

Mieczysław Chalfen

**WPLYW NIEDOKŁADNOŚCI WYZNACZENIA
STAŁYCH DYSPERSJI HYDRODYNAMICZNEJ
NA PRZESTRZENNO-CZASOWY ROZKŁAD
ZANIECZYSZCZEŃ W OŚRODKU GRUNTOWYM**

***AN INFLUENCE OF MEASUREMENT INACCURACY
OF DISPERSION COEFFICIENTS ON TIME-SPACE
POLLUTANT DISTRIBUTION IN GROUNDWATER***

Streszczenie

W pracy zbadano wpływ niedokładności oszacowania stałych dyspersji podłużnej i poprzecznej na dokładność rozwiązań równania dyspersji hydrodynamicznej, będącego podstawą matematycznego modelowania przepływu zanieczyszczeń chemicznych w ośrodku gruntowo-wodnym. Wykorzystano analityczne rozwiązania równania dyspersji dla źródła punktowego, chwilowego lub stałego w czasie. Niedokładności oszacowania stałych dyspersji opisano rozkładem normalnym zadaną wartością średnią i wariancją. Na podstawie wielowariantowych symulacji przy różnych wartościach stałych dyspersji wykazano, że przestrzenno-czasowy rozkład koncentracji zanieczyszczeń istotnie zależy od dokładnego określenia parametrów równania dyspersji. Największe wartości współczynnika zmienności obliczonych koncentracji zanieczyszczeń, będącego miarą błędu symulacji, występują na krańcach obszaru skażonego. Są to obszary, w których istnieje największe ryzyko błędnych obliczeń symulacyjnych. Przedstawiono także zależność średniego współczynnika zmienności uzyskanych wyników od założonego współczynnika zmienności stałych dyspersji. Wykazano, że współczynnik zmienności nie rośnie z czasem symulacji komputerowych, co oznacza stabilność modelu migracji zanieczyszczeń.

Słowa kluczowe: dyspersja zanieczyszczeń, wody gruntowe, rozkład normalny

Summary

In the article an influence of measurement inaccuracy of longitudinal and transverse dispersivity coefficients on solutions of dispersion equation, which is a basis of mathematical model of pollutant movement in groundwater, was investigated. Analytical solutions of dispersion equation for temporary or constant point source of pollution were used. Inaccuracy of dispersivity coefficients was described by normal distribution. Multivariable computations for various values of dispersivity coefficients enable to notice that time-space distribution of pollutant concentration depends on parameters of dispersion equation. Maximum coefficients of variation of computed concentrations are situated near boundary of contaminated region. These are regions of maximum risk of incorrect result of computations. Area average coefficient of variation for constant and temporary source of pollution is non increasing time function. Its denote stability of mathematical model for pollutant movements in groundwater.

Key words: pollutant movement, groundwater, normal distribution

WSTĘP

Modelowanie matematyczne stało się w ostatnich latach podstawowym narzędziem pracy hydrogeologa, ekologa, specjalisty gospodarki wodnej i ochrony środowiska. W powszechnym użyciu są programy komputerowe prognozujące przepływ wód i zanieczyszczeń, także w ośrodku gruntowym. Należy jednak pamiętać, że wyniki komputerowych symulacji zależą w istotny sposób od parametrów opisujących rzeczywisty obiekt czy proces. Podstawą matematycznego modelowania procesu migracji zanieczyszczeń chemicznych w wodach podziemnych jest równanie dyspersji hydrodynamicznej [Bear, Verruijt 1990, Fetter 1993], w którym stałe dyspersji podłużnej i poprzecznej charakteryzują własności dyspersyjne ośrodka gruntowego. Są to stałe trudne do empirycznego wyznaczenia i równocześnie mające istotny wpływ na rezultaty modelowania [Chalfen 2010, Fetter 1993]. W praktyce najczęściej szacuje się wartości tych stałych poprzez tarowanie modelu z wykorzystaniem pomiarów stężeń wybranej substancji chemicznej w wodach gruntowych pobranych w różnych punktach obszaru filtracji w pobliżu źródła iniekcji substancji do wód [Chalfen 2010]. Często też analizując proces migracji zanieczyszczeń dostających się do wód gruntowych wykonuje się obliczenia modelowe dla szerokiego zakresu zmienności parametrów dyspersyjnych. W literaturze podaje się często stałe dyspersji różniące się o rząd wielkości [Fetter 1993] wymieniając kilka przyczyn tak szerokiego zakresu zmienności tych stałych dla podobnych gruntów. Z jednej strony jest to zjawisko mikrodyspersji, czyli lokalnego zróżnicowania kierunków i wielkości wektorów przepływu wody wywołanych skomplikowaną przestrzenną geometrią kanalików przestrzeni porowej. Z drugiej strony makrodyspersja powodowana niejednorodnością ośrodka porowatego w skali makro. Do tego

