



Modelling the transport of petroleum hydrocarbons by soil filter and neural networks method

Monika ŻELEZIK¹, Jarosław GAWDZIK²

¹ Samodzielny Zakład Ochrony i Kształtowania Środowiska, Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach

² Zakład Gospodarki Odpadami, Politechnika Świętokrzyska w Kielcach Tel/fax. +48 41 3424 571

Abstract

The paper deals with the model of hydrocarbons migration in the soil. To assess the risk of ground water contamination by hydrocarbons migrating in the soil-filter model had been applied. Incorporation of RBF neural network into mass transport enables the description of isooctane and cetane transport deep into soil profile.

The model SNN RBF had been used to determine the behaviour of contaminant through soil.

Keywords: hydrocarbons, soil filter, neural networks

Streszczenie

Modelowanie transportu węglowodorów ropopochodnych metodą filtra gruntowego oraz sieci neuronowych.

W pracy zawarto koncepcję modelu migracji węglowodorów w glebie. Do oceny ryzyka skażenia wód gruntowych węglowodorów migrujących zastosowano filtr gruntowy. Do opisu transportu masowego izooktanu i cetanu wykorzystano sieci neuronowe RBF. Model SNN RBF jest pomocny przy ocenie zachowania zanieczyszczeń w gruncie.

Słowa kluczowe: ropopochodne, filtr gruntowy, sieci neuronowe

1. Wstęp

Zmiany jakie występują w poszczególnych elementach środowiska przyrodniczego, to efekt postępu cywilizacyjnego, który wiąże się z nasileniem procesów urbanizacyjnych, rozwojem przemysłu, motoryzacji i rozbudową szlaków komunikacyjnych. Z jednej strony procesy te stanowią wielkie dobrodziejstwo, które pozwala żyć w dobrobycie, z drugiej strony niesie za sobą wiele niebezpieczeństw. Wraz z poziomem urbanizacji rośnie zapotrzebowanie na surowce naturalne i produkty pochodzące z ich przetwarzania, powodując przy tym często nieodwracalne skutki w środowisku przyrodniczym. Znaczącym przykładem takiego stanu rzeczy jest częste występowanie zanieczyszczeń środowiska gruntowo-wodnego substancjami pochodzącymi z przetwarzania ropy naftowej [1-5]. Ropa naftowa jest naturalną mieszaniną węglowodorów ciekłych, gazowych i stałych oraz towarzyszących związków organicznych i nieorganicznych. W 2010 roku w Polsce zużyto ok. 26,5 mln ton produktów naftowych [6]. Zanieczyszczenia ropopochodne to przede wszystkim węglowodory w skład których wchodzi: alkanany (zwane parafinami), alkeny (oleiny), cykloalkany i węglowodory aromatyczne jedno i wielopierścieniowe. Do zanieczyszczeń produktami naftowymi może dochodzić w trakcie długoletniej eksploatacji nieszczelnych instalacji lub wskutek pojedynczych dużych awarii czy kolizji drogowych i kolejowych. Produkty naftowe rozlane na powierzchni gruntu mogą penetrować na duże głębokości [7]. Głównymi źródłami zanieczyszczeń ropopochodnych są: górnictwo naftowe, stacje benzynowe, warsztaty samochodowe, przemysł chemiczny i elektromaszynowy, nawierzchnie asfaltowe, składowiska odpadów. Problemem obecności na powierzchniach utwardzonych jak: parkingi, stacje paliw, jezdnie są przede wszystkim wycieki olejów i smarów, pozostałości po startach nawierzchni i produkty paliw samochodowych [2,4,5]. Odcieki składowiskowe oraz spływy z tras komunikacyjnych i terenów miejskich zawierające rozpuszczalne w wodzie

