INFRASTRUKTURA I EKOLOGIA TERENÓW WIEJSKICH
INFRASTRUCTURE AND ECOLOGY OF RURAL AREAS

Nr 9/2008, POLSKA AKADEMIA NAUK, Oddział w Krakowie, s. 217–226
Komisja Technicznej Infrastruktury Wsi

Wiesław Szulczewski

ZASTOSOWANIE GRANICZNYCH ZAGADNIEŃ ODWROTNYCH DO OKREŚLANIA DOPUSZCZALNYCH STĘŻEŃ SUBSTANCJI CHEMICZNYCH NA POWIERZCHNI TERENU

AN APPLICATION OF THE LIMITED INVERSE PROBLEM FOR DETERMINING THE ADMITTED CHEMICAL SOIL SURFACE CONCENTRATION

Streszczenie

W pracy przedstawiono metodę zastosowania granicznych zagadnień odwrotnych do określania dopuszczalnych stężeń substancji chemicznych na powierzchni terenu. Proces transportu rozpuszczonych w wodzie ośrodka gruntowego zanieczyszczeń opisano równaniem dyspersji hydrodynamicznej. Opracowana metoda pozwala na „odtworzenie" warunku brzegowego realizowanego na powierzchni terenu na podstawie znajomości zmian koncentracji na wybranej głębokości w czasie trwania procesu. Przedstawiono przykład zastosowania tej metody w przypadku, gdy pole uwilgotnienia i przepływu wody jest zmienne w czasie i przestrzeni. Przeprowadzono badania zbieżności opracowanej metody.

Słowa kluczowe: równanie dyspersji hydrodynamicznej, model matematyczny, zagadnienia odwrotne

Summary

The method of application of limited inverse problems to determine admitted chemical concentration on the soil surface is elaborated. The process of transport of pollutants soluble in soil water is described by the hydrodynamic dispersion equation. The method lets for restoring the border condition on the soil surface. This is obtained on the bases of the concentration changes in the selected *depths during the process. The example of method application is presented when the soil moisture and flow rate are spatial and time variable. The converges of the method has been investigated.*

Key words: *hydrodynamic dispersion equation, mathematical model, inverse problems*

WSTĘP

Podstawowym źródłem zanieczyszczenia wód podziemnych przez rolnictwo jest nieumiejętne stosowanie różnego rodzaju środków chemicznych wspomagających produkcję roślinną. Nadmiar tych środków często powoduje wymywanie ich poza strefę w jakiej mają oddziaływać i w konsekwencji do wód podziemnych [Kowalski, Moryl 1990]. Optymalny dobór dawek rozpuszczonych w wodzie substancji chemicznych jest zagadnieniem skomplikowanym, gdyż zależy od wilgotności ośrodka i prędkości przepływu nośnika jakim jest woda. Konieczne jest też uwzględnienie wielu innych procesów, do których można zaliczyć sorpcję rozpatrywanej substancji chemicznej przez ośrodek gruntowy oraz jej pobór przez system korzeniowy roślin. Transportowi zanieczyszczeń chemicznych rozpuszczonych w wodzie ośrodka gruntowego poświęcono już wiele uwagi i badań [Kowalik 2001; Szulczewski 2003]. Opisywany on jest przez równanie dyspersji hydrodynamicznej. Najczęściej model ten jest wykorzystywany do symulacji migracji zanieczyszczeń chemicznych przy znanych warunkach początkowych i brzegowych procesu oraz wcześniej zdefiniowanych parametrach. W tej postaci jego przydatność do określania wielkości np. dawek nawozowych jest ograniczona, gdyż tylko metodą „prób i błędów" można uzyskać odpowiedź na pytanie, jaka maksymalnie może być dawka dostarczona na powierzchnię terenu, aby na wybranej głębokości nie przekroczyła zadanej *a priori* koncentracji. W pracy zostanie podjęta próba rozwiązania tego zadania za pomocą metody granicznych zagadnień odwrotnych. Podstawy teoretyczne tej metody są znane i dla równania ciepła przedstawione w pracy Alifanova i in. [1988]. W analizowanym przypadku proces transportu zanieczyszczeń także opisano równaniem dyspersji hydrodynamicznej, ale metoda granicznych zagadnień odwrotnych pozwala na „odtworzenie" warunku brzegowego na podstawie znajomości zmian koncentracji na wybranej głębokości w czasie jego trwania. W pracy przedstawiony zostanie przykład zastosowania tej metody w przypadku najbardziej skomplikowanym, tzn. gdy pole uwilgotnienia i przepływu wody jest zmienne w czasie i przestrzeni. Przedstawione zostaną wyniki dla zagadnienia z warunkami brzegowymi I rodzaju (Dirichleta), chociaż jest ona na tyle ogólna, że można ją dostosować także do warunków brzegowych II rodzaju.