dochodzi zależność stałych dyspersji od rozmiarów rozpatrywanego modelu, zwana w literaturze przedmiotu „problemem skali”. Nakładanie się kilku przyczyn powoduje, że wprowadzane do modelu obliczeniowego wartości stałych dyspersji są obarczone trudnym do oszacowania błędem. Głównym celem pracy jest zbadanie, jak niedokładność wyznaczenia parametrów dyspersji wpływa na obliczony przestrzenno-czasowy rozkład zanieczyszczeń przy punktowym źródle iniekcji. Badania przeprowadzono na dwuwymiarowym, niestacjonarnym modelu płaskim w planie z wykorzystaniem szczególnych rozwiązań analitycznych dla jednorodnego pola przepływu wody [Chalfen 1990, Fetter 1993, Rembeza 1998, Palarski i in. 2002]. W pracy zastosowano autorski model przepływu wód i zanieczyszczeń chemicznych i program komputerowy FIZ [Chalfen 2003]. Do opisu zmienności trudnych do dokładnego określenia stałych dyspersji hydrodynamicznej zastosowano rozkład normalny z zadaną średnią i zmienną wariancją.

MODEL MATEMATYCZNY

Podstawą płaskiego w planie w układzie zmiennych X-Y modelu matematycznego migracji zanieczyszczeń rozpuszczonych w wodzie w strefie pełnego nasycenia jest równanie dyspersji hydrodynamicznej [Bear, Verruijt 1987, Fetter 1993]

$$(1 + \beta) \frac{\partial c}{\partial t} = \text{div}(D \text{grad}(c)) - \vec{v} \text{grad}(c) + Q \quad (1)$$

gdzie:

$c(x,y,t)$ – koncentracja substancji w punkcie (x,y) w chwili t [$\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$]

β – współczynnik adsorpcji [-],

$D = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{bmatrix}$ tensor dyspersji o składowych

$$D_{xx} = \alpha_L \frac{v_x^2}{v} + \alpha_T \frac{v_y^2}{v} + D_m$$

$$D_{yy} = \alpha_T \frac{v_x^2}{v} + \alpha_L \frac{v_y^2}{v} + D_m$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_y}{v}$$

α_L – stała dyspersji podłużnej [m],

α_T – stała dyspersji poprzecznej [m],

D_m – współczynnik dyfuzji molekularnej [$\text{m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$],

\vec{v} – wektor przyływu wód gruntowych,

- v – długość wektora prędkości [$\text{m}\cdot\text{d}^{-1}$],
 v_x, v_y – składowe wektora prędkości przepływu wody gruntowej [$\text{m}\cdot\text{d}^{-1}$],
 Q – funkcja źródłowa [$\text{g}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{d}^{-1}$].

W warunkach rzeczywistego pola filtracji stałe dyspersji α_L i α_T mogą być, ze względu na niejednorodność ośrodka gruntowego, zmienne w przestrzeni. W praktyce inżynierskiej przyjmuje się jednak, że w zasięgu oddziaływania źródła iniekcji ośrodek gruntowy jest ze względu na własności dyspersyjne jednorodny i takie też założenie przyjęto w pracy. Dodatkowo założono, że w otoczeniu punktu iniekcji substancji chemicznej do wód gruntowych, pole przepływu wód gruntowych ma charakter jednorodny, co pozwala wykorzystać w dalszych badaniach znane rozwiązania analityczne równania (1) [Fetter 1993]:

- dla źródła stałego w czasie:

$$c(x, y, t) = \frac{M}{4n_f m v \sqrt{\pi \alpha_T \gamma}} \exp\left(\frac{x - r\gamma}{2\alpha_L}\right) \frac{1}{\sqrt{r}} \operatorname{erfc}\left(\frac{r - \frac{v}{R_d} t \gamma}{\sqrt{4\alpha_L \frac{v}{R_d} t}}\right) \quad (2)$$

- dla źródła chwilowego:

$$c(x, y, t) = \frac{\dot{M}}{4\pi n_f m v \sqrt{\alpha_L \alpha_T t}} \exp\left(-\frac{(x - \frac{v}{R_d} t)^2}{4\alpha_L \frac{v}{R_d} t} - \frac{y^2}{4\alpha_T \frac{v}{R_d} t}\right) \exp(-\lambda t) \quad (3)$$

gdzie:

- M – ładunek całkowity dla źródła chwilowego [g],
 \dot{M} – natężenie dopływu substancji dla źródła stałego w czasie [$\text{g}\cdot\text{d}^{-1}$],
 n_f – odsączalność [-],
 m – miąższość warstwy wodonośnej [m],
 v – rzeczywista prędkość filtracji [$\text{m}\cdot\text{d}^{-1}$],
 $R_d = 1 + \beta$ – współczynnik opóźnienia [-],
 λ – stała rozpadu dla substancji promieniotwórczej [d^{-1}],
 $\gamma = \sqrt{1 + 4\alpha_L \lambda R_d / v}$,
 $r = \sqrt{x^2 + y^2 \frac{\alpha_L}{\alpha_T}}$.

STAŁE DYSPERSJI

Jak już wspomniano we wstępie, jednym ze sposobów ograniczenia ryzyka wykonania błędnych obliczeń modelowych migracji zanieczyszczeń w wodach podziemnych, spowodowanych niedokładnym oszacowaniem stałych dyspersji, jest wykonanie symulacji komputerowych dla szerokiego zakresu omawianych stałych i następnie wykonanie statystycznej analizy otrzymanych rezultatów obliczeń. W pracy zakłada się, że stała dyspersji podłużnej α_L oraz stała dyspersji poprzecznej α_T są zmiennymi losowymi ze średnimi $\bar{\alpha}_L$ i $\bar{\alpha}_T$ oraz odchyleniami standardowymi σ_L i σ_T i przyjmują wartości z zakresu

$$\alpha_L \in (\bar{\alpha}_L - 3\sigma_L, \bar{\alpha}_L + 3\sigma_L) \quad (4a)$$

$$\alpha_T \in (\bar{\alpha}_T - 3\sigma_T, \bar{\alpha}_T + 3\sigma_T) \quad (4b)$$

Średnie $\bar{\alpha}_L$ i $\bar{\alpha}_T$ odpowiadają wartościom stałych dyspersji podawanych w literaturze dla wybranych rodzajów gruntów, odchylenia standardowe σ_L i σ_T opisują stopień niepewności, na ile wartości podane w literaturze są dokładnym odzwierciedleniem rzeczywistych, nieznanych przecież wartości stałych dyspersji. Małe wartości odchylenia oznaczają, że wartości średnie dobrze opisują rzeczywiste wartości stałych dyspersji, duże wartości odchylenia sugerują, że literaturowe wartości średnich mogą znacznie różnić się od wartości rzeczywistych. W dalszej części pracy założono, że α_L oraz α_T określone wzorami (4a)-(4b) mają rozkład normalny ze średnimi i odchyleniami jak wyżej. Dla każdego z rozpatrywanych w dalszej części pracy zagadnień wykonano $n=100$ losowań stałych α_L i α_T , tak by prawdopodobieństwo p_i wylosowania α_i było zdefiniowane wzorem

$$p_i = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\alpha_i - \bar{\alpha})^2}{2\sigma^2}\right) \quad (5)$$

Losowania według wzoru (5) dokonano oddzielnie dla stałej dyspersji α_L i oddzielnie dla α_T . W tab.1. podano dla przykładu wartości niektórych prawdopodobieństw p_i dla średniej wartości stałej dyspersji podłużnej $\bar{\alpha}_L = 20$ m dla dwóch wartości odchylenia $\sigma_L = 2$ oraz $\sigma_L = 5$.

Oznacza to, że przy statystycznej analizie wyników symulacji, rezultaty uzyskane dla wartości stałych dyspersji „bliżej” średnich będą miały większe znaczenie, niż mniej prawdopodobne wartości na krańcach przedziałów określoności. Dla mniejszych wartości odchylenia prawdopodobieństwa są „skupione” wokół średniej, a z kolei przy większych wartościach odchylenia następuje więk-

sze „rozmycie” prawdopodobieństw wylosowania poszczególnych wartości stałych dyspersji.