składniki ropopochodnych z łatwością przedostają się do wód powierzchniowych, a nawet wód podziemnych. Obecność substancji ropopochodnych w środowisku gruntowo-wodnym stanowi poważne niebezpieczeństwo, gdyż powodować może bezpośrednie zagrożenie dla organizmów żywych, w tym człowieka, powodując obciążenie wszystkich ogniw łańcucha pokarmowego. Toksyczność ropopochodnych wynika zarówno z ich właściwości fizycznych, jak i chemicznych. Gęste hydrofobowe oleje powodują blokowanie por gruntów, ograniczając w ten sposób dostęp powietrza do jego głębszych warstw [7]. Ropa naftowa i jej produkty pochodne całkowicie niszczą strukturę koloidalną gleby, prowadząc do zaburzenia jej właściwości fizycznych pierwotnych oraz wtórnych. Ponadto niszczą jej zdolności sorpcyjne, przez co wpływają destrukcyjnie na życie biologiczne środowiska gruntowego [6]. Do wnętrza organizmu węglowodory dostają się poprzez drogi oddechowe, skórę i układ pokarmowy [1,6,7]. Węglowodory ropopochodne, jak: benzen, toluen, ksyleny, to substancje należące do grupy związków niebezpiecznych, które wskutek bezpośredniego wchłaniania, zwłaszcza przez spożycie zanieczyszczonej wody, mogą stać się przyczyną ostrych zatruc lub przewlekłych chorób. Mogą wywoływać podrażnienia skóry i oczu, uszkadzać nerki, wątrobę, a nawet centralny układ nerwowy. W przypadku tej grupy związków istnieje uzasadnione naukowo niebezpieczeństwo mutagennego i kancerogennego oddziaływania na organizm ludzki [2,4,5]. W przypadku zanieczyszczeń środowiska gruntowo-wodnego konieczne jest podjęcie zdecydowanych działań. Są one związane z eliminacją zagrożenia jakie niesie za sobą zanieczyszczenie węglowodorami ropopochodnymi. Ważne staje się zatem określenie zasięgu zanieczyszczeń, co pozwala na określenie obszaru objętego zanieczyszczeniem, głębokości migracji i intensywności skażenia. Pozwoli to na podjęcie kolejnych działań mających na celu ograniczenie rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń i obniżenie ich koncentracji.

2. Materiał i metody

Atrakcyjną metodą modelowania rozprzestrzeniania się substancji ropopochodnych w ośrodku porowatym jest wykorzystanie sztucznych sieci neuronowych. Przesyłanie informacji w sztucznych sieciach neuronowych imituje zachowanie się ludzkiego systemu nerwowego [2]. Neurony, z których składa się sieć, są jednostkami przetwarzania danych. Sztuczna sieć neuronowa (SSN) oblicza wartości wyjściowe na podstawie informacji podanych na wejściu do sieci.

Formuła opisująca działanie neuronu wyraża się zależnością [8]:

$$y_i = f\left(\sum_{i=1}^n x_i w_i\right) \quad (2.1)$$

gdzie:

n – liczba wejść w neuronie,

x_i – sygnały wejściowe,

w_i – wagi synaptyczne,

y_i – wartość wyjściowa neuronu,

f – funkcja aktywacji

Funkcja opisana równaniem (2.1) jest nazywana funkcją aktywacji, która jest odpowiedzialna za przesyłanie informacji. Model ten jest bardzo prosty i od 1943 r. prace nad sztucznymi sieciami neuronowymi rozwijały się dosyć szybko, czego konsekwencją jest obecnie możliwość ich wykorzystania w modelowaniu wielu procesów dynamicznych (9).

Poszczególne połączenia między neuronami mają określone, przyjęte na początku, wartości wag, które są modyfikowane w procesie uczenia sieci. Znanych jest wiele typów SSN, ale obecnie najbardziej popularnym rodzajem sieci neuronowej jest perceptron wielowarstwowy z jedną warstwą wejściową, jedną (lub więcej) warstwą ukrytą i pojedynczą warstwą wyjściową. Atrakcyjność stosowania SSN związana jest głównie z możliwością aproksymacji dowolnych nieliniowości. Do stworzenia modelu sieci nie jest konieczna znajomość postaci funkcji opisującej modelowaną zmienną. Ponadto sztuczne sieci neuronowe łatwo adaptują się do zmiennych warunków środowiskowych [4]. Ponieważ modelowanie za pomocą sztucznych sieci neuronowych jest uznawane za podejście typu „czarna skrzynka”, dlatego nie jest możliwe „przyjęcie z góry” optymalnej architektury sieci. Do odpowiedniej struktury sieci – w celu rozwiązania konkretnego zagadnienia inżynierskiego – dochodzi się metodą prób i błędów. Znanych jest wiele przykładów zastosowania symulacji matematycznych

