproszczenia fazami:

- 1) faza stała (szkielet mineralny),
- 2) woda,
- 3) gazy gruntowe (powietrze),
- 4) produkty naftowe (zanieczyszczenie).

Fazy te posiadają wyraźnie zarysowane granice, chociaż to rozdzielenie nie przekreśla możliwości transportu masy przez granice fazowe. Każda z faz charakteryzuje się swoimi właściwościami. Takie podejście zazwyczaj było stosowane przez innych autorów badających proces migracji substancji ropopochodnej w gruncie, np. [6, 7].

Każda z faz może być utworzona z pewnej liczby składników. W rozważaniach wyróżniono następujące składniki obecne w systemie:

- grunt (składnik stały, szkielet mineralny);
- woda;
- powietrze;
- pierwszy składnik organiczny (naftowy), który nie przekracza granic fazowych i występuje tylko w fazie ropopochodnej;
- drugi składnik organiczny, zdolny do przekraczania granic fazowych.

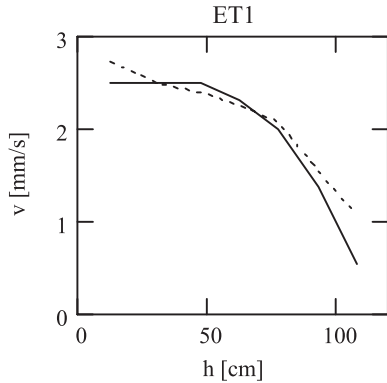
Składnik stały może występować tylko w fazie stałej. Składnik „woda” będzie występował w fazie wodnej, mogąc równocześnie przechodzić do fazy stałej – adsorpcja wody na cząsteczkach gruntu, fazy gazów gruntowych – para wodna wymieszana z powietrzem gruntowym oraz fazy organicznej – drobiny wody rozproszone w fazie ropopochodnej, np. w postaci emulsji. Składnik „powietrze” występuje w sposób naturalny w fazie gazowej, mogąc przechodzić do fazy wodnej i fazy ropopochodnej. Faza ropopochodna z założenia składa się z dwóch makroskopowych komponentów. Każdy z nich jest mieszaniną węglowodorów i może mieć różny skład chemiczny lub tylko stanowić grupy węglowodorów o odmiennych właściwościach. Wyróżnione składniki organiczne są reprezentowane za pomocą uśrednionych właściwości swoich komponentów. Pierwszy składnik organiczny z założenia może występować tylko w fazie ropopochodnej, natomiast drugi składnik organiczny jest w stanie przekraczać granice fazowe i przechodzić do fazy stałej – adsorpcja produktów naftowych na ziarnach gruntu, fazy wodnej – rozpuszczanie/rozpraszanie węglowodorów w wodzie i fazy gazowej – mieszanie się par węglowodorów z gazami gruntowymi.

Taki sposób reprezentowania ropopochodnej substancji zanieczyszczającej jest niekiedy spotykany w literaturze, przy próbie opisu migracji węglowodorów w ośrodku gruntowo-wodnym, np. [1]. Pozwala on dosyć elastycznie opisać właściwości i zachowanie produktów naftowych, gwarantując zarazem większą stabilność uzyskiwanych rozwiązań. Podana metoda, mimo swojej niedoskonałości, stanowi bez wątpienia dużo lepszą alternatywę niż traktowanie fazy ropopochodnej, jako jednorodna mieszanina węglowodorów o uśrednionych właściwościach.

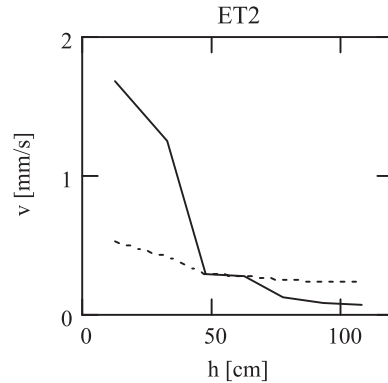
Podczas próby symulacji przebiegu procesu migracji wybranych trzech substancji ropopochodnych w przygotowanych trzech fizycznych modelach ośrodka gruntowego, istotny element stanowił dobór parametrów modelu matematycznego, opisujących właściwości ośrodka gruntowego oraz migrujących płynów. Starano się w miarę posiadanych możliwości wykorzystywać do tego celu wyniki bezpośrednich badań laboratoryjnych [2, 3]. Nie zawsze było to jednak możliwe i wówczas przyjmowano dane literaturowe. Dodatkowo oprogramowano źródło zanieczyszczeń ropopochodnych działające na powierzchni gruntu przez czas równy czasowi ich wprowadzania.

