

Zbigniew FAFAra

Wydział Wiertnictwa, Nafty i Gazu, Akademia Górniczo-Hutnicza, Kraków

PORÓWNANIE WYNIKÓW SYMULACJI MIGRACJI PIONOWEJ ZANIECZYSZCZEŃ ROPOPOCHODNYCH W GRUNCIE Z REZULTATAMI BADAŃ LABORATORYJNYCH

Streszczenie. W pracy przedstawiono wyniki symulacji migracji etyliny w środowisku gruntowo-wodnym, które porównano z uzyskanymi rezultatami badań laboratoryjnych wykonanych na przygotowanym stanowisku pomiarowym. Rozważania dotyczą modelu gruntu piaszczystego. Oznaczone laboratoryjnie jego właściwości stanowią parametry dopasowania dla zrealizowanych obliczeń numerycznych. Przeprowadzana analiza pokazuje zgodność wyników eksperymentalnych i przewidywań symulacji komputerowej.

RESULTS OF A SIMULATION OF VERTICAL MIGRATION OF OIL PRODUCTS IN SOIL AND VERSUS RESULTS OF LABORATORY EXPERIMENTS

Summary. The results of a simulation of migration of ethyl gasoline in a soil-water environment were compared with laboratory results obtained on a measurement post. A sandy soil model was considered in the studies. Its properties determined in a laboratory are fit parameters for numerical calculations. The analyses show to a good congruence of experimental and computer simulation results.

1. Wprowadzenie

Zanieczyszczenia przypowierzchniowej warstwy gruntu substancjami ropopochodnymi (NAPL) stanowią obecnie bardzo powszechne przypadki skażeń środowiska naturalnego. Proces migracji węglowodorów w środowisku gruntowo-wodnym stał się z tego względu przedmiotem licznych analiz, o których szeroko pisze się w literaturze światowej. Rozwijane

są prace teoretyczne, mające na celu dopasowanie modelu teoretycznego [np. 1, 4, 7, 8, 10], przeprowadzane są liczne badania laboratoryjne i polowe [np. 4, 5, 6] (jak omówione w niniejszej pracy), a także przygotowywane są numeryczne symulatory zjawiska migracji węglowodorów [np. 4, 7, 9, 10]. W pracy wykorzystano jeden z dostępnych programów tego typu o nazwie *napl*, który stworzono niedawno na zlecenie Agencji Ochrony Środowiska Stanów Zjednoczonych [4].

2. Charakterystyka symulatora

Program *napl* należy do aplikacji o stosunkowo zaawansowanym modelu teoretycznym, opisującym proces migracji substancji ropopochodnej w gruncie [4]. Rozważa on migrację węglowodorów w trzech fazach: w fazie ciekłej NAPL, wodnej z rozpuszczonymi i/lub rozproszonymi węglowodorami i gazowej z parami NAPL wymieszanymi z gazami gruntowymi. Symulator wykorzystuje układ cząstkowych równań różniczkowych bilansu masy każdego ze składników uczestniczących w procesie, uwzględniając między innymi ich filtrację, adwekcję, dyspersję i degradację oraz międzyfazową wymianę masy. W opisie przepływu trójfazowego w ośrodku porowatym zaimplementowano histerezowy model wyrażający zależność pomiędzy względną przepuszczalnością, nasyceniem przestrzeni porowej wodą i ciśnieniem kapilarnym. Parametrami dopasowania są między innymi właściwości ośrodka porowatego i migrujących płynów.

Przy tworzeniu symulatorów tak skomplikowanych procesów, jak np. migracja zanieczyszczeń w przypowierzchniowej warstwie gruntu, zazwyczaj wprowadza się w implementacji modelu teoretycznego szereg założeń upraszczających, z uwagi na niewystarczający poziom wiedzy w interesującym zakresie i/lub niewspółmiernie duże koszty przystosowania bardziej zaawansowanych algorytmów w programie. W przypadku *napl* postąpiono podobnie i te uproszczenia stały się powodem krytyki niektórych badaczy [4]. Tym niemniej autorzy aplikacji wykonali wiele badań porównujących wyniki symulacji z rezultatami pomiarów laboratoryjnych i polowych, w rezultacie których stwierdzili zadowalającą zgodność otrzymanych wartości [4].