wykorzystujących SSN do prognozowania wartości zmiennych parametrów. Najważniejszą cechą sieci neuronowej jest generalizacja. Sieć "uczymy" na pewnym zbiorze danych, który zawiera tylko część możliwych wartości wejściowych. Sieć przy innych wartościach wejściowych powinna jak najlepiej odwzorowywać wartość wyjściową. Pojawia się problem, tzw. przeuczenia sieci. Tracimy wtedy zdolność generalizacji ponieważ sieć jest zbyt dobrze "nauczona". Czyli podaliśmy na wejście bardzo dużo próbek i uczyliśmy ją długi czas. Dla próbek uczących zminimalizowaliśmy błąd wyjściowy ale gdy podamy na wejście sieci podczas pracy inne wartości błędy na wyjściu będą duże.

Spośród wielu typów i rodzajów sieci neuronowych różniących się między sobą strukturą oraz zadaniami wybrano perceptron wielowarstwowy. Biorąc pod uwagę przyjęte założenia, stworzono 5 modeli sztucznych sieci neuronowych, których główne parametry po procesie uczenia przedstawiono w tabeli 4.1.

Sieci neuronowe uczono na 100 przypadkach będących wektorami uczącymi. Program losowo wybierał dane do zbioru uczącego, walidacyjnego oraz testowego. Do uczenia sieci wybrano zmienne sterujące:

- stężenie w roztworze glebowym: izooktan, n-heksadekan
- czas,
- głębokość penetracji.

3. Model filtra gruntowego

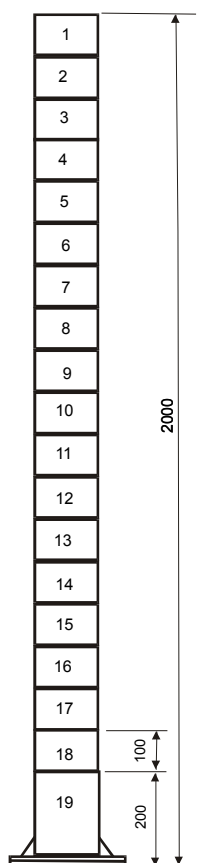
Modelowanie gruntów w postaci filtrów piaskowych spotyka się w literaturze krajowej [2,4,5] i zagranicznej [10,11]. W celu symulacji warunków rzeczywistych skonstruowano model filtra gruntowego (rys.3.1) w kształcie kolumny o średnicy $\phi = 135$ mm oraz wysokości $H = 2000$ mm, wykonany z polipropylenu i wypełniono piaskiem $d_c = 0.315$ oraz $K_r = 1.6$. Piasek pochodził z kopalni piasku w Borowej Górze i w Opolu. Piasek z tych dwóch źródeł został wymieszany w proporcji 1:1 i wysuszony w temperaturze 105°C w celu wyeliminowania wilgotności przemijającej (rys.3.2).

Kolumna posiada budowę segmentową i składa się z cylindrycznych elementów o wysokości 100 mm. Model filtra gruntowego jest zbudowany z 18 jednakowych komórek badawczych, jak pokazano na rys.3.1, numerowanych od góry.

Funkcja zawartości węgłowodoru w modelu filtra gruntowego $C_i(z, t)$ jest możliwa do wyznaczenia poprzez pomiar zawartości badanego węgłowodoru w każdym z 18 segmentów kolumny w zależności od założonego czasu migracji. Ponadto, w komórce nr 19 umieszczono żwirową warstwę podtrzymującą złożę piaskowe. Zaplanowano badania rozkładu zawartości wybranego węgłowodoru na filtrze gruntowym po jednej dobie od momentu wprowadzenia zanieczyszczenia na filtr gruntowy.