Dla każdego z dziewięciu rozważanych przypadków proces symulacji prowadzono wielowariantowo, starając się jak najlepiej dopasować wyniki obliczeń numerycznych do danych eksperymentalnych. Dopasowanie to polegało na dobraniu wartości parametrów modelu matematycznego, mieszczących się w granicach wyznaczonych przez bezpośredni pomiar laboratoryjny lub dane literaturowe, by uzyskać możliwie najwyższą zgodność rezultatów w przedziale głębokości 40÷70 cm. Nie zawsze okazało się to możliwe. Na ry-

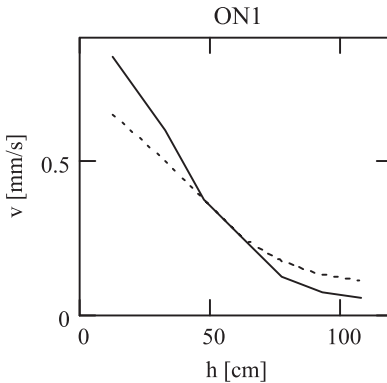
sunkach 1–4 zamieszczono przykładowe wykresy zmian prędkości filtracji pionowej v w substancji ropopochodnej z głębokością h . Linia ciągła dotyczy danych pochodzących z badań laboratoryjnych, linia kropkowana stanowi wynik obliczeń numerycznych.



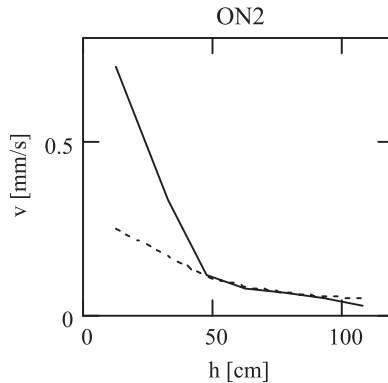
Rys. 1. Zmierzona (linia ciągła) i symulowana (linia kropkowana) prędkość filtracji pionowej etyliny w fizycznym modelu gruntu 1



Rys. 2. Zmierzona (linia ciągła) i symulowana (linia kropkowana) prędkość filtracji pionowej etyliny w fizycznym modelu gruntu 2



Rys. 3. Zmierzona (linia ciągła) i symulowana (linia kropkowana) prędkość filtracji pionowej oleju napędowego w fizycznym modelu gruntu 1



Rys. 4. Zmierzona (linia ciągła) i symulowana (linia kropkowana) prędkość filtracji pionowej oleju napędowego w fizycznym modelu gruntu 2

4. ANALIZA PORÓWNAWCZA WYNIKÓW

Znacznie lepsze efekty dopasowania wyników symulacji do danych eksperymentalnych obserwuje się w fizycznym modelu gruntu 1, reprezentującym grunty piaszczyste. Zgodność wartości w środkowym odcinku krzywej prędkości filtracji jest związana z zastosowaną metodą dopasowywania rezultatów. W przypowierzchniowej strefie ośrodka

gruntowego symulacja zaniża wartość prędkości pionowej filtracji substancji ropopochodnej, natomiast na dużych głębokościach ją zawyża.

Dla etyliny w modelu 1 różnice nie są duże i nie przekraczają 10% wartości eksperymentalnej, z wyjątkiem najgłębszego interwału, gdzie wynik obliczeń numerycznych jest dwukrotnie wyższy od wartości zmierzonej. Dodatkowo w tym przypadku prędkość filtracji etyliny w strefie przypowierzchniowej pochodząca z pomiaru może być niedokładna z powodu trudności w uchwyceniu momentu dojścia węglowodorów do pierwszych dwóch punktów pomiarowych, wynikającej z szybkiej migracji etyliny.

Różnice dotyczące prędkości filtracji oleju napędowego w modelu gruntu 1 są nieco większe i w przypowierzchniowej strefie gruntu symulacja zaniża jej wartość maksymalnie o około 20%, natomiast dla głębokości ponad 1 m obliczona prędkość migracji oleju napędowego jest podobnie dwukrotnie wyższa od zmierzonej.

W fizycznym modelu 2 gruntu piaszczysto-pyłastego generalnie należy stwierdzić, że nie udało się dopasować wyników symulacji do danych eksperymentalnych. W przypowierzchniowej strefie gruntu obliczona prędkość filtracji etyliny jest średnio trzykrotnie niższa od wartości zmierzonej, natomiast dla oleju napędowego dwukrotnie niższa. Z kolei dla głębokości 1 m tendencja jest odwrotna, obliczenia numeryczne trzykrotnie zawyżają wartość prędkości filtracji etyliny i dwukrotnie oleju napędowego.

Opisane rozbieżności pomiędzy wynikami symulacji komputerowej i pomiarów laboratoryjnych prędkości filtracji pionowej wybranych substancji ropopochodnych można w sposób spójny wyjaśnić. Wyższa zmierzona prędkość filtracji w strefie przypowierzchniowej gruntu jest najprawdopodobniej związana ze sposobem wprowadzania zanieczyszczenia do systemu.

Substancja ropopochodna wylewana była nad powierzchnią z kanistra i posiadała pewną prędkość początkową, która ułatwiała wnikanie do gruntu w początkowej fazie migracji. Efekt ten pogłębiał się wraz ze spadkiem przepuszczalności ośrodka porowatego i wzrostem współczynnika lepkości substancji zanieczyszczającej. Zjawiska tego nie uwzględniono w trakcie rozważań modelowych.