MODEL MATEMATYCZNY

Proces migracji zanieczyszczeń w strefie aeracji opisano równaniem różniczkowym cząstkowym [Szulczewski 2003]:

$$r\frac{c}{t} \quad \frac{}{z}(\ D_s(\ ,v_w)\frac{c}{z}) \quad q_w\frac{c}{z} \quad Q(c)$$

gdzie:

c – koncentracja zanieczyszczenia [ML^{-3}],
θ – wilgotność objętościowa gruntu [$L^3\ L^{-3}$],
ρ_g – gęstość objętościowa gruntu [ML^{-3}],
$r = \theta + k\rho_g$. k – stała,
D_s – współczynnik dyfuzyjno-dyspersyjny [L^2T^{-1}],
q_w – jednostkowy przepływ wody $q_w = v_w\,\theta$ [LT^{-1}],
Q – funkcja źródłowa (wydajność makroskopowego źródła zanieczyszczenia w jednostce czasu na jednostkę objętości) [$ML^{-3}\ T^{-1}$],
z – zmienna przestrzenna zorientowana zgodnie z działaniem siły ciężkości [L],
t – czas [T],
M,L,T – jednostki masy, długości i czasu.

W równaniu tym współczynnik dyspersji przyjęto w postaci [Maciejewski 1985]:

$$D_s \quad (a \quad b)v_w \quad d$$

gdzie:

a, b, d – stałe.

Na powyższe równanie różniczkowe nałożono odpowiednio warunki początkowe i brzegowe:

$$c(z,0) \quad c_p(z),(0 \quad z \quad L)$$
$$c(0,t) \quad c_g(t),(0 \quad t \quad T)$$
$$c(L,t) \quad c_d(t),(0 \quad t \quad T)$$

gdzie:

$c_p(z)$ – koncentracja zanieczyszczenia na początku procesu [ML^{-3}],
$c_g(t)$ – warunek brzegowy realizowany na powierzchni terenu [ML^{-3}],
$c_d(t)$ – warunek brzegowy realizowany na głębokości $z = L$ [ML^{-3}],
L – miąższość strefy aeracji [L],
T – czas procesu [T].

Przyjęcie powyższych warunków brzegowych zakłada, że na powierzchni terenu znana jest koncentracja zanieczyszczenia chemicznego (funkcja $c_g(t)$). W metodzie granicznych zagadnień odwrotnych funkcję tę można określić poprzez realizację algorytmu, w którym znane są funkcje przejścia, tzn. koncentracji zanieczyszczenia w całym czasie trwania procesu na ustalonych głębokościach. Polega ona na takim doborze warunku brzegowego na powierzchni, aby zminimalizować odległość rozwiązania teoretycznego od empirycznego na tych głębokościach, zgodnie z zadaną funkcją celu. Przez rozwiązanie empiryczne rozumie się w tym przypadku odpowiednio dobrane wartości koncentracji zanieczyszczenia dopuszczalne na wybranych głębokościach. Jeżeli przez Z_k, k = 1,..,N, oznaczymy głębokości, na których są określone funkcje przejścia, gdzie: $0<Z_1<...<Z_N<L$, to jako miarę błędu określenia warunku brzegowego $c_g(t)$ można przyjąć funkcję:

$$F^{(s)}=\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N}\int_0^T (c^{(s)}(Z_k,\tau)-f_k(\tau))^2 d\tau$$

gdzie:

$c^{(s)}(Z_k,\tau)$ – rozwiązanie teoretyczne zagadnienia otrzymane dla warunku brzegowego $c_g^{(s)}(t)$ po s-tej iteracji, s = 1,2,..., .(dla s = 1 warunek brzegowy przyjmuje się *a priori*),

$f_k(\tau)$ – znane funkcje przejścia.

Zagadnienie określenia warunku brzegowego poprzez takie sformułowanie zostało sprowadzone do poszukiwania minimum funkcji $\boldsymbol{F}^{(s)}$ dla ustalonego s. Algorytm wyznaczania tego warunku brzegowego składa się z dwóch etapów dla każdej iteracji, które mają na celu określenie gradientu minimalizowanej funkcji $F^{(s)}$ (tzw. zagadnienie sprzężone) oraz drugie zagadnienie, którego rozwiązanie umożliwia określenie wielkości poprawek, jakie muszą zostać wprowadzone.

Niech

$$A_1=\frac{\theta D_s(\theta,v_w)}{r}\quad,\quad A_2=\frac{1}{r}\left(2\frac{\partial}{\partial z}\left(\theta D_s(\theta,v_w)\right)-q_w\right),$$

$$A_3=\frac{1}{r}\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2}\left(\theta D_s(\theta,v_w)\right)+Q'(c)-\frac{\partial q_w}{\partial z}-\frac{\partial r}{\partial t}\right)$$

Zagadnienie sprzężone do powyższego zagadnienia, po pominięciu nieliniowych składników ma wówczas postać:

$$-\frac{\partial\psi_k}{\partial t}=A_1\frac{\partial^2\psi_k}{\partial z^2}-A_2\frac{\partial\psi_k}{\partial z}+A_3\psi_k$$

$$(z,t)\in X_k=(Z_{k-1},Z_k)\times(0,T],k=1,...N+1,Z_0=0,Z_{N+1}=L$$

$$\psi_k(z,0)=0,\ \ z\in(Z_{k-1},Z_k),\ \ k=1,...,N+1$$

$$\psi_0(0,t)=0,\ \ (0<t\le T)$$

$$\psi_{N+1}(L,t)=0,\ \ (0<t\le T)$$

$$\psi_k(Z_k,t)=\psi_{k+1}(Z_k,t),\ \ (0<t\le T),\ \ k=1,...,N,$$

$$A_1\left(\frac{\partial}{\partial z}\left(\psi_k(Z_k,t)\right)-\frac{\partial}{\partial z}\left(\psi_{k+1}(Z_k,t)\right)\right)=c(Z_k,t)-f_k(t),$$

$$(0<t\le T),\ \ k=1,...,N$$

Warto zwrócić uwagę, że w tym zagadnieniu jedynym czynnikiem, który wpływa na rozwiązanie jest różnica dopasowania, w czasie trwania procesu, pomiędzy rozwiązaniem teoretycznym $c(Z_k,t)$ a krzywą przejścia $f_k(t)$ na głębokościach dokonywania pomiaru Z_k, k = 1,..,N. Rozwiązanie tego zagadnienia umożliwia, dla przyjętego typu warunku brzegowego, wyznaczenie gradientu funkcji $F^{(s)}$:

$$\delta F^{(s)}(t)=\left.\left(A_1(z,t)\frac{\partial\psi_1}{\partial z}\right)\right|_{z=0}$$