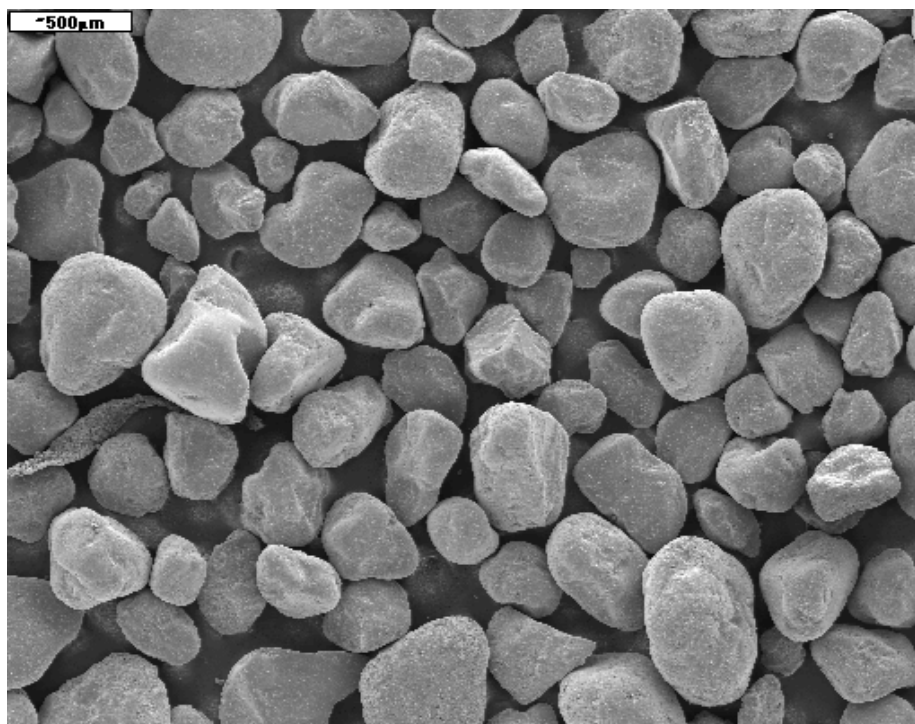
Kolejne eksperymenty polegały na wydłużeniu czasu migracji substancji ropopochodnych w gruntach, po którym przeprowadzano oznaczenia zawartości tych substancji w poszczególnych segmentach kolumny. Badania wykonano odpowiednio po czasie ekspozycji węgłowodorów: 1, 2, 4, 8 i 16 dobach.

Przyjęcie takiego schematu badań jest efektem optymalizacji serii eksperymentów prowadzonych przez autora na filtrze gruntowym w układzie piasek – izooktan [10-11].



$$\phi = 135$$

Rys. 3.1 Model filtra gruntowego wykorzystanego w badaniach



Rys. 3.2 Fotografia wysortowanego piasku wykonana w mikroskopie skaningowym przy powiększeniu x 35.

4. Wyniki i dyskusja

W tabeli 4.1 zamieszczono wyniki testowania sieci które przeprowadzono na zbiorze testowym zawierającym 20 losowo dobranych przypadków. Dla sieci wybrano 200 kroków uczenia z wsteczną propagacją błędów.

