RNDr. TIBOR KOVÁCS

NuSi, s.r.o.
Svätoplukova 5
Bratislava

www.nusi.sk, nusi@nusi.sk

Porovnanie metód výpočtu rizika šírenia sa znečistenia v podzemných vodách

Analýza rizika znečisteného územia

Obsah

- Stručný prehľad metód výpočtu transportu kontaminácie podzemnou vodou
- Porovnanie výsledkov metód na konkrétnych príkladoch homogénneho izotropného prostredia s neporušeným prúdením podzemnej vody
  - dotácia znečistenia z priesakov
  - dotácia znečistenia vymývaním znečistenej zeminy
- Problémy analytického riešenia a numerických modelov
- Problémy krokovej metódy

PRÚDENIE PODZEMNEJ VODY

- Rovnica prúdenia podzemnej vody

Neustálené prúdenie v heterogénnom anizotrópnom prostredí

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(K_x \frac{\partial h}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K_y \frac{\partial h}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z \frac{\partial h}{\partial z}\right) = S_s \frac{\partial h}{\partial t} - R$$

kde: K je tenzor koeficientu filtrácie, S je zásobnosť, R je zdrojový člen

TRANSPORT LÁTOK VO ZVODNENEJ VRSTVE

- Rovnica transportu rozpustených látok v podzemnej vode, ďalšie rozšírenie Navier Stokesovej rovnice

- Aj pre koncentráciu platí rovnica

$$\frac{\partial(\Theta C)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\Theta . D_{ij} . \frac{\partial C}{\partial x_j}\right) - \frac{\partial}{\partial x_i}(v_i . C) + \sum_k Z_k$$

kde: x = priestorové súradnice, t = čas, C = koncentrácia látky v roztoku [mg.l-1], Θ = vlhkosť (obsah vody v póroch zeminy), v prípade nasýteného prostredia pórovitosť, v_i = filtračná rýchlosť a D = tenzor koeficientu disperzie, Z_k – zdrojový člen

FILTRAČNÁ RÝCHLOSŤ– v analytických riešeniach sa obyčajne dosadzuje konštanta, čo je pri zložitejších prúdeniach nereálne. Numerické riešenie bez problémov využíva realistické prúdenie, vypočítané v numerickom modely prúdenia (riešenie predchádzajúcej rovnice prúdenia podzemnej vody)

Stručný prehľad metód výpočtu transportu kontaminácie podzemnou vodou

- Analytické metódy
- Numerické metódy
- Empirické metódy

Analytické metódy

Na vytvorenie matematického modelu je potrebné poznať fyziku riešeného problému a na základe existujúcich poznatkov zostaviť matematické rovnice.

- Analytický model (analytické riešenie)
  - Presné riešenie rovníc v ľubovoľnom bode riešeného priestoru a v ľubovoľnom čase
  - V prevažnej väčšine reálnych prípadov však analytické riešenie neexistuje. Existujú len riešenia rovníc s množstvom nerealistických zjednodušení a priblížení, väčšinou aj s obmedzením pre rozmernosť priestoru.
  - Dajú sa použiť len veľmi obmedzene, je nutné uvedomiť si obor ich platnosti.
  - Majú napriek tomu veľký význam pri štúdiu fyzikálnych problémov, lebo základné rovnice ukrývajú množstvo nových, doteraz neobjavených poznatkov (napr. Maxwelove rovnice, Navier Stoke rovnica, ... rovnice kvantovej mechaniky).
  - Sú nenahraditeľné pri kontrole správnosti modelov určených na numerické riešenia.

Analytický model sa často používa neoprávnene, lebo jeho použitie je oveľa lacnejšie a jednoduchšie ako numerické modelovanie. Tým sa často degradujú obrovské prostriedky vynaložené na prieskum a namiesto toho, aby sa získalo čo najviac poznatkov uložených v získaných dátach. Konečné riešenie často nezodpovedá fyzikálnej realite a je zlé a je bez predikčných schopností.

Analytické metódy

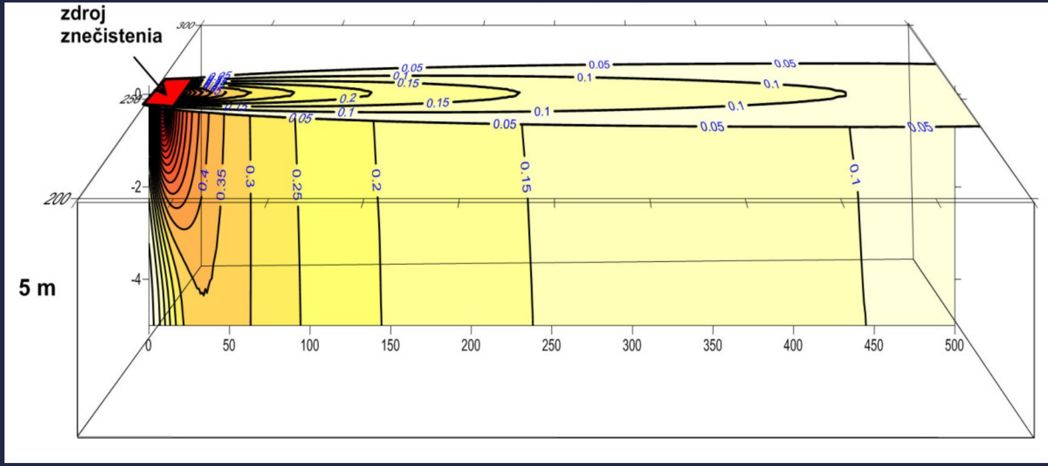
- Analytický model (analytické riešenie)

The Domenico solution may be written (Domenico, 1987; Wang and Wu, 2009),

$$\frac{C}{C_o} = \frac{1}{8}\exp\left[\frac{vx}{2D_x}\left[1-\left(1+\frac{4\lambda D_x}{v^2}\right)^{0.5}\right]\right]$$
$$\times\, erfc\left[\frac{x - vt\sqrt{1+4\lambda D_x/v^2}}{2\sqrt{\alpha_x vt}}\right]$$
$$\times\left\{erf\left[\frac{y+\frac{Y}{2}}{2\sqrt{\frac{D_y x}{v}}}\right] - erf\left[\frac{y-\frac{Y}{2}}{2\sqrt{\frac{D_y x}{v}}}\right]\right\}$$
$$\times\left\{erf\left[\frac{z+Z}{2\sqrt{\frac{D_z x}{v}}}\right] - erf\left[\frac{z-Z}{2\sqrt{\frac{D_z x}{v}}}\right]\right\},$$
$$-\infty < x, y < \infty, 0 \le z \le b, t > 0 \qquad (2)$$

The Sagar/Wexler solution is written (Sagar, 1982; Wexler, 1992; Wang and Wu, 2009),

$$\frac{C}{C_o} = \frac{x}{8\sqrt{\pi D_x}}\int_0^t exp\left[-\lambda\tau - \frac{(x-v\tau)^2}{4D_x\tau}\right]$$
$$\times\left[erfc\frac{(y-\frac{Y}{2})}{2\sqrt{D_y\tau}} - erfc\frac{(y+\frac{Y}{2})}{2\sqrt{D_y\tau}}\right]$$
$$\times\left[erfc\frac{(z-Z)}{2\sqrt{D_z\tau}} - erfc\frac{(z+Z)}{2\sqrt{D_z\tau}}\right]\frac{d\tau}{\tau^{\frac{3}{2}}}$$
$$x > 0, -\infty < y < \infty, 0 \le z \le b, t > 0 \qquad (3)$$



x,y,z – priestorové súradnice, riešenie ráta v pol priestore, okrajové koncentrácie sú v ∞ rovné 0

τ – čas, v τ = 0 sú koncentrácie všade okrem zdroja nulové, v - skutočná rýchlosť prúdenia p.v.

zdroj je kváder v počiatku súradnicovej sústavy o rozmeroch X,Y,Z s konštantnou koncentráciou C0.

Numerické metódy

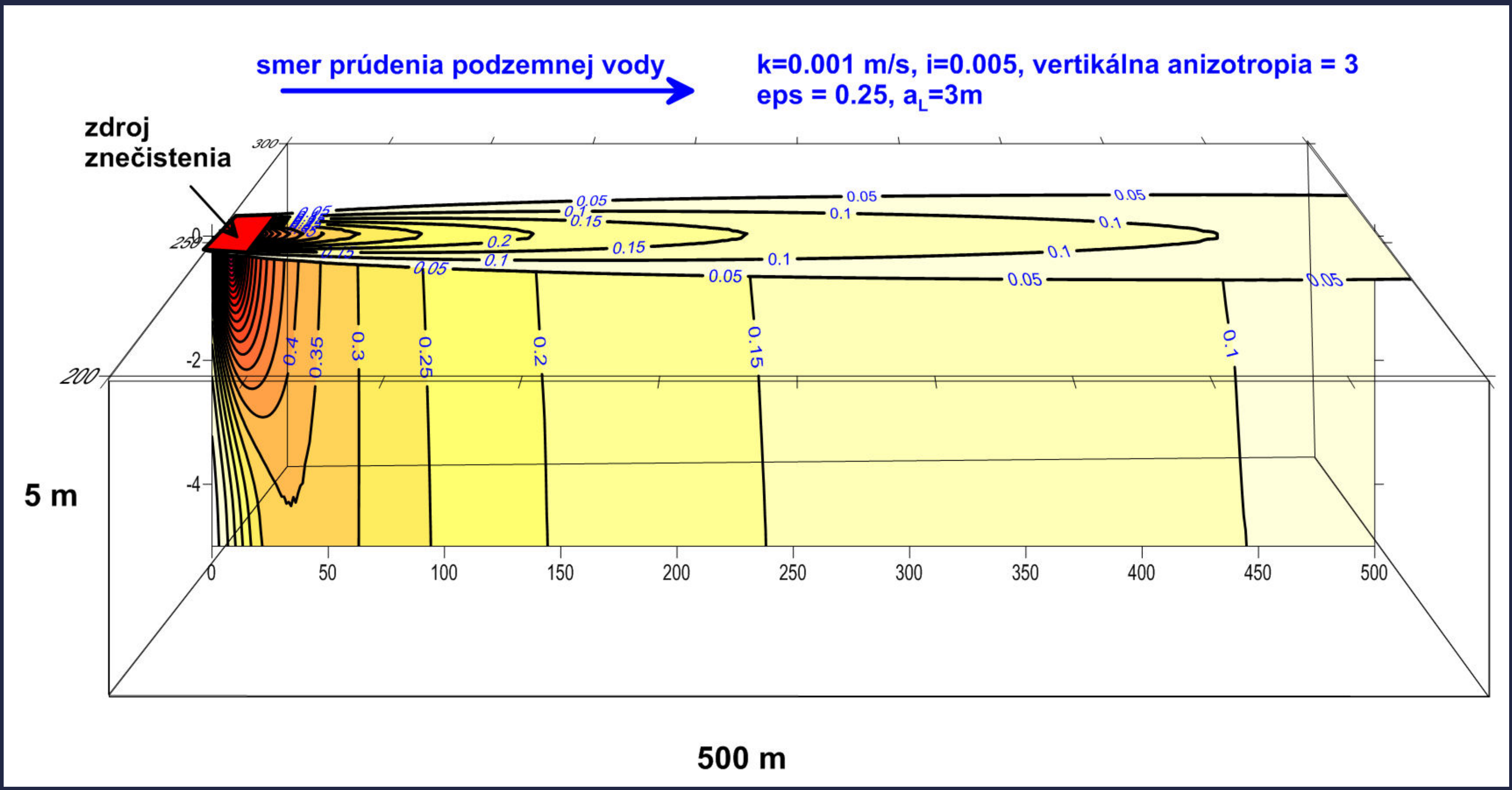
- Numerický model (numerické riešenie)
  - Nahradzuje riešenie zložitých rovníc, ich približnou algebrickou prezentáciou. Táto náhrada sa deje po diskretizácii času a priestoru. Jedná sa o rozsiahle sústavy lineárnych rovníc s jednoduchou matematikou (+,-,*,/), a tým sú mimoriadne vhodné na riešenie počítačmi.
  - Približné riešenie rovníc, ale s pomerne dobre kontrolovateľnou nepresnosťou. Nedáva spojité riešenie (diskretizácia času aj priestoru)
  - Umožňuje nehomogénne anizotropné rozloženie parametrov s realistickými počiatočnými aj okrajovými podmienkami a to v komplexnej 3D geometrii. Teda rieši aj také problémy, pre ktoré analytické riešenie neexistuje.
  - Zostavenie numerického modelu je v realistických prípadoch pomerne náročné, čo sa týka odbornosti a aj času. Správne kalibrovaný numerický model svojou komplexnosťou dokáže v dnešnej dobe najlepšie integrovať získané údaje s prieskumu a umožňuje predikciu pre skutočné rozloženie znečistenia v podzemnej vode a predikciu jeho vývoja v budúcnosti.
  - **Je nenahraditeľný pri predikcii vývoja znečistenia v zložitejších hydraulických a transportných podmienkach napr. pri návrhu optimálneho spôsobu sanácie alebo transporte látok s rozpadom alebo premenou, ...**