W celu oceny wpływu zmiany warunku brzegowego na rozwiązanie konieczne jest sformułowanie i rozwiązanie zagadnienia z niewiadomą ξ powstałego przez pominięcie nieliniowych składników, w których ξ jest przyrostem koncentracji otrzymanym po zmianie warunku brzegowego o $F^{(s)}\ t$:

$$\frac{\partial\xi}{\partial t}=A_1\frac{\partial^2\xi}{\partial z^2}+A_2\frac{\partial\xi}{\partial z}+A_3\xi$$

$$\xi(z,0)=0\ \ \ (0\le z\le T)$$

$$\xi(0,t)=\delta F^{(s)}(t),\ \ (0<t\le T)$$

$$\xi(L,t)=0,\ \ (0<t\le T)$$

Rozwiązanie powyższego zagadnienia umożliwia określenie wielkości poprawki β poszukiwanego warunku brzegowego dla kolejnej (s+1) iteracji. Minimalizując funkcję $F^{(s+1)}$ dla ustalonej iteracji (s+1), którą można zapisać w postaci

$$F^{(s+1)}=\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N}\int_0^T(c^{(s)}(Z_k,\tau)+\beta\xi^{(s)}(Z_k,\tau)-f_k(\tau))^2\,d\tau$$

otrzymujemy równanie liniowe

$$\beta \cdot \sum_{k=1}^{N} \int_0^T \left(\xi^{(s)}(Z_k,\tau)\right)^2 d\tau = -\sum_{k=1}^{N} \int_0^T (c^{(s)}(Z_k,\tau) - f_k(\tau))\xi^{(s)}(Z_k,\tau) d\tau,$$

pozwalające na wyznaczenie wartości β.

Otrzymana wartość β oraz wyznaczony wcześniej przyrost δF umożliwiają wyznaczenie poszukiwanego warunku brzegowego dla (s+1) iteracji za pomocą zależności:

$$c_g(t)^{(s\ \ 1)} \quad c_g(t)^{(s)} \quad\quad F(t)$$

Zbieżność oraz efektywność obliczeniowa przedstawionej metody jest zależna od stopnia komplikacji rozpatrywanego procesu, tzn. jego liniowości, warunków początkowych i brzegowych nakładanych na rozwiązanie zagadnienia dyspersji, wyboru punktów pomiaru koncentracji Z_k umożliwiających określenie funkcji $f_k(t)$. Warto dodać, że dla wyznaczania warunku brzegowego na powierzchni konieczna jest tylko jedna taka funkcja.

PRZYKŁAD OBLICZENIOWY

Przybliżone rozwiązanie równania dyspersji hydrodynamicznej jest tylko wtedy możliwe, gdy znane jest pole prędkości przepływu oraz wartości wilgotności. W przedstawionym przykładzie do wyznaczenia tych wielkości wykorzystano równanie Fokkera-Plancka (dyfuzji) [Szulczewski 1990]:

$$\frac{\quad}{t} \quad \frac{\quad}{z}(D(\quad)\frac{\quad}{z} \quad K(\quad)) \quad G(\quad,z)$$

gdzie:

- $D(\theta)$ – współczynnik dyfuzji [L^{2}T^{-1}],
- $K(\theta)$ – przewodność hydrauliczna [LT^{-1}],
- $G(\theta,z)$ – funkcja odpowiedzialna za pobór wody przez korzenie roślin [T^{-1}].

W tym równaniu przyjęto postać funkcji $D(\theta)$ i $K(\theta)$ zgodnie z propozycją zawartą w pracy Van Genuchtena [1980]:

$$h(\quad) \quad \frac{1}{\quad}((\frac{1}{s})^{\frac{1}{m}} \quad 1)^{\frac{1}{n_g}}, \qquad K(\quad) \quad K_s s \ (1 \quad (1 \quad s^{\frac{1}{m}})^m)^2, \qquad D(\quad) \quad K(\quad)\frac{dh}{d}$$

gdzie:

- h – ciśnienie ssące gleby [L],
- θ_r – wilgotność objętościowa odpowiadająca pF=4,2 [L^3 L^{-3}],
- θ_s – wilgotność pełnego nasycenia [L^3 L^{-3}],