Funkcję błędu \bar{A} wyliczano metodą sumy kwadratów różnic (SOS - sum of squares) (4.2) dla sieci Multilayer Perceptron (MLP) i dla sieci o radialnych funkcjach bazowych (RBF) metodą SOS i CE (Cross Entropy – funkcja błędu w postaci entropii wzajemnej w równaniu 4.3) [12].

$$\bar{A}_{SOS} = \sum_{i=1}^n (y_i - t_i)^2 \quad (4.2)$$

$$\bar{A}_{CE} = - \sum_{i=1}^n t_i \ln \frac{y_i}{t_i} \quad (4.3)$$

gdzie:

\bar{A} -funkcja błędu

y_i -wartość przewidywana sieci

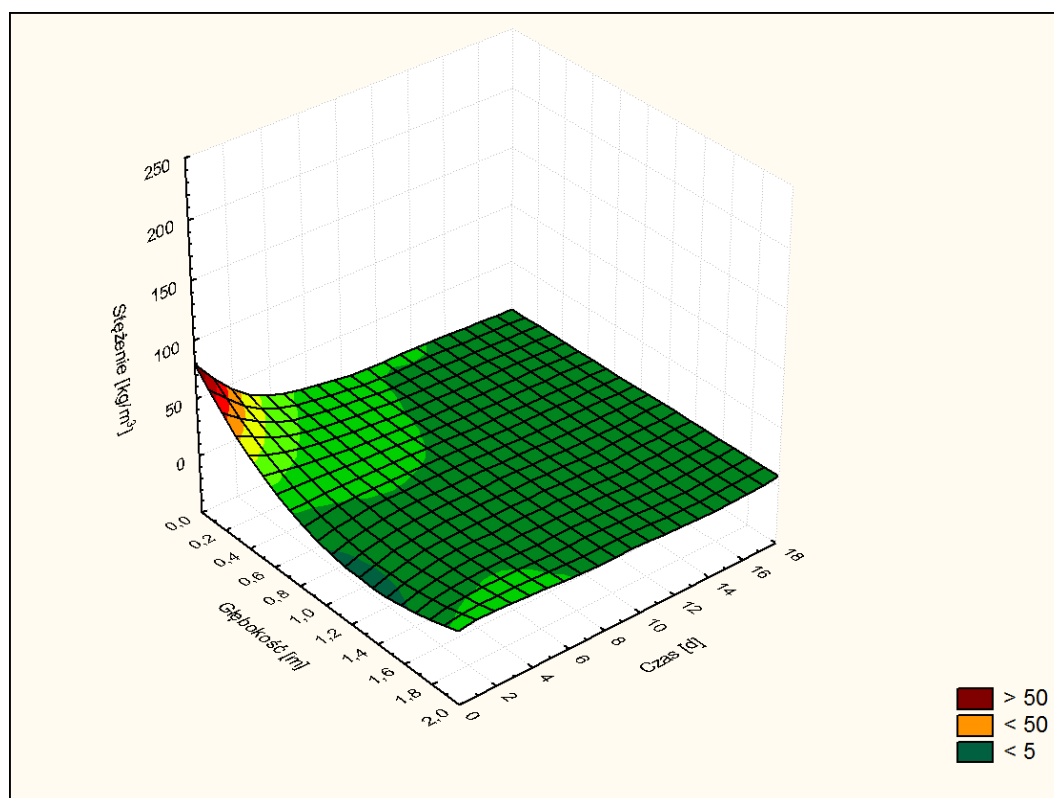
t_i -wartość rzeczywista

Tabela 4.1 Główne parametry wybranych struktur sztucznych sieci neuronowych regresyjnych – radialnych i MLP

Nazwa sieci	Jakość uczenia	Jakość testowania	Jakość walidacji	Błąd uczenia	Błąd testowania	Błąd Walidacji	Algorytm uczenia
RBF 2-20-2	0,915460	0,980191	0,962939	0,627505	0,819206	0,413549	RBF (najkrótszej ścieżki)
MLP 2-3-2	0,815796	0,953383	0,963519	1,638032	1,818049	2,564770	BFGS (Quasi-Newtona)
MLP 2-4-2	0,852692	0,990817	0,990373	0,313312	0,104298	0,095868	BFGS (Quasi-Newtona)
MLP 2-9-2	0,999593	0,991690	0,997968	0,5621	0,79067	0,744056	BFGS (Quasi-Newtona)
MLP 2-12-2	0,999011	0,993748	0,999196	1,3482	0,78251	0,388347	BFGS (Quasi-Newtona)

Spośród wszystkich modeli wybrano sieć RBF 2-20-2.