Aj prípade numerického modelovania je veľmi pravdepodobný nesprávny výsledok pri nepochopení fyziky problému a nepochopení numerických postupov konkrétneho riešenia. Vyžaduje si kvalifikované použitie.

Empirické metódy

- Nie sú analytickým riešením rovníc transportu, len pre určité veľmi ohraničené podmienky hľadajú vhodnú aproximačnú funkciu podobajúcu sa na riešenie
  - Ako príklad z hydrauliky môžu poslúžiť rovnice na výpočet koeficientov filtrácií z výsledkov analýz zrnitosti.
  - Pri ich použití musí byť overená ich vierohodnosť a môžu byť použité len pre podmienky v určených intervaloch platnosti pre jednotlivé parametre.
- Empirickú metódou využíva aj kroková metóda, odporúčaná Smernicou MŽP SR č.1/2015

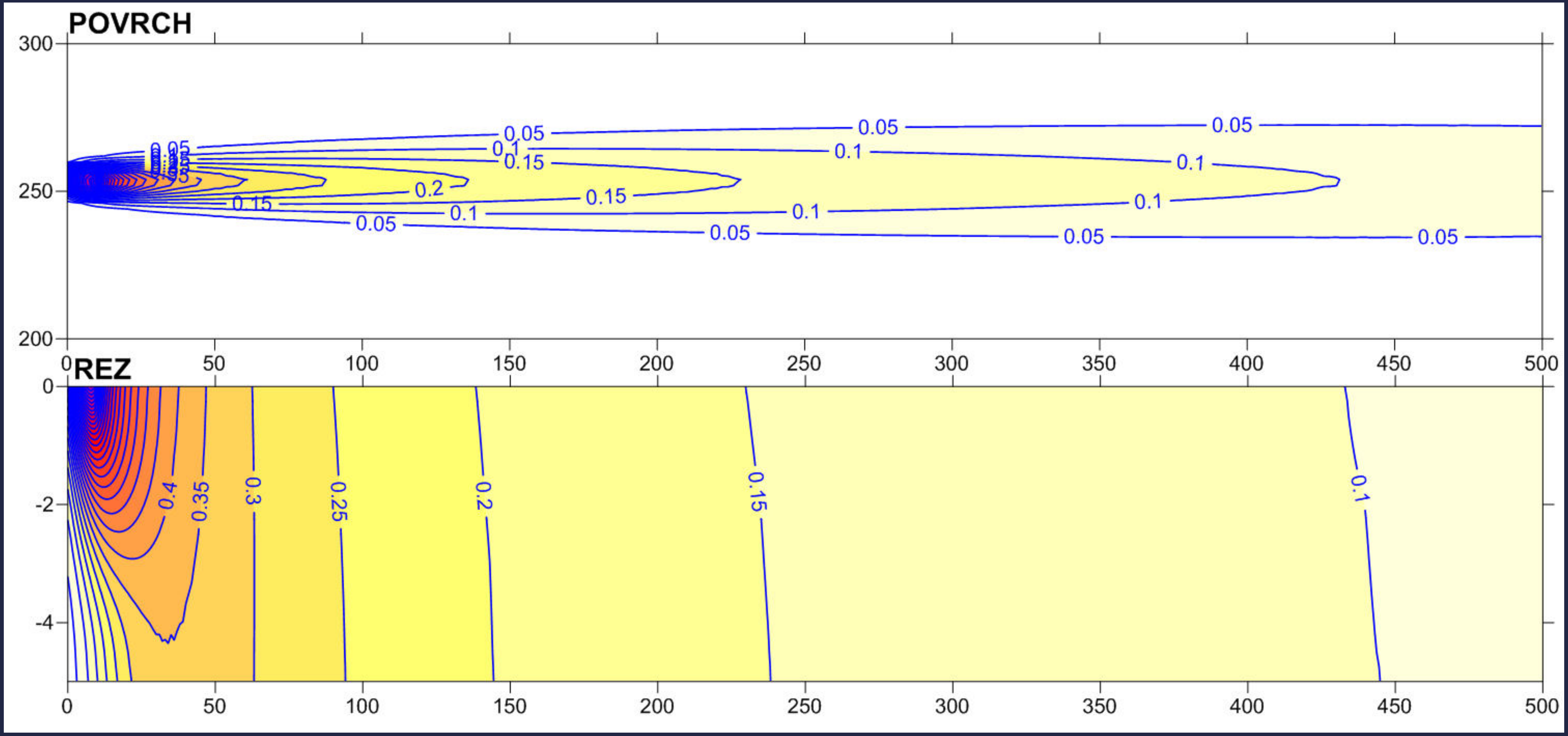
Porovnanie výsledkov metód na konkrétnych príkladoch homogénneho izotropného prostredia s neporušeným prúdením podzemnej vody



dotácia znečistenia z priesakov

- Priesaky 400 mm /rok zo zrážok
- Rozmer zdroja **9.5 m x 10 m**
- V mieste zdroja koncentrácia vo vsakovanej vode Co= 100 mg/l

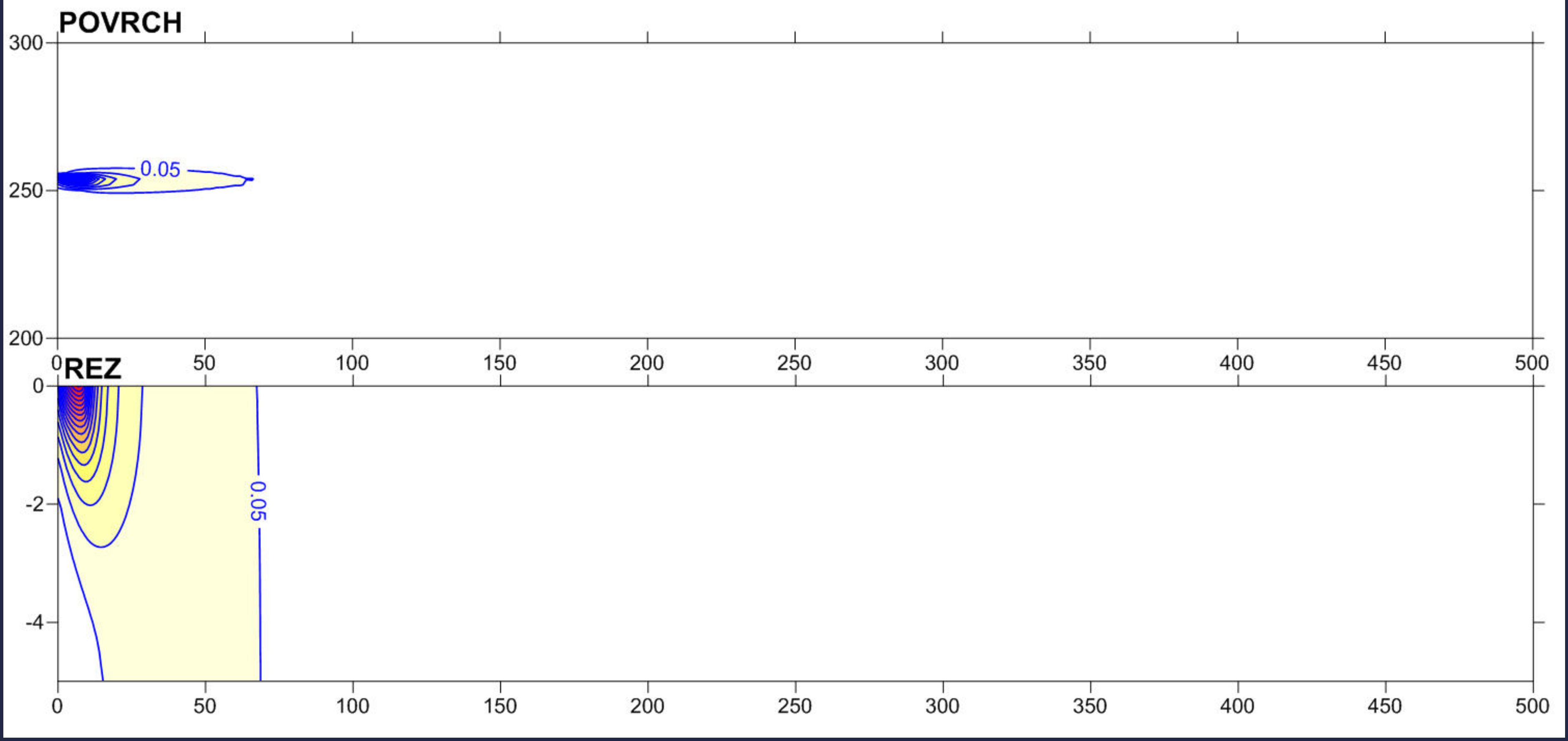
3D numerický model



dotácia znečistenia z priesakov

- Priesaky 400 mm /rok zo zrážok
- Rozmer zdroja **1.5 m x 10 m**
- V mieste zdroja koncentrácia vo vsakovanej vode 100 mg/l