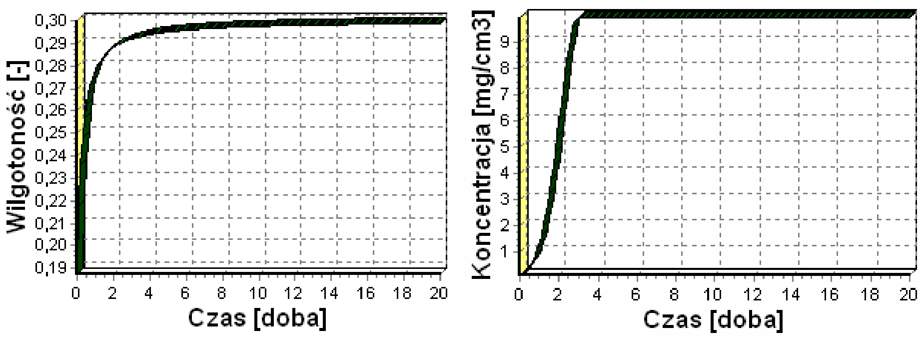
K_s – współczynnik filtracji [L T^{-1}],

$s \quad \frac{\quad_r}{\quad_s \quad \quad_r}, \quad m \quad 1 \quad \frac{1}{n_g}$

n_g, γ, η – stałe, $n_g>1$, $\gamma>0$, $\eta>0$.

W przykładzie realizacji przedstawionej powyżej metody przyjęto (w jednostkach, odpowiednio [cm], [doba], [mg]):

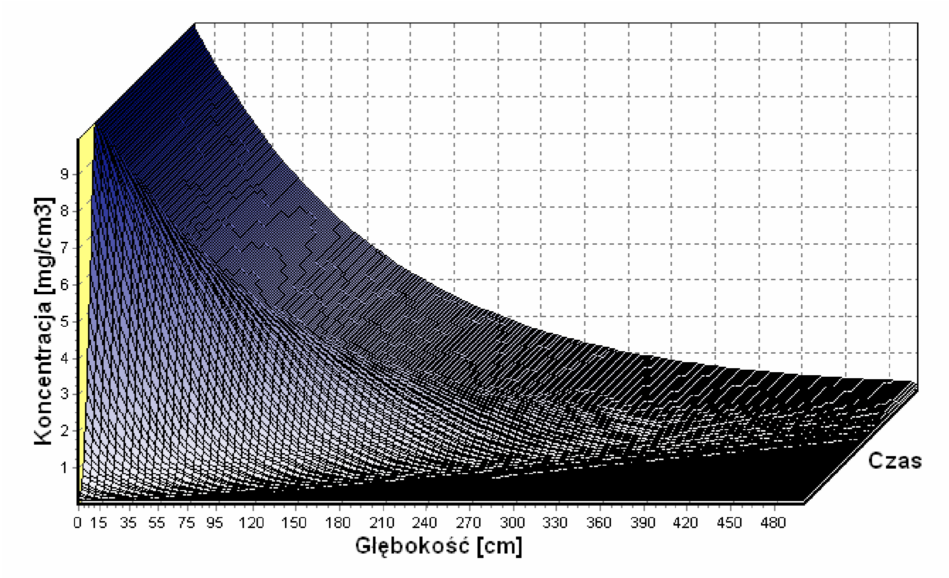
- rozpatrywany obszar i czas procesu: $z\in[0,\ 500,0]$ cm , $t\in[0,\ 20,0]$ doba,
- wartości parametrów charakteryzujących rozpatrywany grunt: θ_r=0,1 [-], θ_s= 0,5 [-], K_s= 150,0 [cm doba^{-1}], γ = 0,001 [cm^{-1}], n_g = 5,0 [-], η = 0,5 [-], ρ_g= 1,75 [g cm^{-3}],
- parametry charakteryzujące współczynnik dyspersji: a = 0,2 [-], b = 0,1 [-], d = 0,14 [cm^{2}doba^{-1}],
- rozpatrywano liniowy proces adsorpcji S = $k\ c$, gdzie przyjęto k = 0,01;
- przyjęto stałą ujemną funkcję źródłowa Q = –0,1;
- warunki początkowe, jakie nałożono na rozwiązanie równań dyfuzji i dyspersji hydrodynamicznej nie zależały od z,
- warunki brzegowe realizowane na powierzchni terenu dla równania dyfuzji i dyspersji przedstawiono odpowiednio na rysunku 1a i 1b.