Tabela 1. Prawdopodobieństwa obliczone według wzoru (5)
Table 1. Probabilities calculated according to formula (5)

α_L [m]	$\sigma_L = 2$	$\sigma_L = 5$
5	-	0,0008
10	-	0,0108
15	0,0087	0,0484
20	0,1995	0,0798
25	0,0087	0,0484
30	-	0,0108
35	-	0,0008

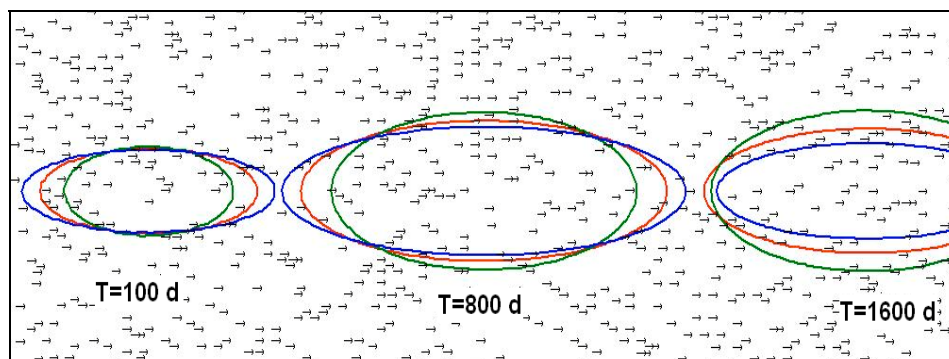
Źródło własne; own source.

OBLICZENIA MODELOWE

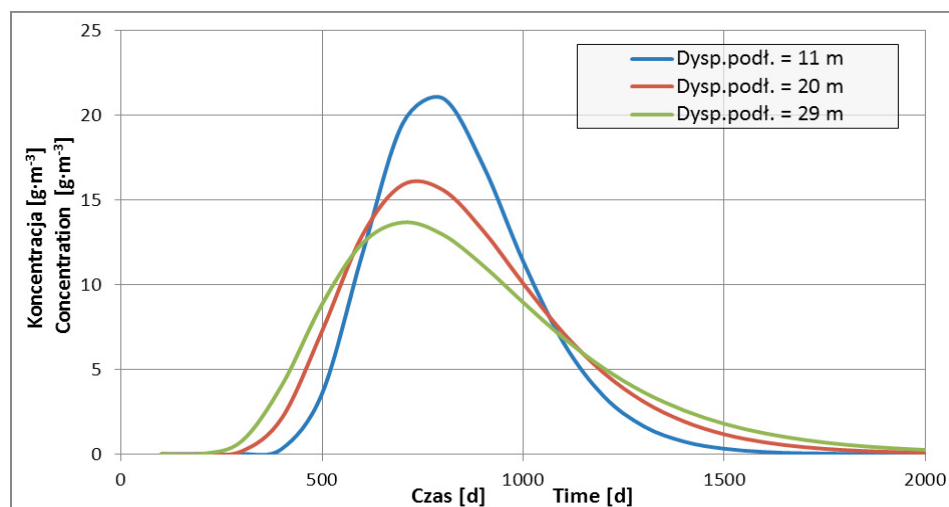
Obliczenia symulacyjne wykonano na dwuwymiarowym modelu płaskim w planie dla punktowego, chwilowego lub stałego źródła zanieczyszczeń. Stałe dyspersji zmieniano według wzorów (4a-4b). Przy zmiennej wartości stałej dyspersji podłużnej założono, że stała dyspersji poprzecznej $\alpha_T = 2$ [m], przy zmiennej dyspersji poprzecznej przyjęto, że $\alpha_L = 20$ [m]. Dla źródła chwilowego przyjęto całkowity ładunek $M = 10^6$ [g], dla źródła stałego w czasie natężenie dopływu $\dot{M} = 10^3$ [g·d⁻¹]. Założono miąższość warstwy wodonośnej $m = 10$ [m], odsączalność $n_f = 0,2$, prędkość filtracji $v = 0,1$ [m·d⁻¹], stała rozpadu $\lambda = 0$ [d⁻¹]. W ten sposób w każdym punkcie obszaru filtracji, dla wybranych chwil czasowych, otrzymano 100 wyników – koncentracji zanieczyszczeń zależnych od stałej podłużnej i podobnie dla dyspersji poprzecznej. Wyniki te były podstawą dla statystycznej analizy wpływu stałych dyspersji na przestrzenno - czasowy rozkład zanieczyszczeń. Na rys. 1. pokazano przykładowe linie jednakowych stężeń $c = 5$ [g·m⁻³] dla źródła chwilowego w kilku wybranych chwilach dla minimalnej (linia zielona), średniej (linia czerwona) i maksymalnej (linia niebieska) wartości stałej dyspersji podłużnej. Przy odchyleniu standardowym $\sigma_L = 3$ były to wartości $\alpha_L = 11, 20, 29$ m.