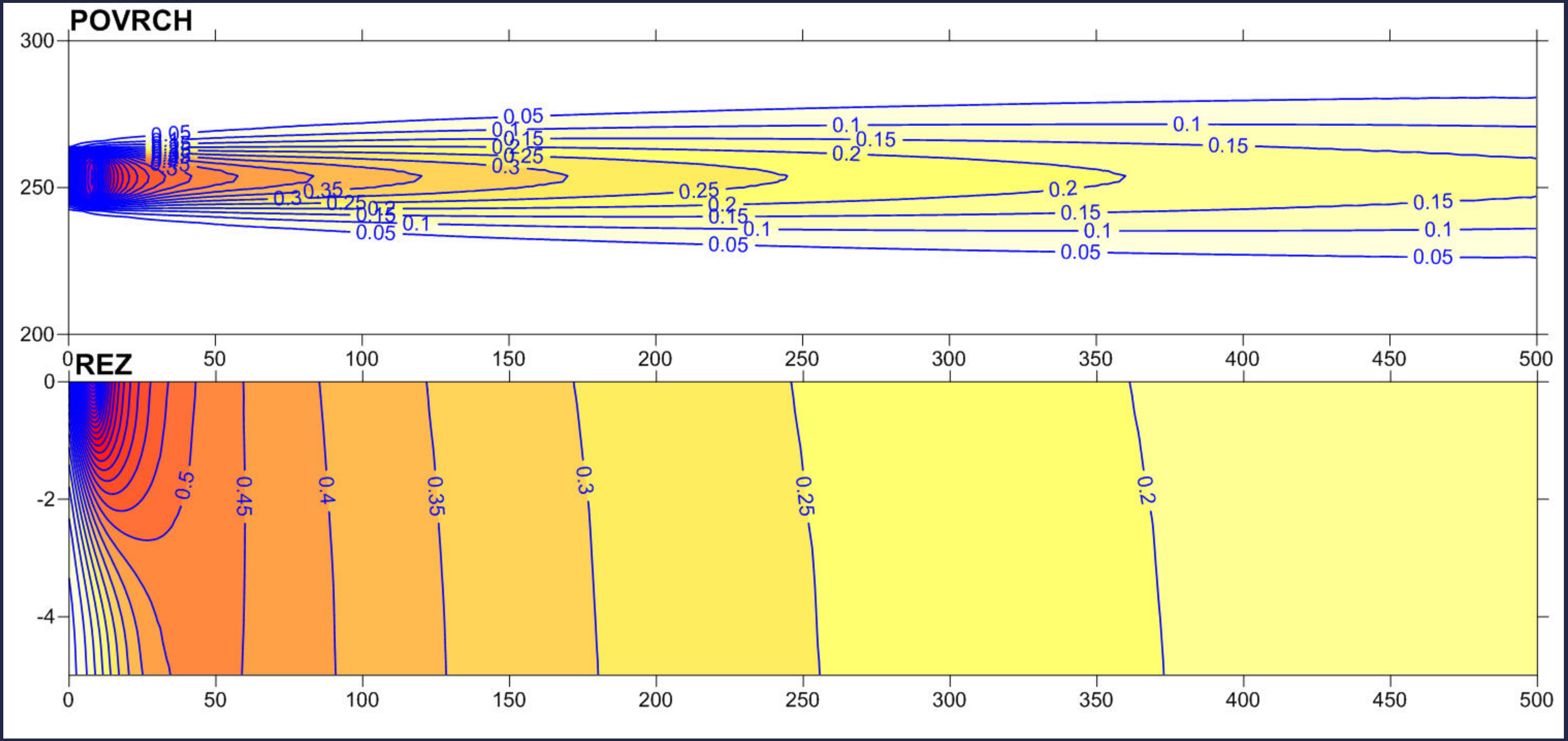
3D numerický model



dotácia znečistenia z priesakov

- Priesaky 400 mm /rok zo zrážok
- Rozmer zdroja **17.5 m x 10 m**
- V mieste zdroja koncentrácia vo vsakovanej vode 100 mg/l

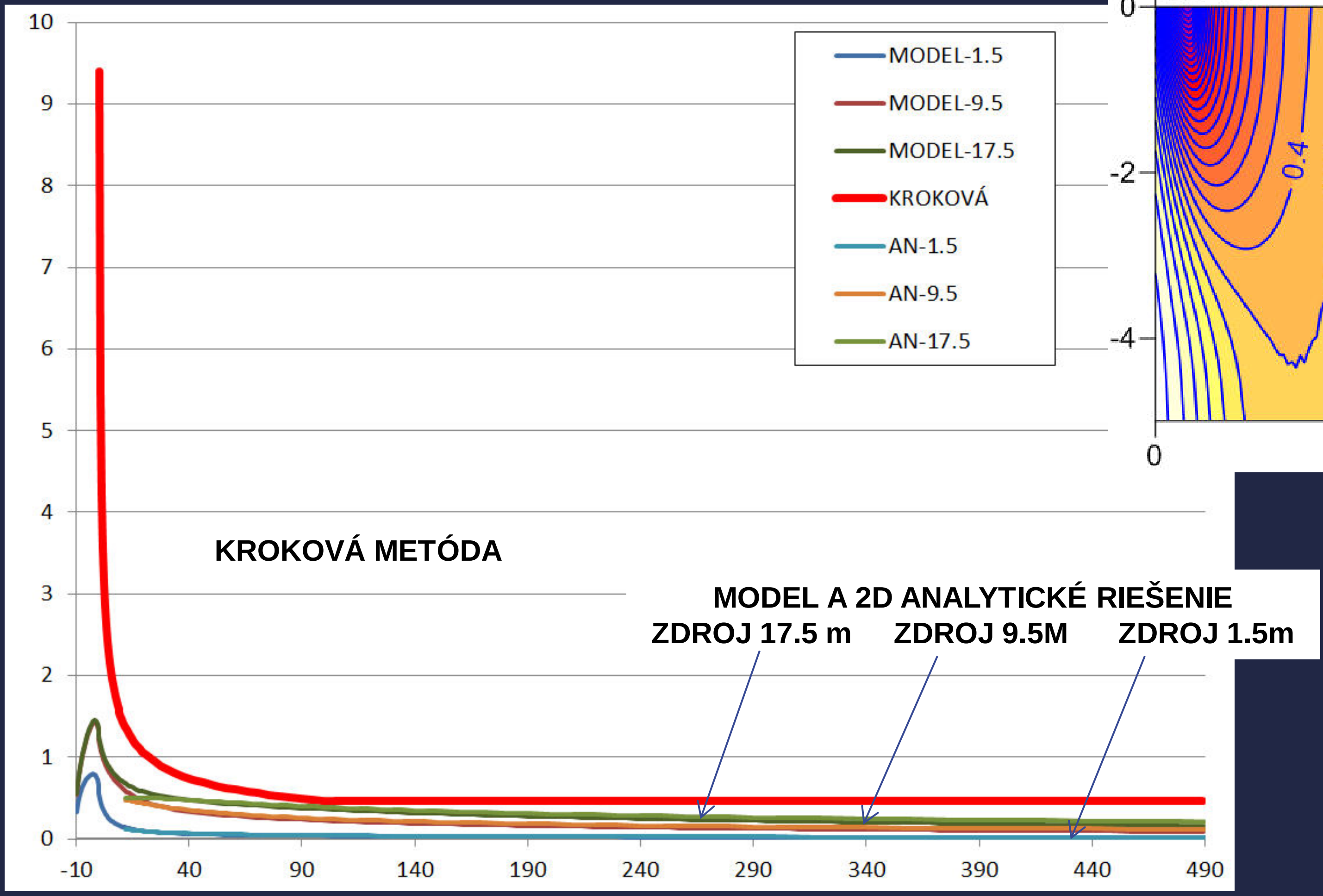
3D numerický model

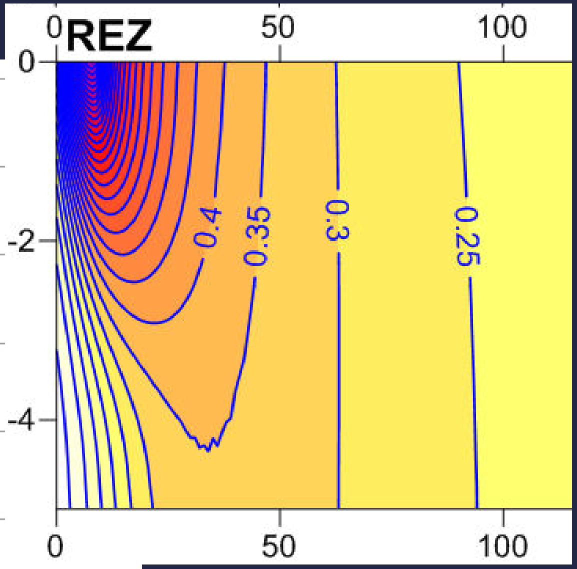


dotácia znečistenia z priesakov

- Priesaky 400 mm /rok zo zrážok
- V mieste zdroja koncentrácia vo vsakovanej vode 100 mg/l

Porovnanie riešení na povrchu v smere prúdenia podzemnej vody (C1-kroková – 9.21 mg/l, C1-2D analytické = 0.5047 mg/l)

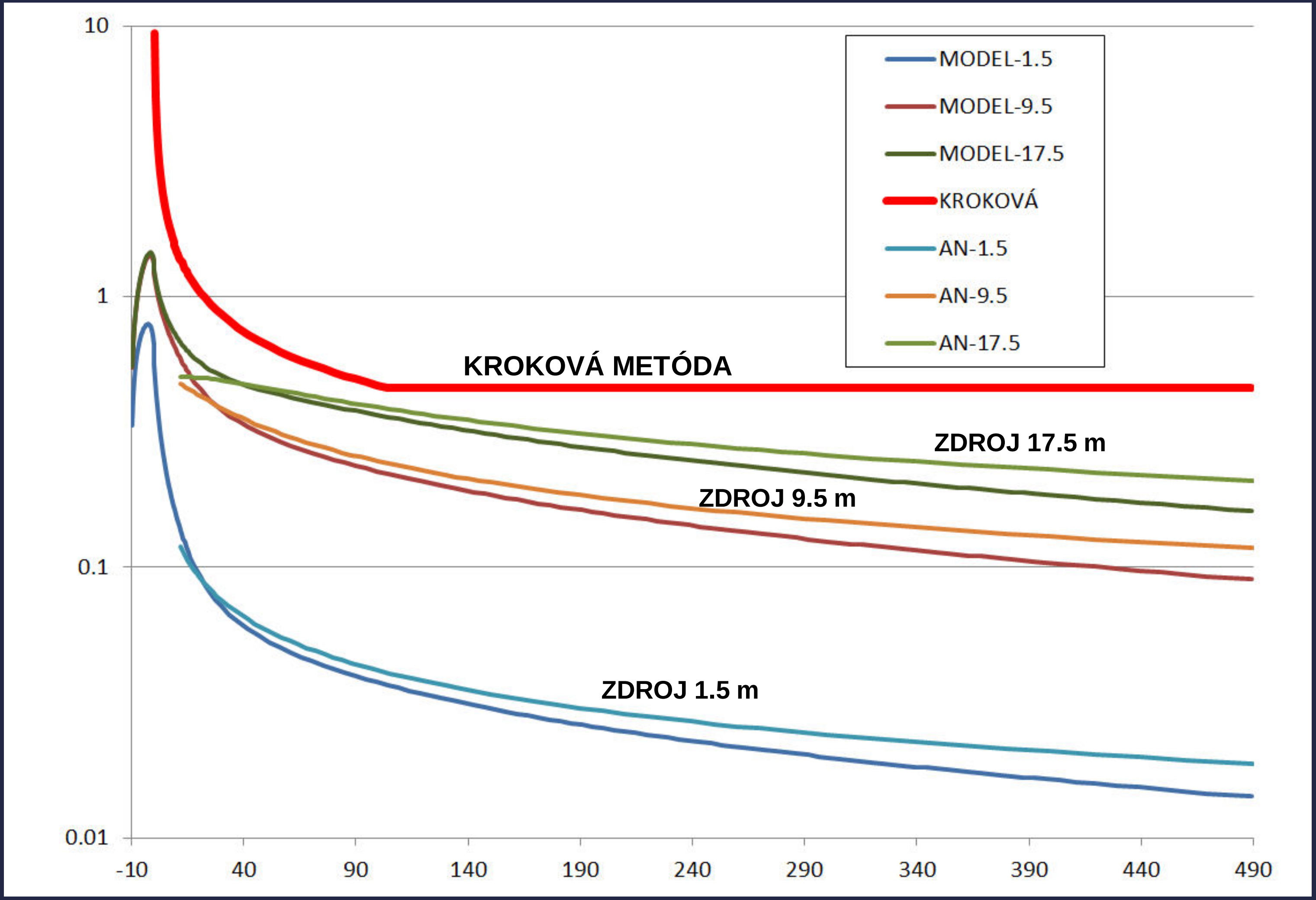




dotácia znečistenia z priesakov

- Priesaky 400 mm /rok zo zrážok
- V mieste zdroja koncentrácia vo vsakovanej vode 100 mg/l