Na rysunku 4.1÷4.2. przedstawiono rozkład zawartości izooktanu oraz heksadekanu w modelu SNN RBF 2-20-2. Rozkład zawartości rzeczywistej izooktanu wyznaczono metodą filtra gruntowego i przedstawiono w tabeli 4.2.

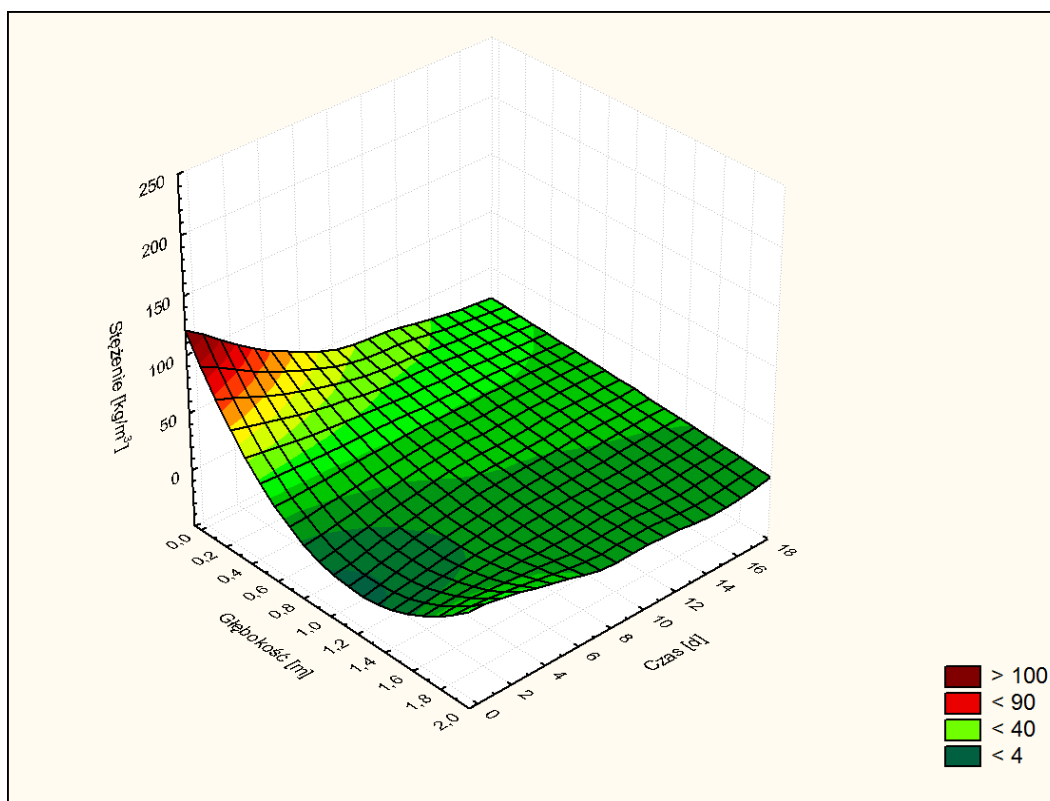


Rys. 4.1. Rozkład zawartości izooktanu w modelu SSN RBF 2-20-2

Tabela 4.2. Rozkład zawartości izooktanu w modelu filtra gruntowego po ośmiu dniach dla prawdopodobieństwa $1-\alpha = 0,95$ (grunt nr 1) i przy stężeniu początkowym $C_0=290 \text{ kg/m}^3$

Głębokość migracji, z [m]	Kwadrat głębokości migracji, x [m ²]	Zawartość C_i [kg/m ³]	Granice przedziału ufności wg Studenta-Fischera [kg/m ³]
0,05	0,0025	33,0	4
0,15	0,0225	33,3	4
0,25	0,0625	31,0	5
0,35	0,1225	27,3	4
0,45	0,2025	24,5	6
0,55	0,3025	24,3	2
0,65	0,4225	21,5	3
0,75	0,5625	19,9	4
0,85	0,7225	19,5	8
0,95	0,9025	13,2	4
1,05	1,1025	8,5	6
1,15	1,3225	7,5	5
1,25	1,5625	7,3	1
1,35	1,8225	7,5	2
1,45	2,1025	3,1	2
1,55	2,4025	2,9	1
1,65	2,7225	4,0	4
1,75	3,0625	0,6	1

Jak to wykazano na rysunku 4.2 sieci w podobny sposób prognozowały zmienność stężenia cetanu w gruncie.