Na rys. 2. pokazano „krzywe przejścia”, tzn. wykresy zmienności w czasie koncentracji przy chwilowym źródle iniekcji w wybranym punkcie obszaru filtracji dla kilku wartości stałej dyspersji podłużnej $\alpha_L = 11, 20, 29$ m. Na rys. 3. pokazano zależność obliczonych koncentracji od stałej dyspersji podłużnej w wybranym punkcie w kilku przedziałach czasowych. Wykresy te pokazują istotny wpływ stałej dyspersji podłużnej α_L na uzyskane rezultaty, przy czym porównano tylko wpływ skrajnych wartości α_L na tle wartości średnich, przy

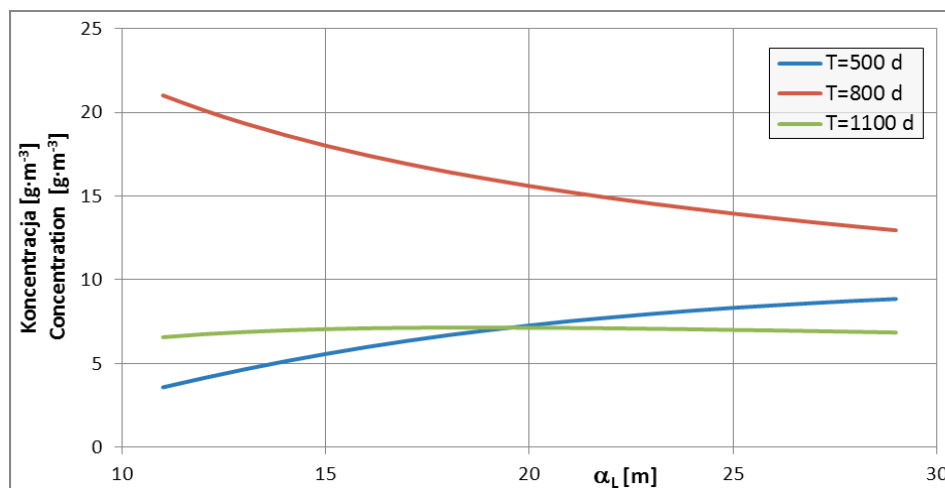
założeniu, że wszystkie wartości α_L są jednakowo prawdopodobne. Podobnie można wykazać, że także stała dyspersji poprzecznej α_T istotnie wpływa na obliczone koncentracje zanieczyszczeń w wodach podziemnych.



Rysunek 1. Przestrzenny rozkład zanieczyszczeń (T – czas)
Figure 1. Space distribution of pollutant (T – time)



Rysunek 2. Krzywe przejścia dla różnych stałych dyspersji podłużnej
Figure 2. Time concentration for different values of longitudinal dispersivity



Rysunek 3. Zależność koncentracji od stałej dyspersji podłużnej
Figure 3. Concentration as a function of longitudinal dispersivity

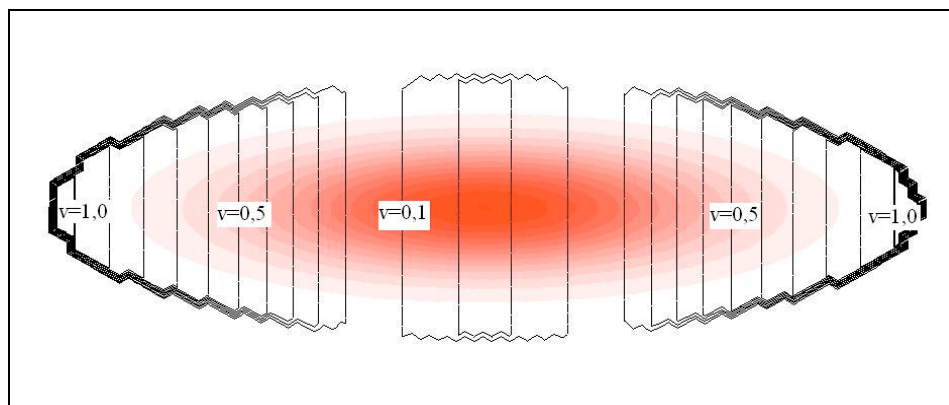
STATYSTYCZNA ANALIZA WYNIKÓW

W dalszej części pracy przyjęto, że zmienność parametrów wejściowych do modelu oraz zmienność uzyskiwanych wyników opisuje się współczynnikiem zmienności określonym jako iloraz odchylenia standardowego σ do średniej μ zmiennej losowej [Aczel 2000]