Porovnanie riešení na povrchu v smere prúdenia podzemnej vody



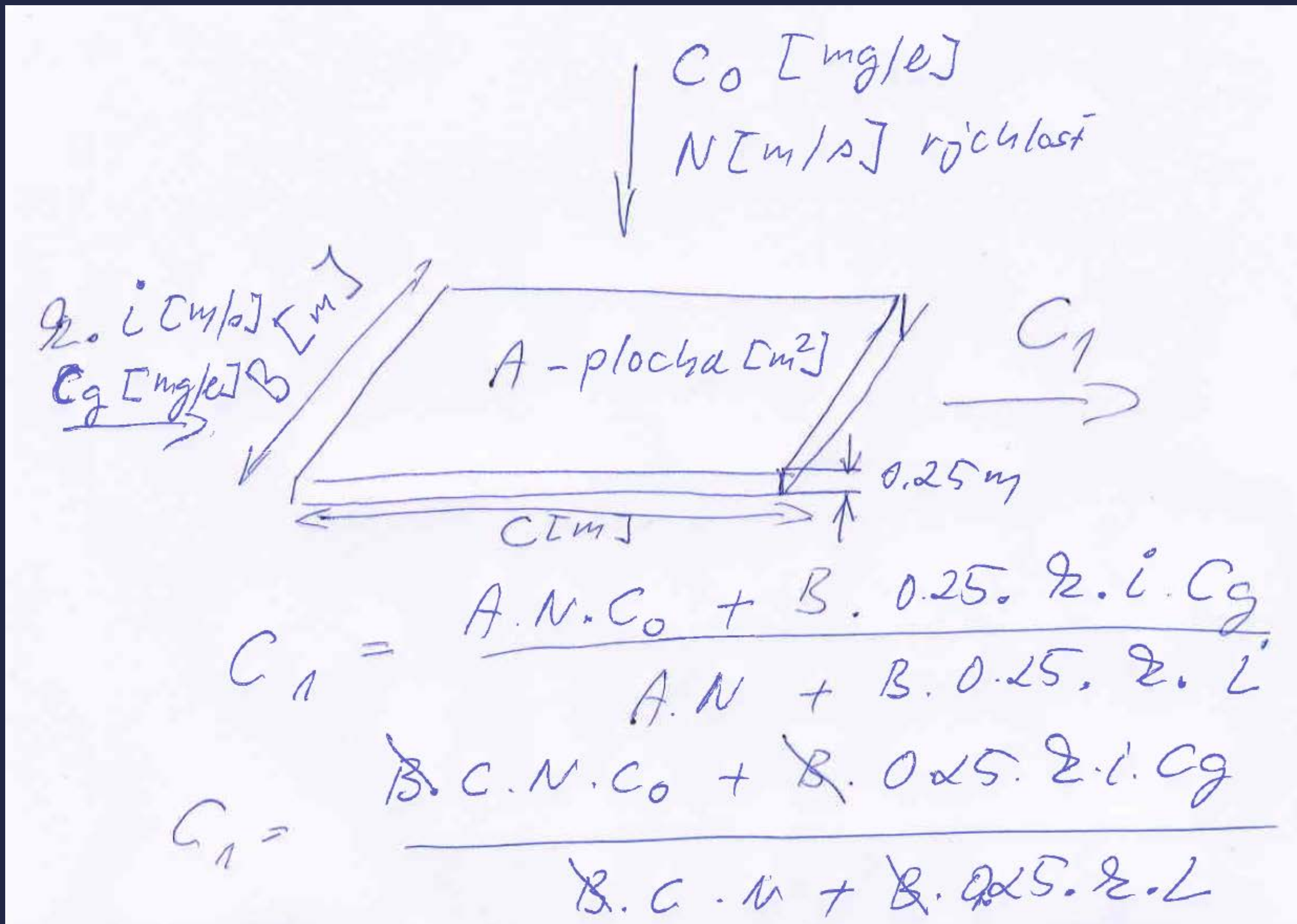
Prečo dáva kroková vyššie koncentrácie pod zdrojom ako model alebo analytika?

MECHANIZMUS DISPERZIE

dotácia znečistenia z priesakov

- Priesaky 400 mm /rok zo zrážok
- V mieste zdroja koncentrácia vo vsakovanej vode 100 mg/l

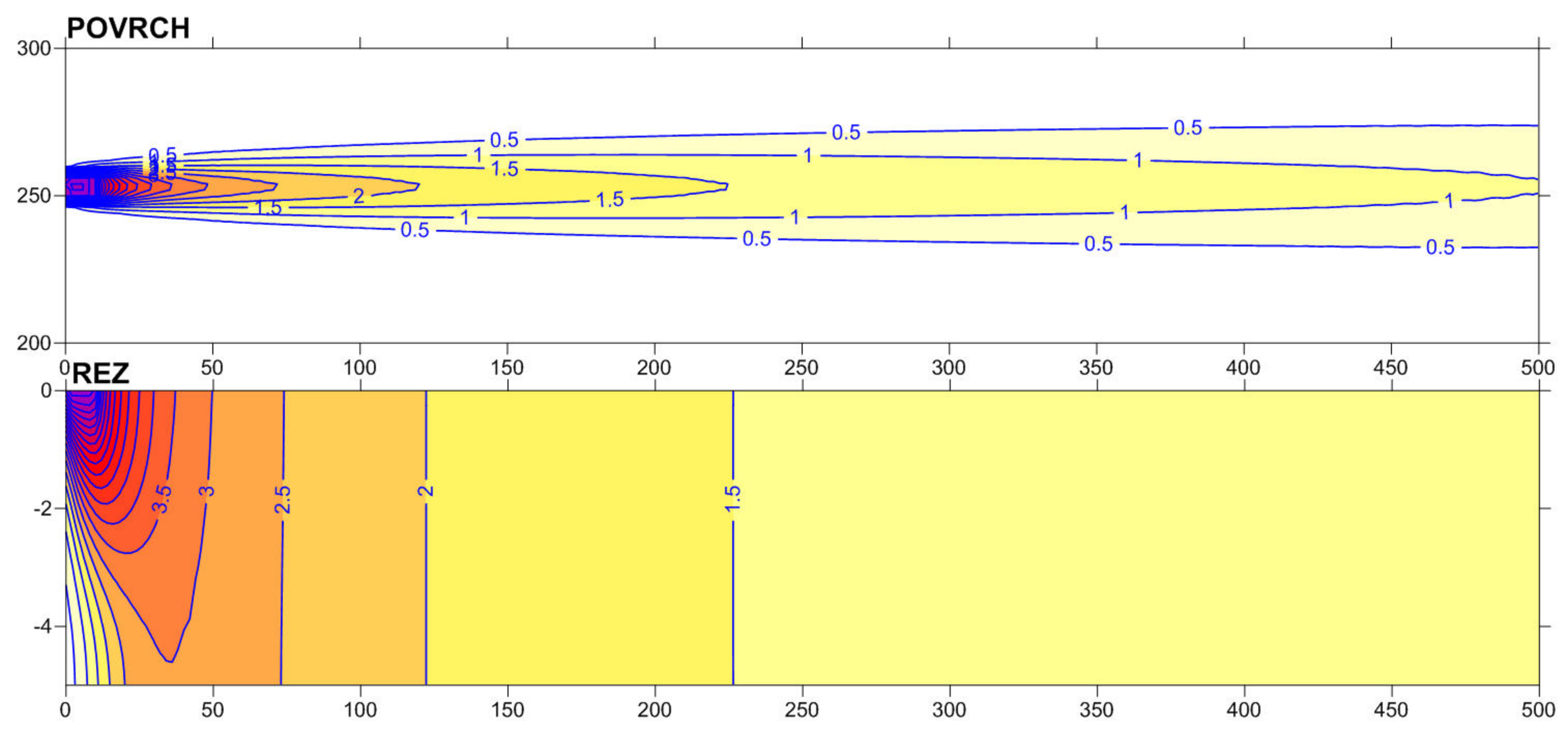
Koncentrácia znečistenia v krokovej metóde nie je závislá na šírke zdroja.



dotácia znečistenia z kontaminácie zemín alebo fázy

- Rozmer zdroja **9.5 m x 10 m**
- V mieste zdroja (do 25 cm) koncentrácia vo vsakovanej vode 10 mg/l

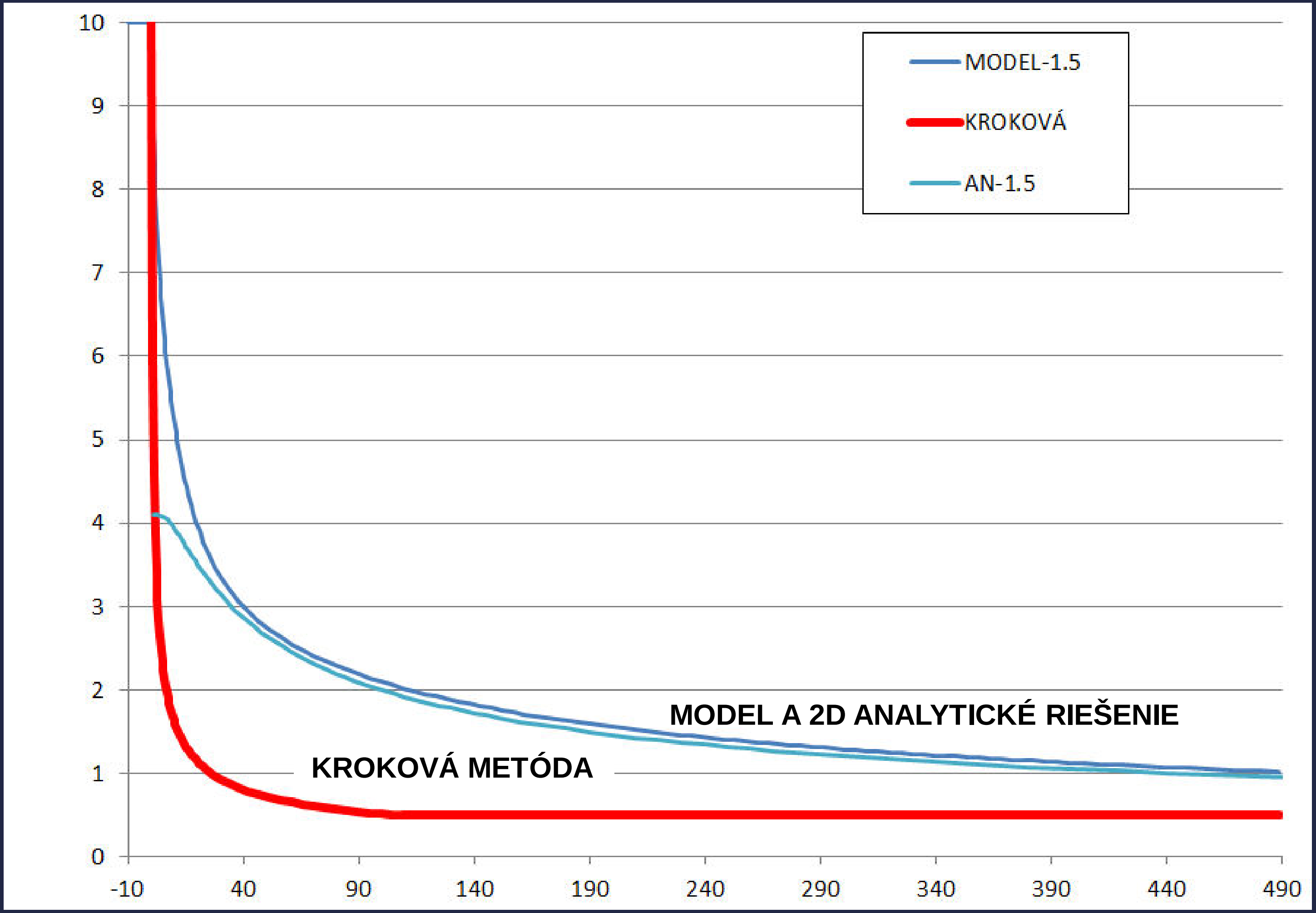
3D numerický model



dotácia znečistenia z kontaminácie zemín alebo fázy

- Rozmer zdroja **9.5 m x 10 m**
- V mieste zdroja (do 25 cm) koncentrácia vo vsakovanej vode 10 mg/l