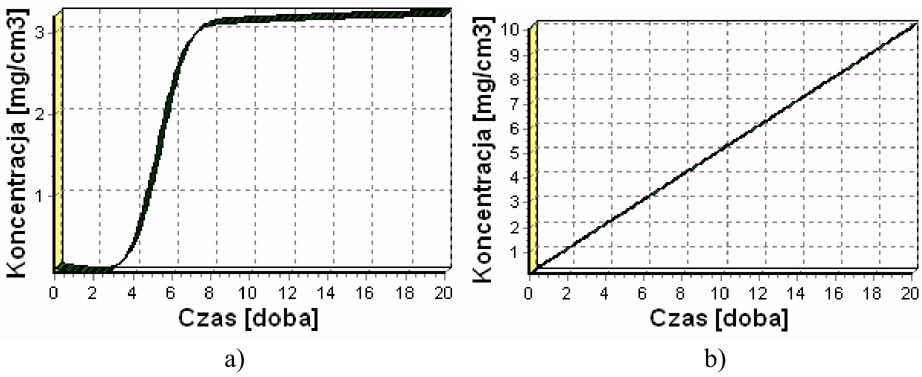
a) b)

Rysunek 1. Warunki brzegowe realizowane na powierzchni terenu $t\in(0,20]$:
a) wilgotność objętościowa [-]; b) koncentracja zanieczyszczenia c_g [mg cm^{-3}]

Przybliżone rozwiązanie tak postawionego zagadnienia migracji zanieczyszczeń chemicznych przedstawiono na rysunku 2. Posłużyło ono do sprawdzenia opisanej wyżej metody wyznaczania warunku brzegowego na podstawie znanego rozkładu koncentracji substancji chemicznej na wybranej głębokości. W tym celu jako funkcję przejścia $f_k(t)$ przyjęto koncentrację $c(150,t)$ z przybliżonego rozwiązania (rys. 3a). Dodatkowo jako warunek brzegowy przyjęto *a priori* (iteracja s = 0), liniową zależność koncentracji od czasu (rys 3b).