3. Opis stanowiska pomiarowego

Przygotowane stanowisko pomiarowe [2, 3] obejmuje model ośrodka gruntowego w kształcie sześcianu o krawędzi 1,25 m. Jego właściwości (określone w drodze pomiarów laboratoryjnych) są reprezentatywne dla typowych gruntów piaszczystych. Wewnątrz modelu zainstalowano perforowane rurki pomiarowe PCV do badania składu gazów gruntowych (na obecność par węglowodorów wybuchowych) z użyciem przyrządu Multiwarn II firmy Däger [3]. Przyjęta metodyka pozwalała na uchwycenie momentu dojścia migrującej substancji ropopochodnej do określonego punktu pomiarowego. Zanieczyszczenie w postaci 11 litrów etyliny bezołowiowej rozlano na powierzchni modelu symetrycznie do jego osi pionowej na obszarze koła o promieniu 12 cm. Sposób ułożenia rurek pozwala na analizę charakterystyk czasowych przebiegu migracji zarówno w kierunku pionowym, jak i poziomym.

4. Wyniki symulacji numerycznej

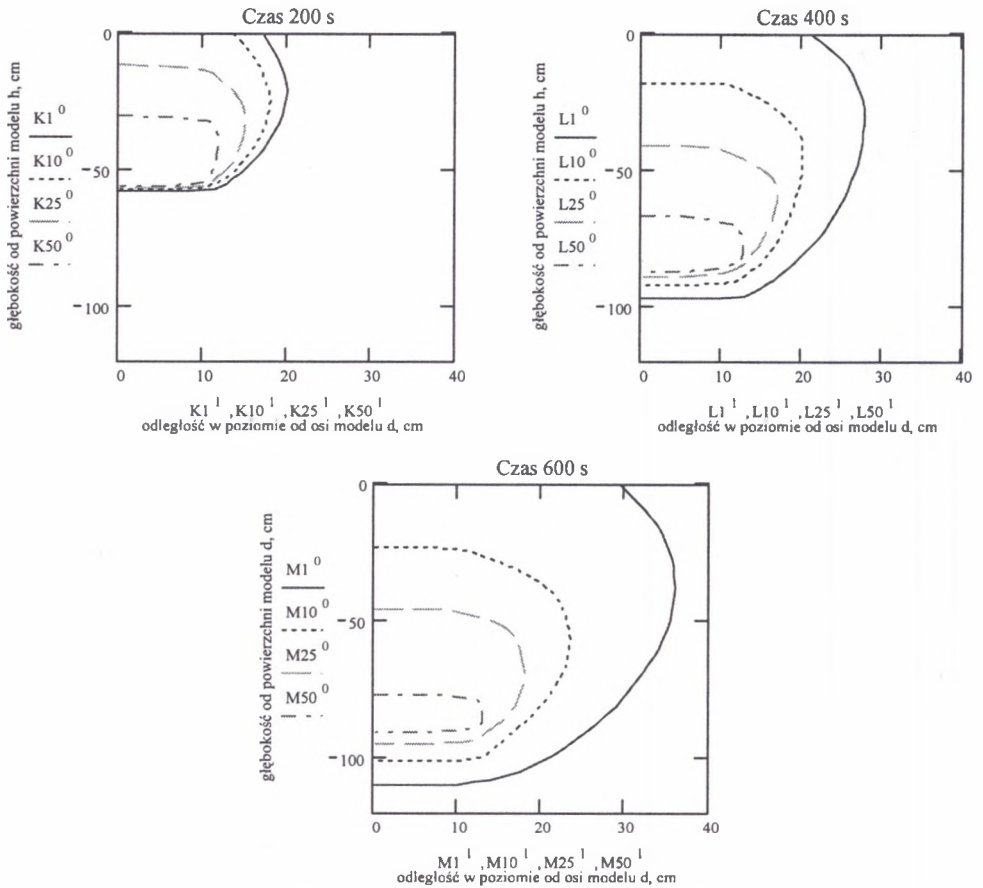
Jako wejściowe parametry dla symulatora wprowadzono:

1. Właściwości płynów (np. gęstość, lepkość), przyjęte jako typowe [np. 4, 7, 9].
2. Parametry histerezy modelu wiążącego przepuszczalność względną, nasycenie fazą wodną i ciśnienie kapilarne, przyjęto według dokumentacji programu [4].
3. Właściwości ośrodka porowatego, przyjęto na podstawie wyników bezpośrednich i pośrednich badań laboratoryjnych (np. porowatość $n=38,19\%$, współczynnik przepuszczalności absolutnej $k=70 \cdot 10^{-12} m^2$) [2, 3].
4. Profil głębokościowy zawilgocenia, przyjęto na podstawie badań laboratoryjnych [3].
5. Pozostałe parametry wejściowe, przyjęto za dokumentacją symulatora [4].

Wyniki symulacji migracji etyliny przedstawiono na rys. 1 dla trzech kolejnych punktów czasowych 200 s (wektor K), 400 s (wektor L) i 600 s (wektor M), licząc od momentu rozlania (rozpoczęcia procesu rozlewania) zanieczyszczeń na powierzchni modelu gruntu. Na każdym z diagramów zamieszczono cztery kontury oznaczające odpowiednio (idąc do środka diagramu) następujące koncentracje etyliny w przestrzeni porowej: 1% obj. (linia ciągła, wektory X1 dla X=K, L i M), 10% obj. (linia kropkowana, wektory X10), 25% obj. (linia przerywana, wektory X25) i 50% obj. (linia kropkowana przerywana, wektory X50).

Uzyskane wyniki pozwalają na oszacowanie symulowanej prędkości migracji węglowodorów w kierunku pionowym i poziomym. W tablicy 1 zamieszczono porównanie

rezultatów symulacji pomiarów laboratoryjnych szybkości migracji wzdłużnej dla wybranych punktów czasowych. W interpretacji wyników pomiarów laboratoryjnych przyjęto uważać za moment dojścia węglowodorów do danego punktu pomiarowego trzykrotne przekroczenie poziomu tła w powietrzu przez rejestrowaną koncentrację par węglowodorów wybuchowych w gazach gruntowych (oznaczało to w praktyce wartość 0,2% obj.).



Rys. 1. Wyniki symulacji migracji etyliny w gruncie
Fig. 1. Computed results for the ethylene migration

Tablica 1

Porównanie symulowanej i zmierzonej szybkości migracji pionowej etyliny w modelu gruntu

Czas od momentu rozlania etyliny s	Symulacja		Eksperyment
	Zasięg głębokościowy konturu dla koncentracji etyliny w przestrzeni porowej		Głębokość wystąpienia koncentracji par trzykrotnie powyżej tła
	1 % obj. cm	10% obj. cm	0,2% obj. cm
200	58	57	52
400	97	92	93
600	110	101	108

Analiza wyników zamieszczonych w tablicy 1 pokazuje, że symulacja numeryczna dostarcza nieco wyższych wartości szybkości migracji pionowej, niż obserwowano w rzeczywistości (dla głębokości 0,5 m o około 10% i dla 1 m o kilka procent). Przyczyna może leżeć po stronie metodyki określania umownego położenia frontu migrujących węglowodorów. W wielu publikacjach pokazuje się [np. 4, 7], że przy zastosowanym scenariuszu rozptyłu substancji ropopochodnej w kierunku pionowym, na danej głębokości najpierw pojawiają się węglowodory filtrujące w fazie ciekłej, a dopiero później część z nich odparowuje i miesza się z gazami gruntowymi. Fakt ten prowadziłby do pewnego opóźnienia czasowego rejestrowanej zmiany koncentracji par węglowodorów wybuchowych (wywołanego także przez inne efekty, np. konieczność wcześniejszego odpompowania powietrza z objętości rurki pomiarowej [2, 3]). Drugim powodem rozbieżności może być nieco zaniżony zadany profil wilgotności gruntu, co wiązało się z metodyką poboru próbki rdzenia do analizy. Dodatkowo, zaobserwowane różnice mogą być wynikiem niedokładności lub niedopasowania modelu numerycznego wykorzystanego w symulatorze. Generalnie jednak zgodność wyników jest duża i w wielu sytuacjach mogłaby być uznana za wystarczającą.