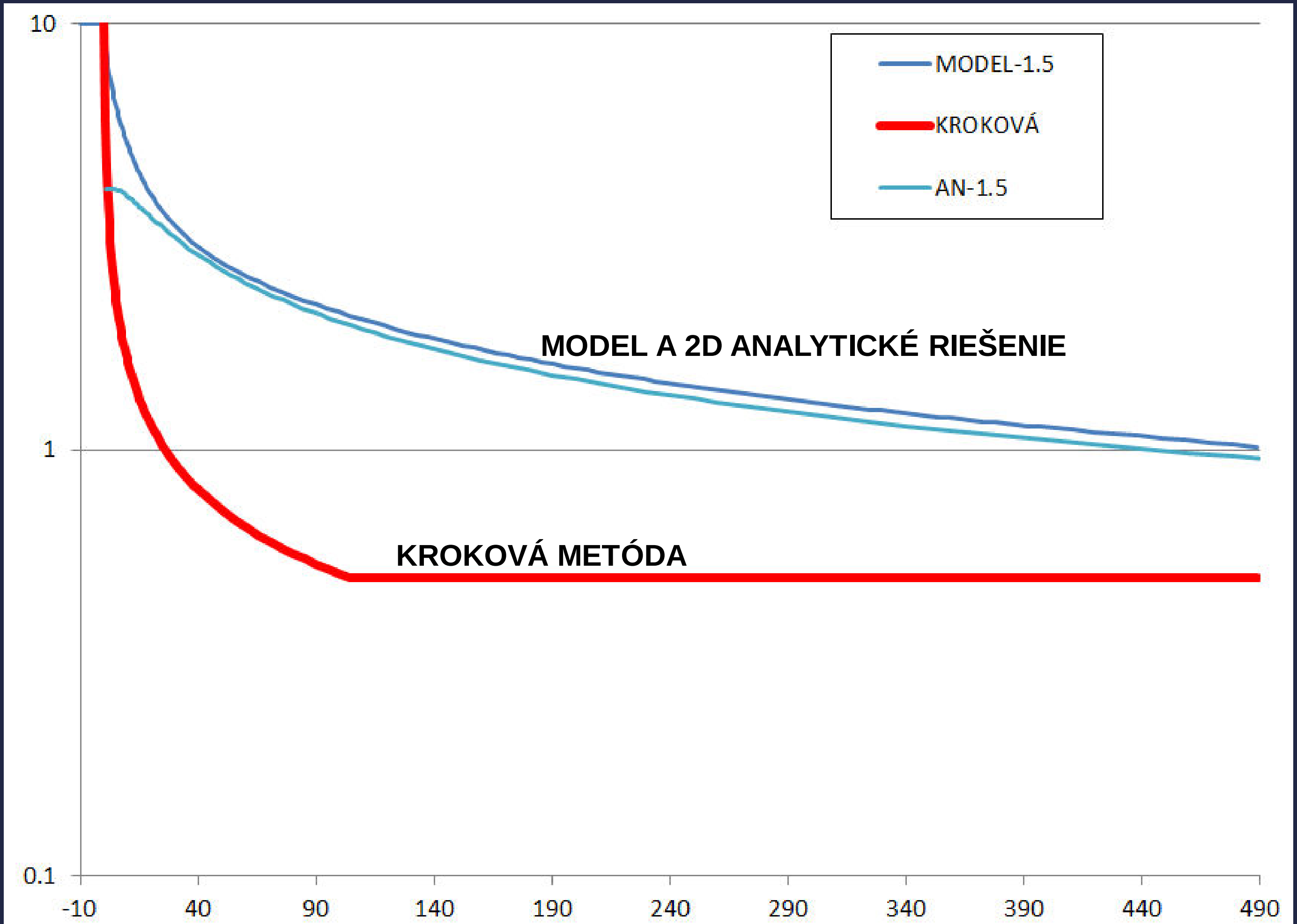
Porovnanie riešení na povrchu v smere prúdenia podzemnej vody



dotácia znečistenia z kontaminácie zemín alebo fázy

- Rozmer zdroja **9.5 m x 10 m**
- V mieste zdroja (do 25 cm) koncentrácia vo vsakovanej vode 10 mg/l

Porovnanie riešení na povrchu v smere prúdenia podzemnej vody



Prečo dáva kroková vyššie koncentrácie pod zdrojom ako model alebo analytika?

- Lebo kroková počíta množstvo látky prúdiace zo zdroja len konvektívnym transportom a chýba v nej výnos zo zdroja disperziou, resp. aj difúziou. To spôsobuje v tomto prípade veľkú bilančnú chybu.

Rovnica transportu

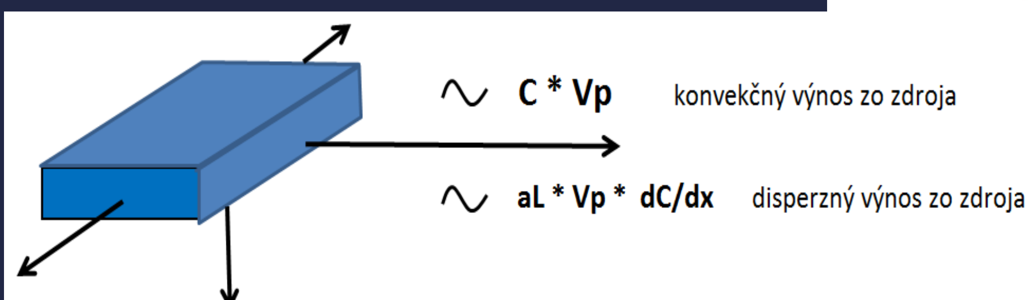
$$\frac{\partial(\Theta C)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\Theta . D_{ij} . \frac{\partial C}{\partial x_j}\right) - \frac{\partial}{\partial x_i}(v_i . C)$$

Analytické riešenie

The Sagar/Wexler solution is written (Sagar, 1982; Wexler, 1992; Wang and Wu, 2009),

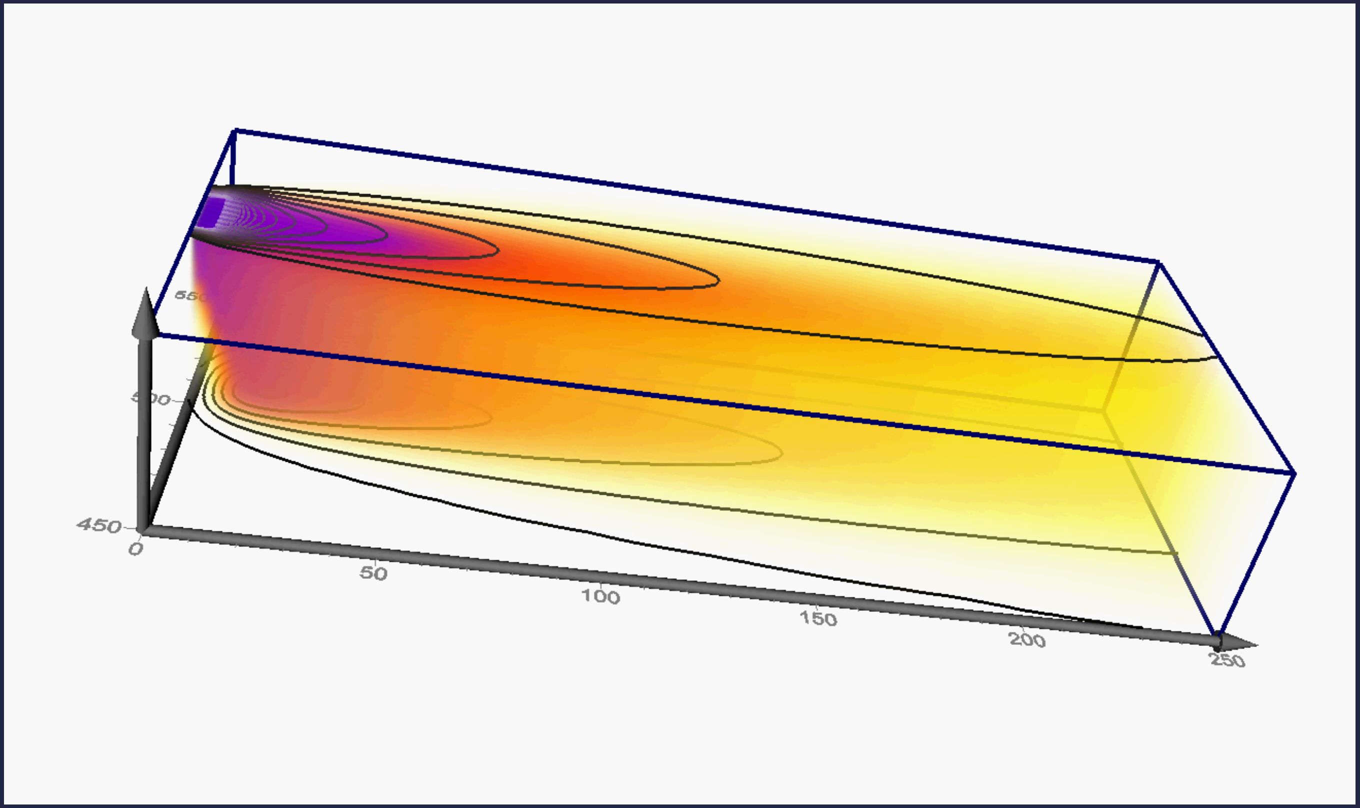
$$\frac{C}{C_o} = \frac{x}{8\sqrt{\pi D_x}} \int_0^t exp\left[-\lambda\tau - \frac{(x - v\tau)^2}{4D_x\tau}\right] \times \left[erfc\frac{(y - \frac{Y}{2})}{2\sqrt{D_y\tau}} - erfc\frac{(y + \frac{Y}{2})}{2\sqrt{D_y\tau}}\right] \times \left[erfc\frac{(z - Z)}{2\sqrt{D_z\tau}} - erfc\frac{(z + Z)}{2\sqrt{D_z\tau}}\right]\frac{d\tau}{\tau^{\frac{3}{2}}}$$