$$V = \frac{\sigma}{\mu} \quad (6)$$

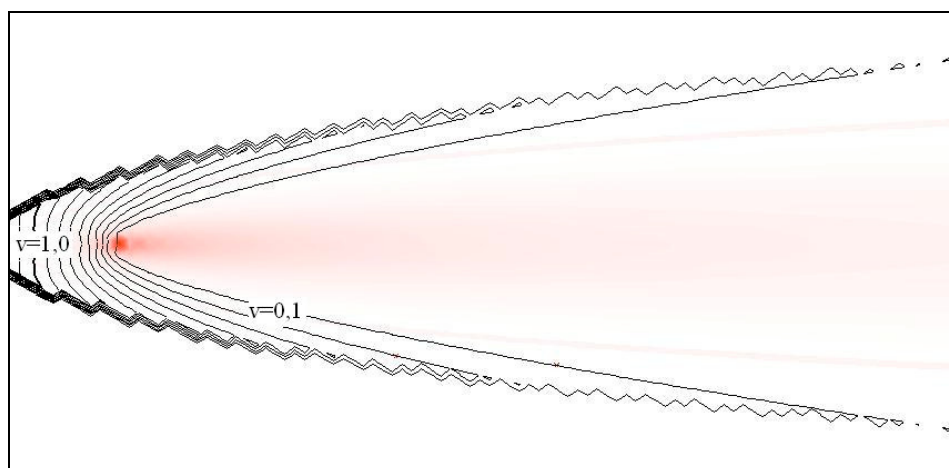
Jest to lepsza miara zmienności niż wariancja σ^2 szczególnie wtedy, gdy wartości zmiennej losowej (w pracy są to obliczane stężenia substancji w różnych punktach obszaru filtracji) maleją do zera. Wówczas wariancja σ^2 maleje do zera niezależnie od rozkładu zmiennej losowej stwarzając mylne wrażenie, że zmienna losowa koncentruje się wokół średniej. W artykule zbadano, jak współczynnik zmienności wprowadzanych do modelu stałych dyspersji α_L wpływa na współczynnik zmienności uzyskanych wyników, tzn. obliczonych koncentracji w każdym punkcie obszaru filtracji. Przy analizie wpływu stałej dyspersji podłużnej α_L przeprowadzono symulacje komputerowe dla współczynnika zmienności $V=0,05; 0,10; 0,15; 0,20$ oraz $0,25$, co przy średniej wartości stałej dyspersji podłużnej $\bar{\alpha}_L = 20$ m odpowiada odchyleniom standardowym σ_L zmieniającym się od 1 do 5. Dla średniej wartości dyspersji poprzecznej $\bar{\alpha}_T = 2$ m wykonano obliczenia dla odchylenia σ_T zmieniającego się w granicach od 0,1

do 0,5. Na rys.4. pokazano wykres współczynnika zmienności (linie czarne) na tle plamy zanieczyszczeń (kolor czerwony) dla źródła chwilowego po 1000 dniach symulacji, na rys.5 dla źródła stałego w czasie po ustaleniu się procesu rozprzestrzeniania zanieczyszczeń.



Rysunek 4. Współczynnik zmienności przy zmiennej dyspersji podłużnej dla źródła chwilowego

Figure 4. Coefficient of variation for variable value of longitudinal dispersivity for temporary source

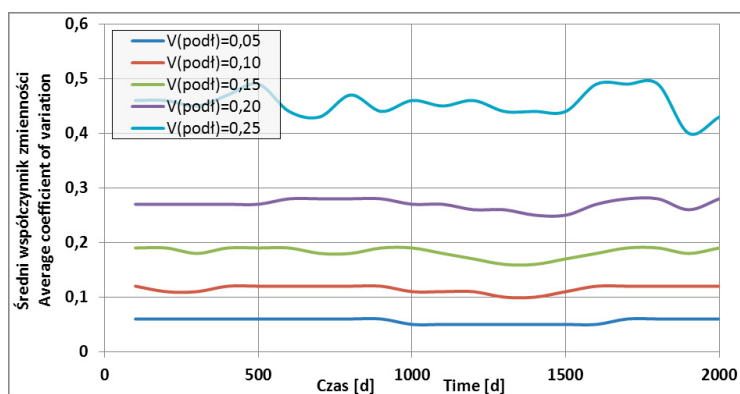


Rysunek 5. Współczynnik zmienności dla dyspersji podłużnej i źródła stałego w czasie