Niższe, obserwowane w rzeczywistości, prędkości filtracji substancji ropopochodnych w głębszych partiach gruntu są najprawdopodobniej związane z niedokładnością danych dotyczących zmian zawilgocenia fizycznego modelu gruntu z głębokością. Profil ten został określony w drodze bezpośrednich pomiarów laboratoryjnych, w których jednak zastosowano metodę uśredniania wyników w obrębie interwałów o długości 10 cm [2]. W momencie występowania dużych różnic w zawilgoceniu gruntu na krańcach tego interwału uśrednianie spowoduje przypisanie mu pewnej wartości pośredniej, znacznie odbiegającej od ekstremalnej.

Z drugiej strony prędkość przesiąkania substancji ropopochodnej nie jest liniową funkcją zawilgocenia gruntu. W rezultacie operowanie średnim zawilgoceniem gruntu w granicach wydzielonego interwału będzie źródłem zawyżenia prędkości migracji węglowodorów pochodzącej z obliczeń, w porównaniu z danymi eksperymentalnymi. Generalnie więc, obserwowane rozbieżności wartości prędkości filtracji pionowej dla dużych głębokości są wynikiem zastąpienia w rozważaniach modelowych niejednorodnego ośrodka gruntowego w skali mikroskopowej jego modelem o jednorodnych uśrednionych właściwościach w pewnych interwałach makroskopowych.

5. PODSUMOWANIE

Celem zrealizowanych badań jest porównanie wyników symulacji komputerowej przebiegu procesu migracji ropopochodnej substancji zanieczyszczającej w ośrodku gruntowo-wodnym w kierunku pionowym z rezultatami pomiarów laboratoryjnych. Porównanie to stanowi pewien element oceny dokładności obliczeń numerycznych. Takie postępowanie powinno towarzyszyć rozwiązywaniu wszelkich podobnych problemów. Zastosowanie sprzężenia zwrotnego pomiędzy modelowaniem i eksperymentem dodaje wiarygodności symulacjom komputerowym. Człowiek zazwyczaj z dużą ostrożnością podchodzi do wyników obliczeń numerycznych, niemając możliwości ich weryfikacji.

Uzyskane wyniki symulacji procesu migracji węglowodorów w gruncie są bardzo zbliżone do danych eksperymentalnych dla przypadku fizycznego modelu gruntu piaszczystego, o wysokiej wartości współczynnika przepuszczalności absolutnej. Nieco lepsze dopasowanie otrzymano, gdy ropopochodną substancją zanieczyszczającą była etylina. Dla modelu gruntu piaszczysto-pyłastego o przepuszczalności absolutnej równej około 10 darsy rozbieżności pomiędzy wynikami badań laboratoryjnych i obliczeń numerycznych są bardzo duże i sugerują, że w modelu matematycznym nie uwzględniono pewnych dodatkowych czynników istotnie wpływających na przebieg migracji węglowodorów. W przypowierzchniowej warstwie gruntu istotną rolę odgrywa najprawdopodobniej sposób wprowadzania zanieczyszczenia, które wypływając z kanistra, posiada pewną prędkość początkową.

Rozbieżności wyników dla dużych głębokości (około 1 m) są prawdopodobnie wynikiem niedokładnego opisu parametrów modelu gruntu (profilu zawilgocenia), który jest konsekwencją przybliżenia naturalnej niejednorodności ośrodka gruntowego w skali mikroskopowej, niejednorodnością makroskopową, polegającą na przypisaniu interwałom głębokości o długości 10 cm stałego, uśrednionego zawilgocenia.

LITERATURA

- [1] Abriola L.M.: *Multiface Migration of Organic Compounds in a Porous Medium*. Niemcy, 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] Fałara Z., Gołębiowski T., Marcak H., Nagy S., Rychlicki S., Siemek J., Solecki T., Tomecka-Suchoń S.: *Lokalizacja zanieczyszczeń węglowodorowych w gruncie metodami geofizycznymi i atmochemicznymi*. Praca zespołowa pod redakcją H. Marcaka i T. Gołębiowskiego. Kraków, Uczelniane Wydawnictwa Naukowo-Dydaktyczne AGH 2006

- [5] Fařara Z., Rychlicki S.: *Wpływ wlaścności gruntu na migrację węglowodorów na podstawie badań laboratoryjnych*. Rocznik AGH Wiertnictwo Nafta Gaz, 22/1, 2005, 135–143
- [6] Guarnaccia J., Pinder G., Fishman M., Kerr R.S.: *NAPL: simulator documentation*. CR-820499, the University of Vermont, Burlington, 2000 (www.epa.gov/ada/)
- [7] Weaver J.W., Charbeneau R.J., Tauxe J.D., Lien B.K., Provost J.B.: *The hydrocarbon spill screening model (HSSM). Volume 2. Theoretical Background and Source Codes*. EPA/600/R-94/039, Austin, Texas, 1995 (www.epa.gov/ada/)