$$x>0, -\infty < y < \infty, 0 \le z \le b, t>0 \qquad (3)$$



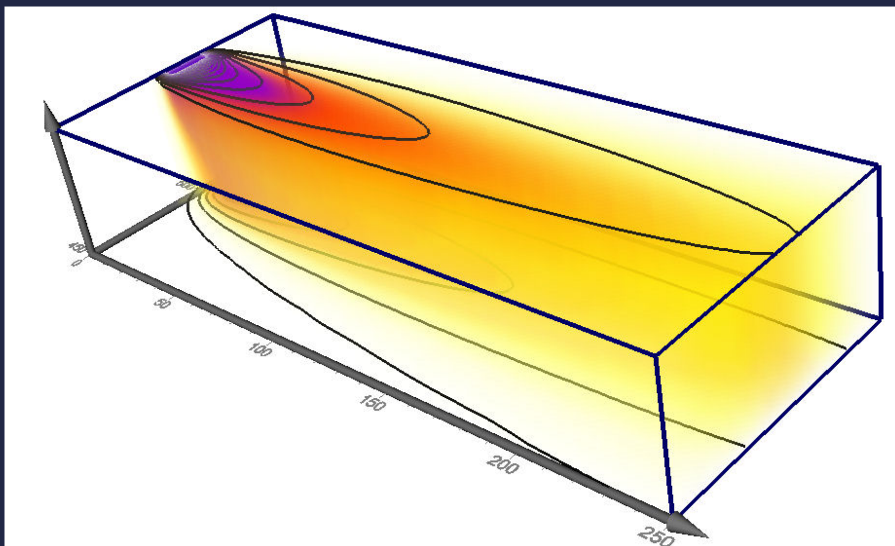
Ďalšie paradoxy krokovej metódy

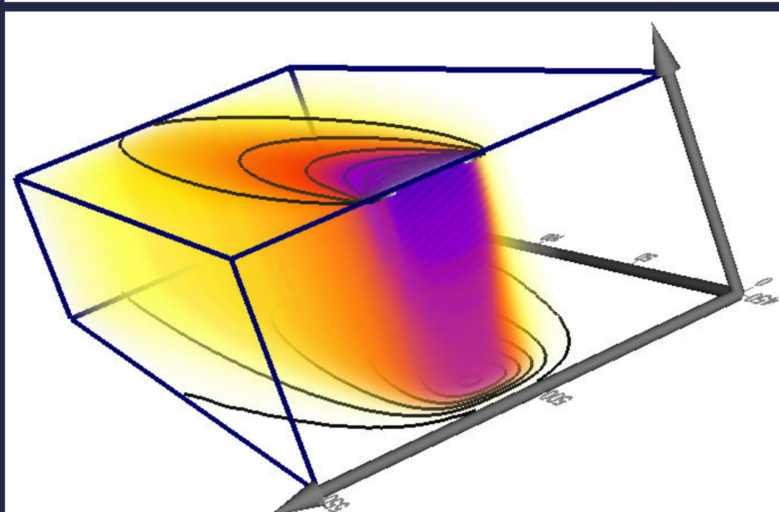
- Je to jednorozmerné empiricko bilnačné riešenie
- Proces je vždy viacrozmerný a túto viac rozmernosť nie je možné zanedbať.

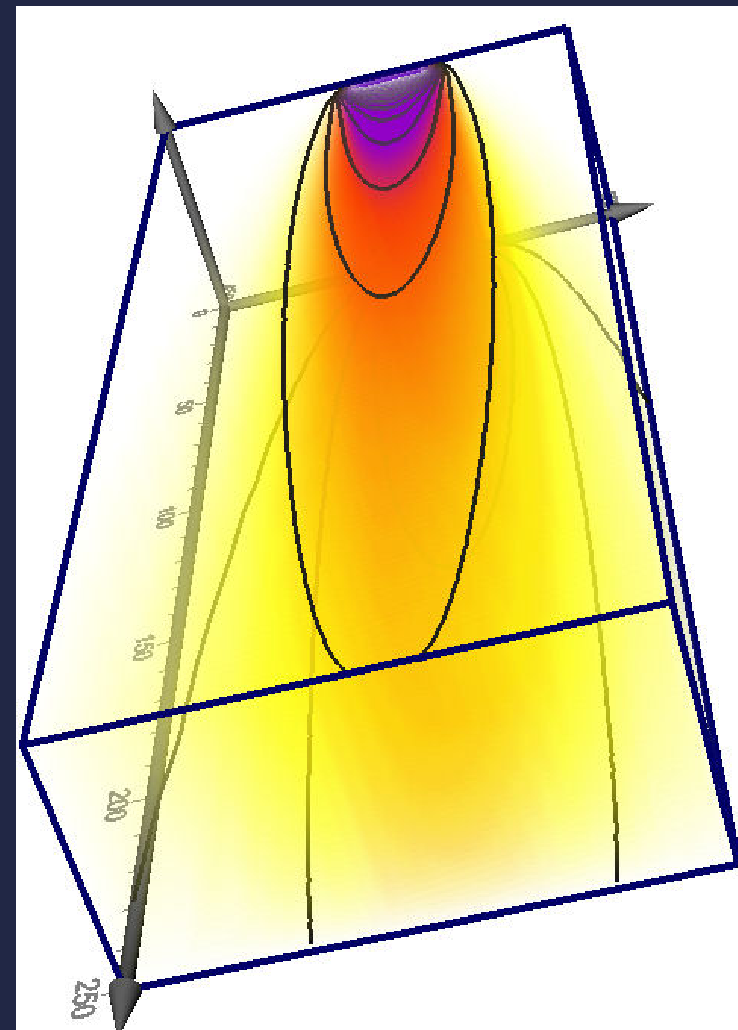


Ďalšie paradoxy krokovej metódy

- Rozptyl disperziou najmä do bokov

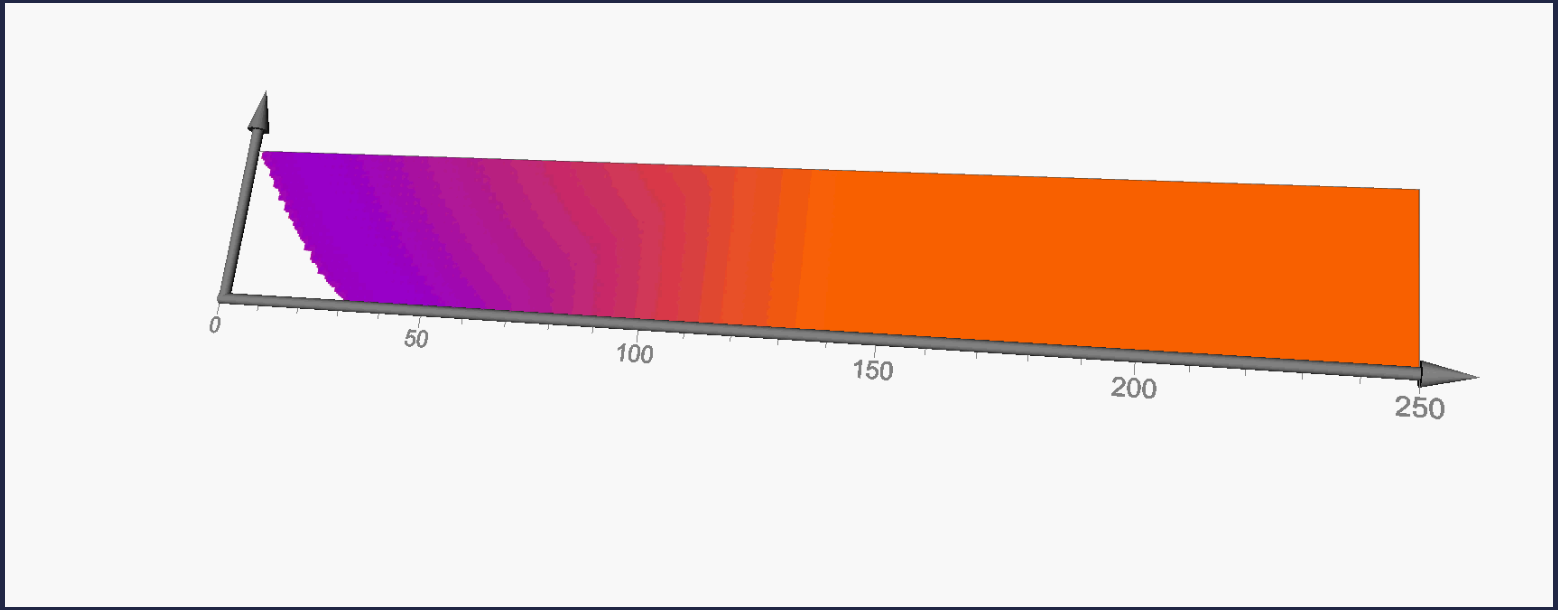






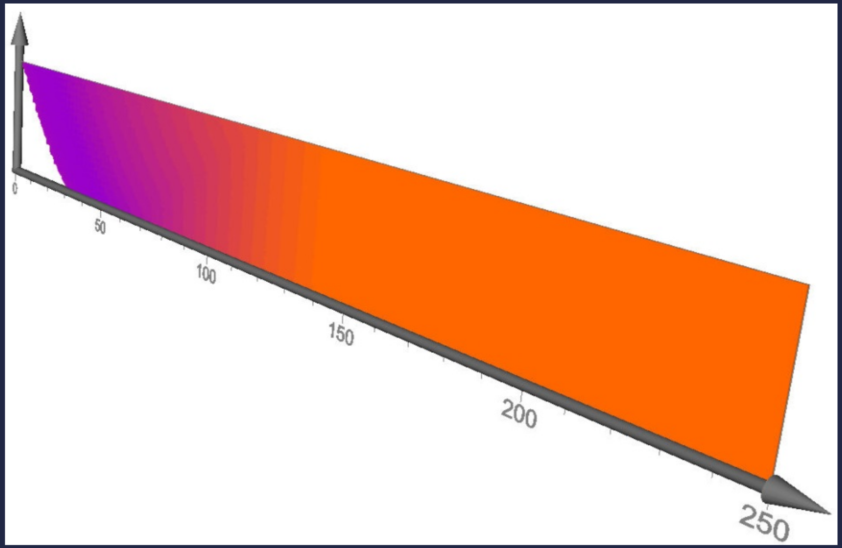
Ďalšie paradoxy krokovej metódy

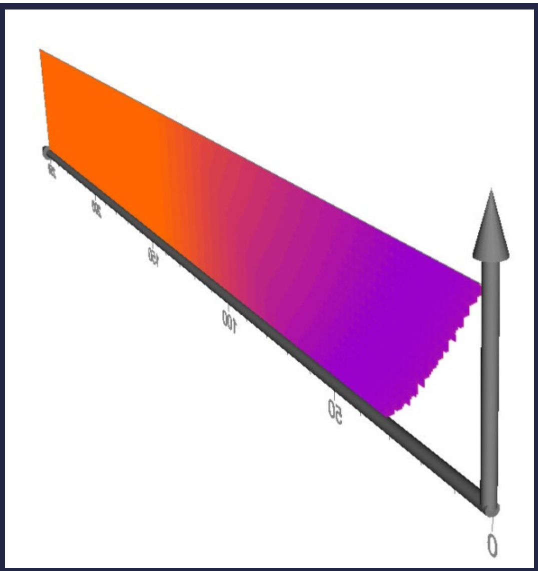
- Je to jednorozmerné empiricko bilnačné riešenie
- Proces je vždy viacrozmerný a túto viac rozmernosť nie je možné zanedbať.