Figure 5. Coefficient of variation for variable value of longitudinal dispersivity for constant source

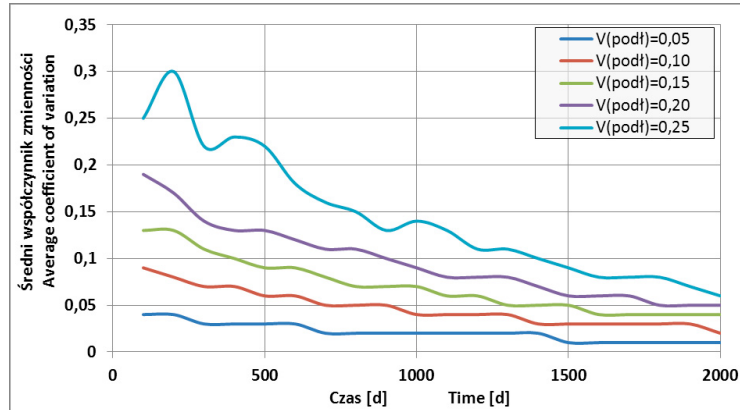
Dla źródła chwilowego współczynnik zmienności V przyjmuje największe wartości na granicach frontu skażenia. Są to rejony, w których istnieje największe ryzyko błędnych obliczeń przy niedokładnym oszacowaniu stałej dyspersji podłużnej α_L . W rejonie największych koncentracji zanieczyszczeń współczynnik zmienności nie przekracza wartości 0,2, co oznacza niewielką wrażliwość obliczanych maksymalnych stężeń na dane wejściowe. W przypadku źródła stałego w czasie największe wartości współczynnika zmienności obserwujemy na granicy frontu skażenia oraz „za” źródłem. W części centralnej „plamy” zanieczyszczeń współczynnik zmienności V nie przekracza wartości 0,1. Niemal identyczne wykresy uzyskano przy analizie wpływu stałej dyspersji poprzecznej α_T na stabilność modelu. We wszystkich wariantach symulacji najczulszymi obszarami są rejony frontu skażenia, co ma to istotne znaczenie przy wykorzystaniu modelu matematycznego do wyznaczania granic obszaru skażonego.

Z kolei wykresy 6a – 6d. pokazują zależność średniej obszarowej wartości współczynnika zmienności obliczonych koncentracji jako funkcji założonego współczynnika zmienności V stałych dyspersji podłużnej i poprzecznej dla źródła chwilowego i stałego w czasie. We wszystkich wariantach obliczeniowych (z wyjątkiem wariantu 6b) średni współczynnik zmienności obliczonych koncentracji nie rośnie w czasie, ale jest większy od współczynnika zmienności stałych dyspersji wprowadzanych do modelu, szczególnie przy większych wartościach V . Oznacza to względną stabilność modelu, w którym błędy nie rosną wraz z czasem symulacji. W wariantach obliczeniowych 6b) dla źródła stałego w czasie i dla stałej dyspersji podłużnej współczynnik zmienności maleje z czasem, co jest spowodowane malejącym z czasem wpływem stałej dyspersji podłużnej na przestrzenno - czasowy rozkład koncentracji [Chalfen 2010].

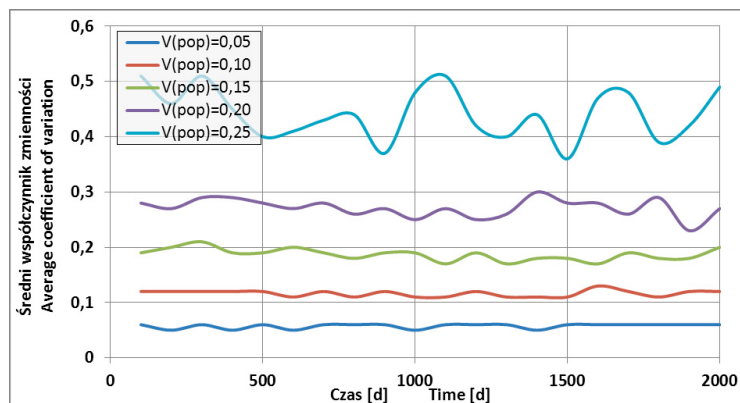


Rysunek 6a. Średni współczynnik zmienności jako funkcja współczynnika zmienności stałej dyspersji podłużnej dla chwilowego źródła iniekcji