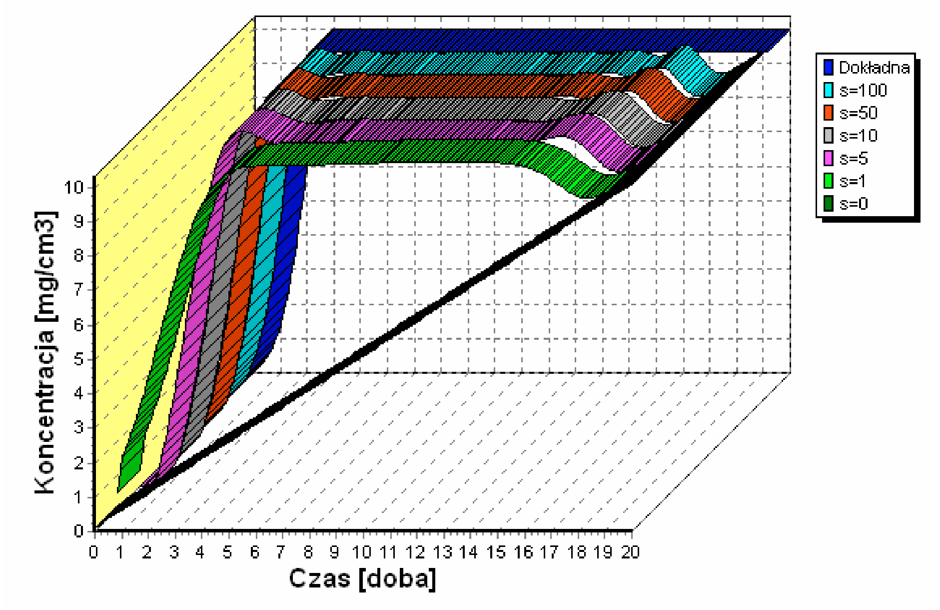


Rysunek 2. Rozwiązanie równania dyspersji hydrodynamicznej



Rysunek 3. a) Krzywa przejścia $f_k(t) = c(150,t)$ [mg cm^{-3}]; b) Warunek brzegowy realizowany na powierzchni terenu dla iteracji s = 0, $c_g^{[0]}$ [mg cm^{-3}]

Wyniki aproksymacji warunku brzegowego otrzymanego w trakcie realizacji algorytmu granicznego zagadnienia odwrotnego przedstawiono na rysunku 4 po kilku wybranych iteracjach (s = 1, s = 5, s = 10,s = 50, s = 100).



Rysunek 4. Wyniki aproksymacji warunku brzegowego równania dyspersji hydrodynamicznej

WNIOSKI

Przedstawiona w pracy metoda wyznaczania warunku brzegowego na podstawie znajomości zmian koncentracji na wybranej głębokości w czasie trwania procesu jest dość skomplikowana, jednak w przypadku dysponowania skutecznymi algorytmami rozwiązywania zagadnień różniczkowych typu parabolicznego trudności są do pokonania. Przeprowadzone eksperymenty numeryczne, z których jeden tylko przykład zamieszczono w pracy pozwalają na sformułowanie kilku wniosków:

1. Efektywność metody jest stosunkowo wysoka, gdyż już po kilku iteracjach dopasowanie warunku brzegowego „dokładnego" i aproksymowanego jest znaczące (rys. 4).
2. Metoda nie jest niestety globalnie zbieżna i do jej szerszego stosowania wymaga dalszych badań.
3. Opracowana metoda jest szczególnie wrażliwa na staranne opracowanie algorytmów pozwalających na otrzymywanie (z małym błędem) przybliżonych rozwiązań występujących w niej zagadnień różniczkowych.
4. Przedstawiony przykład zagadnienia odwrotnego dotyczył warunku brzegowego I rodzaju (Dirichleta), jednak stosunkowo łatwo można ją dostosować także do warunków brzegowych II rodzaju.

BIBLIOGRAFIA

Алифанов О. М., Артюхин Е. А., Румянцев С. В. *Экстремальные методы решения некорректных задач.* НАУКА, Москва 1988.

Kowalik P. *Ochrona środowiska glebowego.* Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2001.

Kowalski J., Moryl A. *Metodyka i wstępne wyniki badań wpływu nawożenia mineralnego na zanieczyszczenie wód gruntowych.* Zesz. Nauk. AR we Wrocławiu. Melioracja 34. Nr 189, 1990.

Maciejewski St. *Migracja zanieczyszczeń drogą dyspersji hydrodynamicznej w strefie niepełnego nasycenia jednorodnego ośrodka gruntowego.* Praca doktorska. Inst. Bud. Wod. PAN, Gdańsk 1985.

Szulczewski W. *Modelowanie zmian uwilgotnienia gleby w strefie niepełnego nasycenia.* Zesz. Nauk. AR we Wrocławiu. Melioracja 36. Nr 192, 1990, s. 87–98.

Szulczewski W. *Modelowanie migracji zanieczyszczeń w nienasyconych gruntach i glebach.* Zesz. Nauk. AR we Wrocławiu. Rozprawy CCI. Nr 466, 2003.

Van Genuchten M.Th. *A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils.* Soil Sci.Am.J. vol. 44, s. 892–898, 1980.

Wiesław Szulczewski
Katedra Matematyki
Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu
Ul. Grunwaldzka 53, 50-357 Wrocław
e-mail: wieslaw.szulczewski@up.wroc.pl

Recenzent: *Prof. dr hab. Jerzy Kowalski*