Rys. 4.2 Rozkład zawartości heksadekanu (cetanu) w modelu SSN RBF 2-20-2

5. Wnioski

Przy modelowaniu zjawisk należy zawsze szukać rozwiązań możliwie najprostszycy bowiem im bardziej złożony jest model, tym trudniejsza jest jego interpretacja. Doskonałym przykładem na powyższe są sztuczne sieci neuronowe które wpisują się znakomicie w trend zapotrzebowania na sprawne systemy przewidywania złożonych zjawisk i procesów. Do takich procesów zaliczamy niewątpliwie migrację substancji ropopochodnych w gruncie. Proces ten można poprawnie symulować wykorzystując perceptronowe sieci wielowarstwowe (MPL) lub sieci neuronowe o radialnych funkcjach bazowych (RBF). Brak idealnej zgodności świadczy jedynie o tym, że nie należy bezgranicznie ufać wynikom modelowania i czasami należy do nich podejść sceptycznie. Nie zmienia to jednak faktu, że SSN są obiecującym narzędziem ułatwiającym matematyczne modelowania dynamicznie zmieniających się w czasie parametrów procesowych.

Podziękowanie

Autorzy składają podziękowania Panu Łukaszowi Lechowiczowi z Zakładu Mikrobiologii Uniwersytetu Jana Kochanowskiego w Kielcach za pomoc techniczną w trakcie badań.

Literatura

1. Alloway B.J., Ajres D.C. 1998. Chemiczne podstawy zanieczyszczenia środowiska, PWN W-wa
 2. Gawdzik J., 2008. Dyfuzyjny model transportu węglowodorów ropopochodnych w gruntach. Gaz, Woda i Technika Sanitarna, nr 1, 7-10
 3. GUS 2011
 4. Fąfara Z., 2006. Porównanie filtracji wybranych substancji ropopochodnych w fizycznym modelu gruntu. Wiertnictwo, Nafta Gaz t. 23/1, 183-189
 5. Fąfara Z., Miska W. 2005. Rozpraszanie zanieczyszczeń ropopochodnych w gruncie w świetle badań laboratoryjnych. Wiertnictwo, Nafta Gaz, t.22/1, 127-134
 6. Nowak J., 2008. Bioremediacja gleby z ropy i jej produktów Biotechnologia, nr 1, 97-108
 7. Ziółkowski A., Wyszowski M., 2008. Możliwości rekultywacji gleb zanieczyszczonych substancjami ropopochodnymi, tom 60, nr 4-5, 33-45
 8. Rutkowska D., Piliński M., Rutkowski L. 1997: Sieci neuronowe, algorytmy genetyczne i systemy rozmyte, Wydawnictwo Naukowe PWN
 9. Tadasiewicz R., 1993: Sieci neuronowe. Akademyka oficyna wydawnicza RM, Warszawa
 10. Żygadło M., Gawdzik J. 2010: Modeling the transport of petroleum products by soil filter method, Polish Journal of Environmental Studies vol. 19, No 4, 841–847.
 11. Żygadło M., Gawdzik J. 2010: Modelling transport of hydrocarbons in soil-water environment, Ecological Chemistry and Engineering S 17(3), 331–343.
 12. Neugebauer M., Piechocki J., Sołowiej P. 2010: Predykcja zmian temperatury dla złoża kompostu w zależności od stopnia napowietrzenia przy pomocy sztucznych sieci neuronowych, Inżynieria Rolnicza 3(121).
-