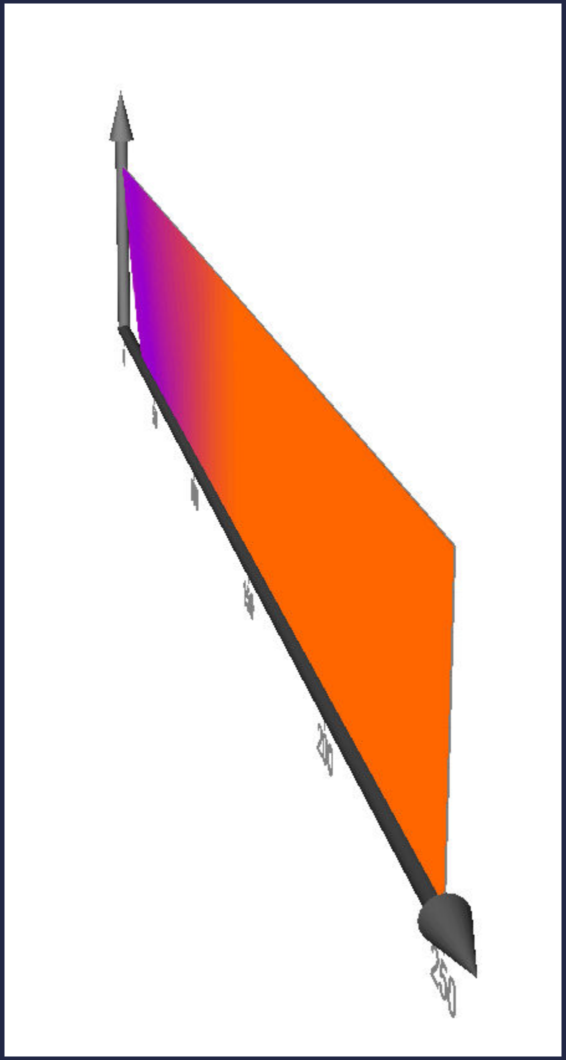


Ďalšie paradoxy krokovej metódy

- Viac pohľadov na riešenie krokovej metódy







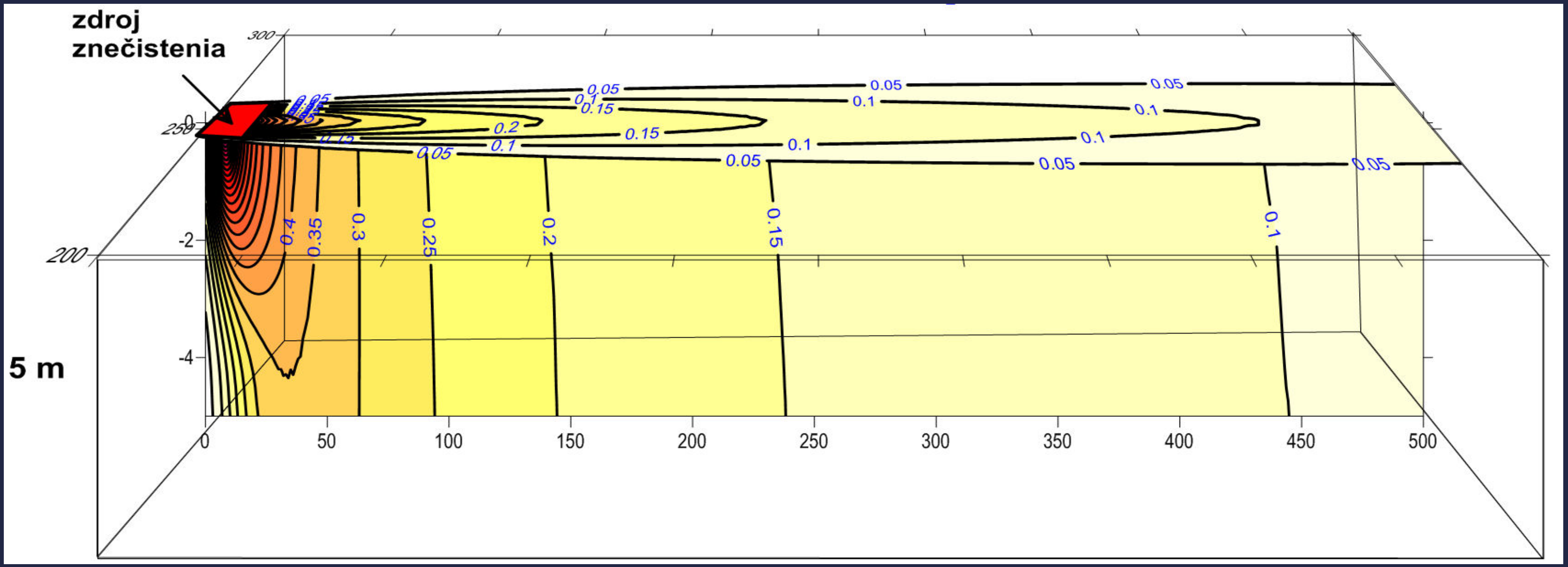
t – čas
s - vzdialenosť
dm - hĺbka premiešavania
aL – pozdĺžna disperzivita
C1 – koncentrácia pod zdrojom
C2 – koncentrácia po zriedení
vp – skutočná rýchlosť prúdenia

Ďalšie paradoxy krokovej metódy

Vychádza z koncepcie **rovnomerného premiešavania látky v podzemnej vode len do hĺbky, pričom prienik koncentrácie pod zdrojom je určený hĺbkou 25 cm.**

Hneď v koncepcii je niekoľko neprijateľných zjednodušení :

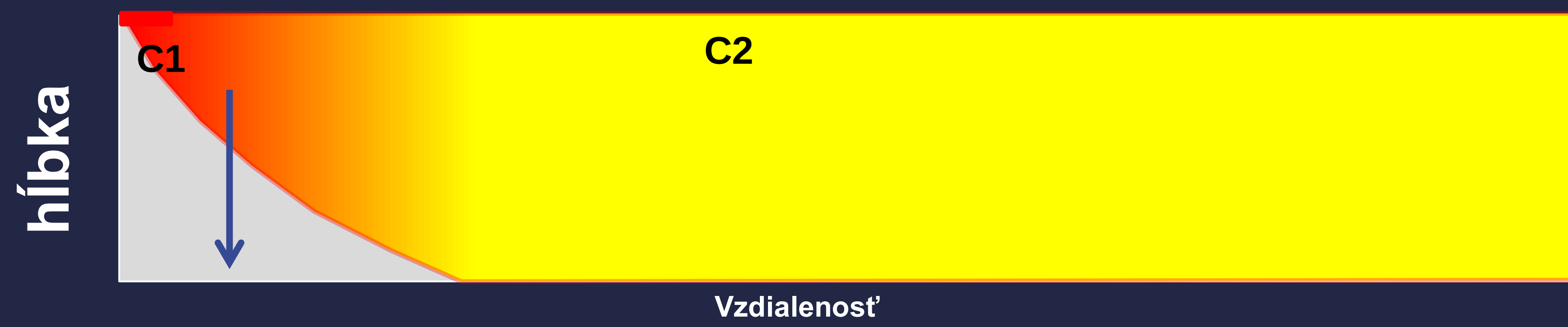
- KM zanedbáva kvalitatívne najdôležitejšie procesy priečnej a pozdĺžnej disperzie (slabosť jednorozmerného riešenia). Dôsledky sme videli v predchádzajúcej časti. **= rozpor**
- Čo je to hĺbka 25 cm pod zdrojom? Používanie tejto hĺbky nemá fyzikálnu opodstatnenosť **= rozpor**

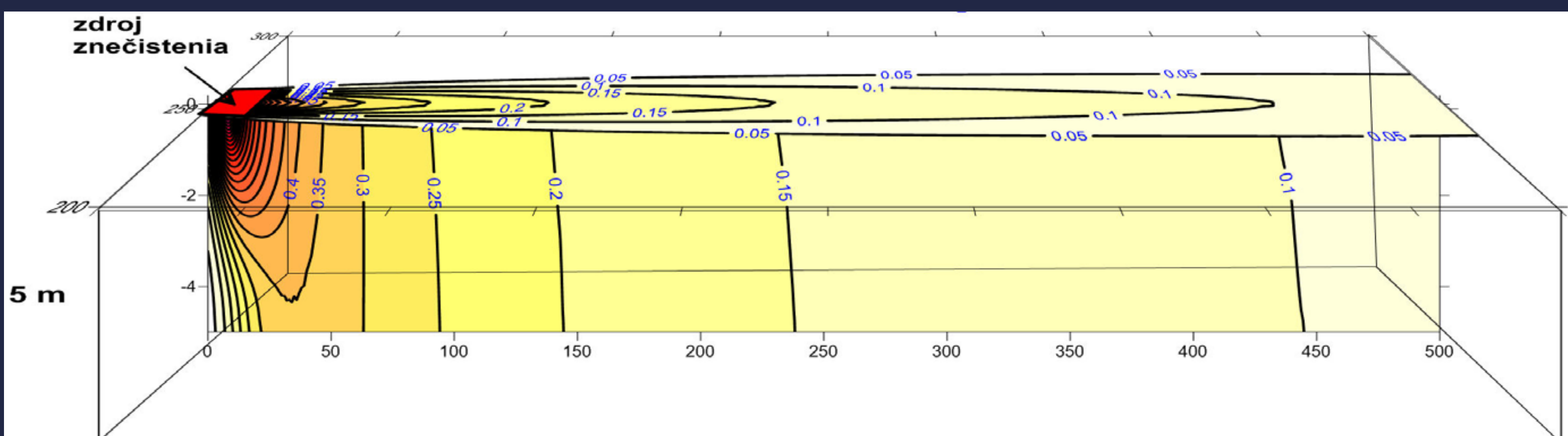


Ďalšie paradoxy krokovej metódy

- Vychádza s koncepcie **rovnomerného premiešavania len do hĺbky**

Akú hĺbku premiešavania máme na mysli? Také niečo ako rovnomerné premiešavanie pri transporte neexistuje. Pri hĺbke premiešavania musíme hovoriť aj o koncentrácii, ktorú máme na mysli (napr. nenulovú). Nemôžeme niečo počítať, keď nevieme čo to znamená a nevieme to teda vyjadriť v číslach.