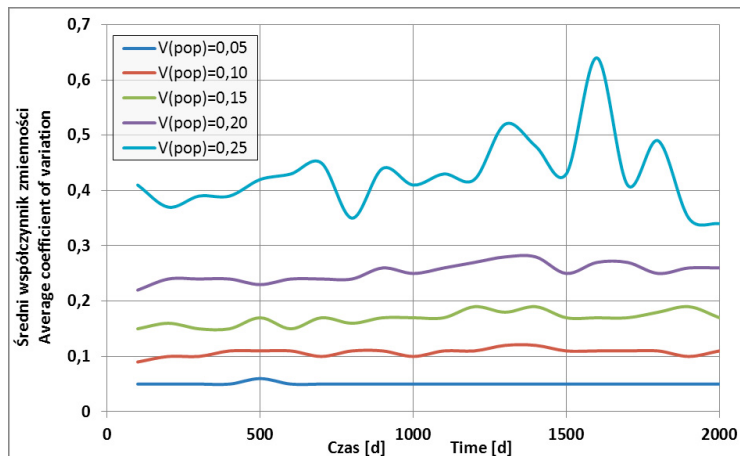
Figure 6a. Average coefficient of variation for variable value of longitudinal dispersivity for temporary source of pollution



Rysunek 6b. Średni współczynnik zmienności jako funkcja współczynnika zmienności stałej dyspersji podłużnej dla źródła iniekcji stałego w czasie
Figure 6b. Average coefficient of variation for variable value of longitudinal dispersivity for constant source of pollution



Rysunek 6c. Średni współczynnik zmienności jako funkcja współczynnika zmienności stałej dyspersji poprzecznej dla chwilowego źródła iniekcji
Figure 6c. Average coefficient of variation for variable value of transverse dispersivity for temporary source of pollution



Rysunek 6d. Średni współczynnik zmienności jako funkcja współczynnika zmienności stałej dyspersji poprzecznej dla źródła stałego w czasie

Figure 6d. Average coefficient of variation for variable value of transverse dispersivity for constant source of pollution

WNIOSKI

1. Wyniki symulacji komputerowych rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń chemicznych w wodach podziemnych zależą w istotny sposób od wartości stałych dyspersji podłużnej i poprzecznej wprowadzanych do matematycznego modelu.

2. Obszary najbardziej wrażliwe na ryzyko błędnych obliczeń przy stałym bądź chwilowym źródle iniekcji substancji zanieczyszczającej położone są na granicy frontu skażenia. Ma to istotne znaczenie przy zastosowaniu modelu matematycznego do wyznaczania granic obszaru skażonego wokół źródła iniekcji.

3. Średni obszarowy współczynnik zmienności obliczanych koncentracji jest większy niż współczynnik zmienności wprowadzanych do modelu danych, jednak nie rośnie on w czasie symulacji, co oznacza stabilność modelu.

4. Dokładność i wiarygodność obliczeń symulacyjnych w istotny sposób zależy od dokładnego określenia stałych dyspersji hydrodynamicznej.

BIBLIOGRAFIA

- Aczel A. D., 2000, *Statystyka w zarządzaniu*, PWN, Warszawa, ss.1000,
Bear J., Verruijt A., *Modeling Groundwater flow and pollution*, Reidel Publ. Comp, 1990, ss.414,
Chalfen M., *O pewnej transformacji równania dyspersji hydrodynamicznej*, Arch. Hydr. tom XXXVII, z. 1-2, 1990, str.149-156,

- Chalfen M., *Opis programu FIZ – Filtracja i Zanieczyszczenia, XXXIII Seminarium Zastosowań Matematyki*, Kobyła Góra, 2003 r, s.37-40,
- Chalfen M., *Metody identyfikacji stałych dyspersji hydrodynamicznej w zagadnieniach migracji zanieczyszczeń w strefie saturacji*, Zeszyty Problemowe Postępów Nauk Rolniczych, 2010, zeszyt 548, str. 113-122,
- Fetter C.W., *Contaminant Hydrogeology*, Prentice-Hall Inc, 1993, ss.458,
- Palarski J., Plewa R., Babczyński W., *Modelowanie migracji zanieczyszczeń z podziemnych składowisk odpadów*, Wyd. Politechniki Śląskiej, Gliwice 2002, ss. 165,
- Rembeza L., *Przepływ wody i zanieczyszczeń w gruncie*, Wyd. Akademii Rolniczej w Poznaniu, 1998, ss.253,

Dr Mieczysław Chalfen
Katedra Matematyki
Uniwersytet Przyrodniczy
ul. Grunwaldzka 53
50-357 Wrocław
e-mail: mieczyslaw.chalfen@up.wroc.pl