5. Wnioski

W pracy dokonano porównania prędkości filtracji pionowej etyliny na podstawie wyników symulacji ogólnodostępnego programu do badania migracji węglowodorów w przypowierzchniowej warstwie gruntu, z otrzymanymi rezultatami eksperymentalnymi. Generalnie, zaobserwowane różnice są niewielkie i maksymalnie sięgają około 10% dla mniejszych głębokości (dla ok. 0,5 m głębokości prędkość filtracji zmierzona wynosi 0,26 cm/s, obliczona 0,29 cm/s). Dla ok. 1 m od powierzchni modelu obie wartości są zgodne w

granicach kilku procent i wynoszą 0,18 cm/s. Oznacza to, że wykorzystany symulator może zostać z powodzeniem użyty do predykcji procesów migracji etyliny w gruntach, dla których przygotowany model laboratoryjny jest reprezentatywny. Dodatkowym walorem użytego symulatora jest stosunkowo prosta jego obsługa.

Praca zrealizowana w ramach umowy nr 15/69/T12/2004/27.

LITERATURA

1. Bear J. et al.: Fundamentals of ground-water modeling, Sprawozdanie z realizacji projektu Agencji Ochrony Środowiska USA nr EPA/540/S-92/005, Oklahoma 1992 (www.epa.gov/ada/).
2. Fąfara Z., Miska W.: Rozpraszanie zanieczyszczeń ropopochodnych w gruncie w świetle badań laboratoryjnych. Zeszyty Naukowe AGH Wiertnictwo Nafta Gaz z. 2, Kraków 2005.
3. Fąfara Z., Rychlicki S.: Wpływ właściwości gruntu na migrację węglowodorów na podstawie badań laboratoryjnych. Zeszyty Naukowe AGH Wiertnictwo Nafta Gaz 5, z. 2, Kraków 2005.
4. Guarnaccia J., Pinder G. et al.: NAPL: simulator documentation, Sprawozdanie z realizacji projektu Agencji Ochrony Środowiska USA nr CR-820499, the University of Vermont, Burlington, 2000 (www.epa.gov/ada/).
5. Newell C. J. et al.: Light nonaqueous phase liquids, Sprawozdanie z realizacji projektu Agencji Ochrony Środowiska USA nr EPA/540/S-95/500, Oklahoma 1995 (www.epa.gov/ada/).
6. Newell C. J. et al.: Calculation and use of first-order rate constants for monitored natural attenuation studies, Sprawozdanie z realizacji projektu Agencji Ochrony Środowiska USA nr EPA/540/S-02/500, Oklahoma 2002 (www.epa.gov/ada/).
7. Pope G. A. et al.: Three-dimensional NAPL fate and transport model, Sprawozdanie z realizacji projektu Agencji Ochrony Środowiska USA nr EPA/600/R-99/011, Austin Texas 1999 (www.epa.gov/ada/).
8. Schuth F. i in.: Handbook of Porous Solids. Wiley-Vch, vol. 4, Weinheim, Niemcy 2002.
9. Weaver J. S.: The hydrocarbon spill screening model (HSSM), Sprawozdanie z realizacji projektu Agencji Ochrony Środowiska USA nr EPA/600/R-94/039, Austin, Texas 1995 (www.epa.gov/ada/).
10. Williams J. R. et al.: Estimation of infiltration rate in the vadose zone: Application of selected mathematical models, Sprawozdanie z realizacji projektu Agencji Ochrony Środowiska USA nr EPA/600/R-97/128b, Oklahoma 1998 (www.epa.gov/ada/).

Recenzent: Dr hab. inż. Marek Pozzi, prof. Politechniki Śl.