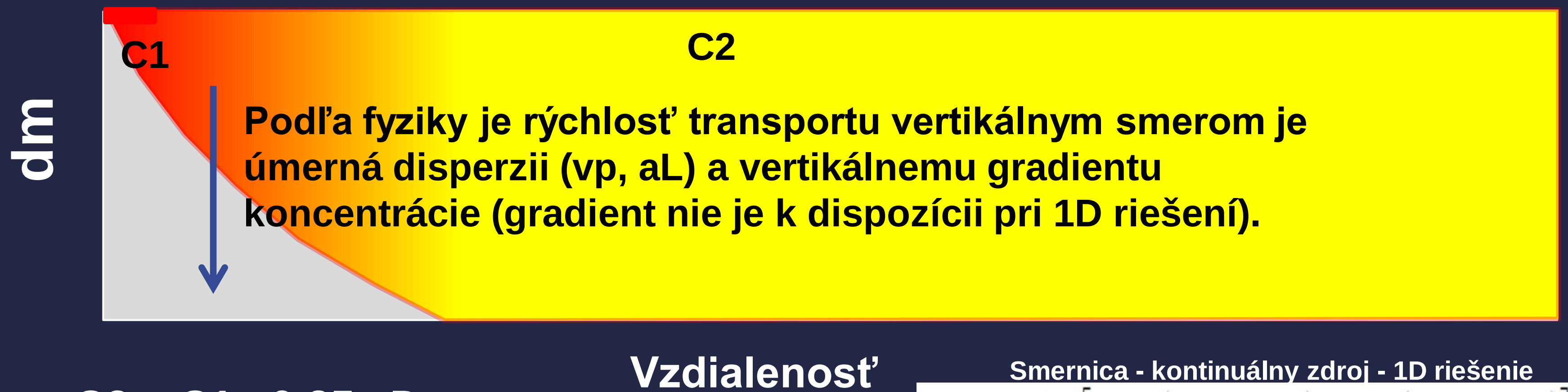




Ďalšie paradoxy krokovej metódy

t – čas
s - vzdialenosť
dm - hĺbka premiešavania
aL – pozdĺžna disperzivita
C1 – koncentrácia pod zdrojom
C2 – koncentrácia po zriedení
vp – skutočná rýchlosť prúdenia

- Vychádza s koncepcie **rovnomerného premiešavania len do hĺbky**



C2 = C1 . 0,25 . Dm

dm = √ ((72/900).aL.vp.t)

ale vp . t = vzdialenosť = S

dm = √ ((72/900). aL. S)

Smernica - kontinuálny zdroj - 1D riešenie

$$\frac{C(x,t)}{C_0} = \frac{1}{2} e^{\left(\frac{v_p . x}{2D}\right)} \left[e^{-x\beta} \operatorname{erfc}\left(\frac{x - t.\sqrt{v_p^2 + 4\lambda D}}{2.\sqrt{D.t}} \right) + e^{x\beta} . \operatorname{erfc}\left(\frac{x + t.\sqrt{v_p^2 + 4\lambda D}}{2.\sqrt{D.t}} \right) \right]$$

$$\beta = \frac{v_p}{2D} + \sqrt{\frac{\lambda}{D}}$$

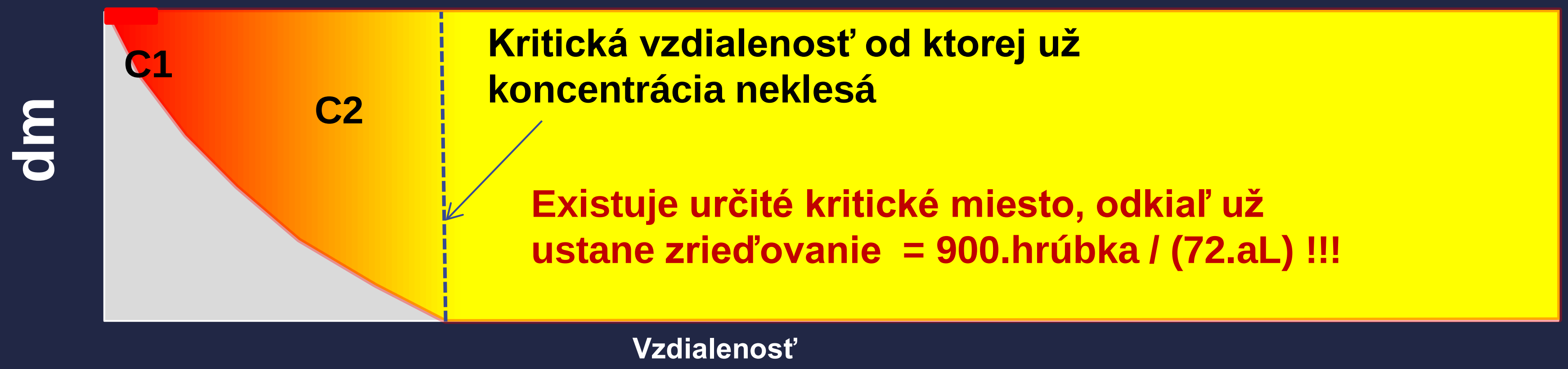
Takéto jednoduché riešenie je v rozpore s riešením rovnice transportu. V riešených úlohách v rámci AR nie je možné nájsť interval parametrov, v ktorom by tieto vzťahy aproximovali riešenie rovníc transportu = rozpor. Proces je oveľa komplikovanejší.

Ak to nie je jasné, dvojica merateľných parametrov s a t je zviazaná vzťahom pre rýchlosť v = s / t.
Inak povedané, vp.t bude v našom prípade vždy konštanta. Koľkokrát zväčším čas, toľkokrát znížim rýchlosť.

Ďalšie paradoxy krokovej metódy

C2 = C1 . 0,25 . dm $\qquad$ **dm = $\sqrt{((72/900).\ aL.\ S)}$**

Aké fyzikálne dôsledky by takýto vzťah pre nahradenie procesu disperzie znamenal?



- **existuje určité kritické miesto, odkiaľ už ustane zrieďovanie = rozpor**
- **z definície dm v krokovej metóde vyplýva, že zrieďovanie nie je závislé od: kf, i, pórovitosti, rýchlosti !!! = zásadný rozpor s fyzikálnou realitou**

Nezodpovedá to ani definícii procesu disperzie, ktorý je z definície kvantitatívne určovaný rýchlosťou, koeficientom disperzivity a gradientom koncentrácií. Tu závislosť na rýchlosti nie je = rozpor

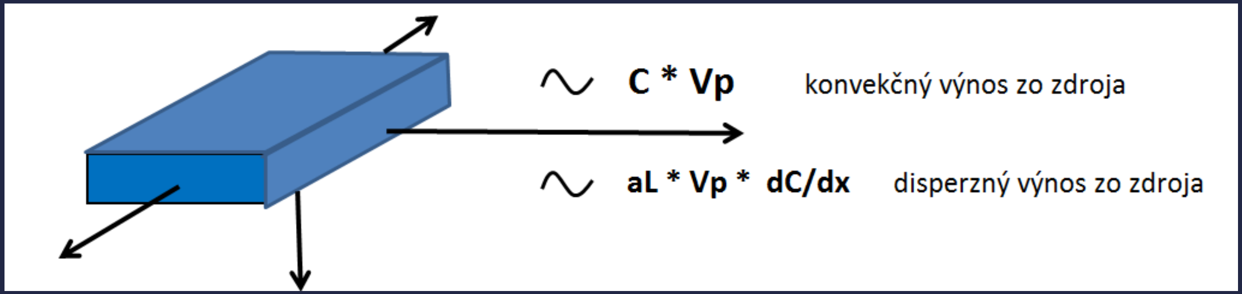
dC/dt = - aL . vp . dC/dx - toto je definícia. Disperzia je **vždy** závislá aj na rýchlosti!!!

Ďalšie paradoxy krokovej metódy

$C2 = C1 \cdot 0{,}25 \cdot Dm$ $\qquad$ $dm = \sqrt{((72/900) \cdot aL \cdot S)}$

- **Výnos zo zdroja znečistenia konvenčným transportom, difúziou a disperziou. Kroková metóda používa len konvenčný transport = rozpor**

Vysvetlenie bolo v predchádzajúcej časti.



- **Na výsledné koncentrácie v krokovej metóde nemá žiaden vplyv rozmer zdroja znečistenia v kolmom smere na smer prúdenia podzemnej vody = rozpor**

Vysvetlenie bolo v predchádzajúcej časti.

Ďalšie paradoxy krokovej metódy

- **Nie je možné transport rátať krokovo. Najprv pokles disperziou a potom rozpadom, prípadne s vplyvom retardácie = rozpor**

  Tieto procesy sa vzájomne ovplyvňujú, viď rovnice transportu

$$\beta = \frac{v_p}{2D} + \sqrt{\frac{\lambda}{D}}$$

$$\frac{C(x,t)}{C_0} = \frac{1}{2} e^{\left(\frac{v_p . x}{2D}\right)} \left[e^{-x\beta} \operatorname{erfc}\left(\frac{x - t.\sqrt{v_p^2 + 4\lambda D}}{2.\sqrt{D.t}} \right) + e^{x\beta} . \operatorname{erfc}\left(\frac{x + t.\sqrt{v_p^2 + 4\lambda D}}{2.\sqrt{D.t}} \right) \right]$$

- **Ak má byť referenčný čas okamžik, kedy príde do referenčného miesta maximálna koncentrácia, tak ho nemôžeme rátať ako čas, za ktorý voda doprúdi do referenčného miesta skutočnou rýchlosťou s vplyvom retardácie. Tam sú veľké rozdiely podľa typu transportu**

- **Atď ...**

Dôsledky

- **Kroková metóda poskytuje zásadne chybné výsledky výpočtov environmentálneho rizika šírenia sa kontaminácie podzemnou vodou.**

- **Napriek tomu smernica umožňuje použiť krokovú metódu pre každý prípad.**

Aj keď odporúča v zložitejších prípadoch použiť model, je to len odporúčanie. Všetky riešenia krokovou metódou prechádzajú cez oponentúru. V tejto situácii modelovanie znamená pre riešiteľov len zbytočné ekonomické straty.

Dôsledkom je, že relevantné riešenia sú vytlačené z trhu a sú nahradené síce lacnými, ale chybnými riešeniami.

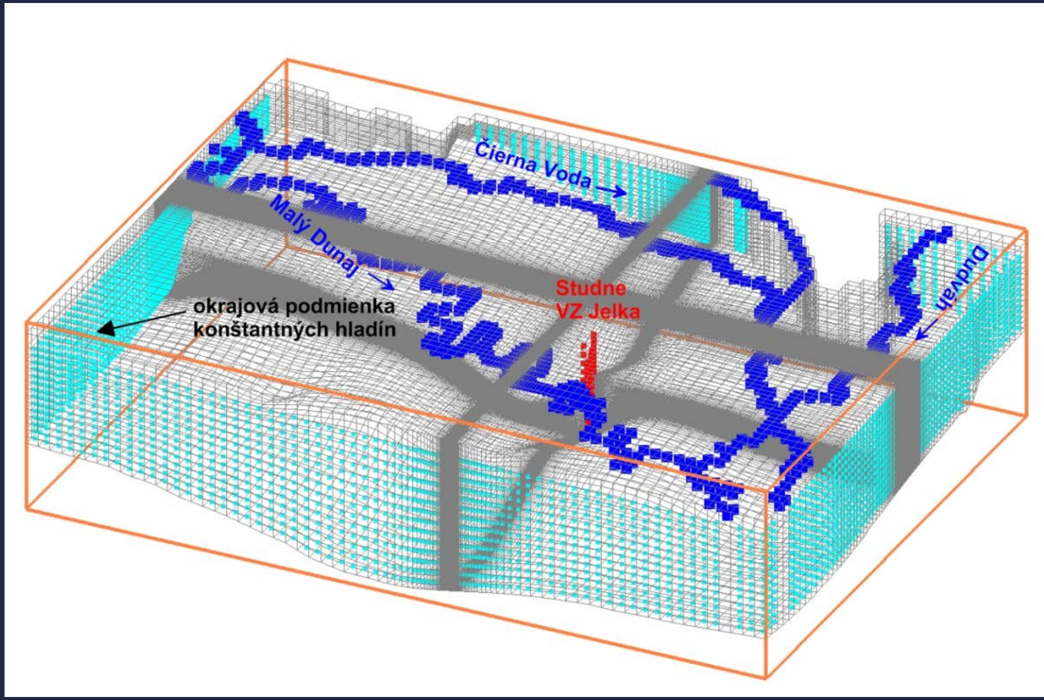
POĎAKOVANIE:

Aj preto sa chcem poďakovať niektorým riešiteľom, že chápu tento problém a aj napriek zložitostiam chcú, aby ich práca bola zmysluplná a aj keď nemusia, investujú aspoň občas do modelových riešení.

NuSi, s.r.o.
Vlčie hrdlo 61
Bratislava

nusi@nusi.sk, www.nusi.sk

Ďakujem za pozornosť



RNDr. Tibor Kovács

Analýza rizika znečisteného územia