

ZASTOSOWANIE METODY MONTE CARLO DO MODELOWANIA MIGRACJI ZANIECZYSZCZEŃ DO UJĘĆ WÓD GRUNTOWYCH

THE USE OF THE MONTE CARLO METHOD IN MODELLING OF CONTAMINANT MIGRATION TO GROUNDWATER INTAKES

STANISŁAW MACIEJEWSKI¹, HENRYK ZARADNY¹

Abstrakt. Prognozowanie dopływu zanieczyszczeń do ujęć wody podziemnej, zbiorników wody i cieków ma duże znaczenie praktyczne, dlatego ciągle poszukuje się efektywnych sposobów matematycznego modelowania tego typu zagadnień. Jednym ze sposobów modelowania jest zastosowanie metody Monte Carlo do rozwiązywania równań różniczkowych, w tym przypadku równania dyspersji hydrodynamicznej. Metoda ta ma wiele zalet: jest nieskomplikowana, nie generuje dyspersji numerycznej związanej z członem konwekcyjnym w równaniu transportu, pozwala w prosty sposób oszacować ładunek zanieczyszczeń docierających do studni, cieków itp., ponadto nie jest czuła na błędy związane z przybliżonym (np. numerycznym) rozwiązaniem równania transportu wody. W pracy przedstawiono zastosowanie metody Monte Carlo do rozwiązania nieustalonego zagadnienia przepływu zanieczyszczeń w obszarze z ustalonym polem prędkości wody gruntowej. Do wyznaczenia pola ciśnień hydrodynamicznych w obszarze ruchu zastosowano metodę elementów skończonych.

Słowa kluczowe: ośrodki porowate, wody podziemne, zanieczyszczenia, modelowanie matematyczne, metoda Monte Carlo.

Abstract. Prediction of contaminant inflow to groundwater intakes and water reservoirs is a very important problem from the practical point of view. Development of efficient modelling methods for such problems is still a subject of intense research. A possible approach is to use the Monte Carlo method to solve partial differential equations (hydrodynamic dispersion equation). This method has significant advantages: it is uncomplicated, it does not generate numerical dispersion connected with convection term, and it allows for a simple estimation of the contaminant load entering wells, streams etc. Moreover, the Monte Carlo method is not sensitive to the errors related to the approximate (numerical) solution of the equation describing groundwater flow. In this paper the application of the Monte Carlo method to solve unsteady contaminant transport in a steady groundwater velocity field is presented. The groundwater pressure heads and velocities are computed using the finite element method.

Key words: porous media, groundwater, contamination, mathematical modelling, Monte Carlo method.

WSTĘP

Teoretyczny model transportu zanieczyszczeń w gruntach opisany jest dwoma sprzężonymi równaniami różniczkowymi o pochodnych cząstkowych, z których pierwsze opisuje ruch wody w gruncie, a drugie zmiany koncentracji substancji w niej rozpuszczonej. Zanieczyszczenia w gruncie poruszają się wraz z wodą gruntową, podczas przepływu

następuje proces mieszania powodujący spadek koncentracji zanieczyszczenia. Niezbędna jest więc znajomość pola prędkości przepływu wody dla określenia transportu konwekcyjnego. Mieszanie natomiast opisane jest członem dyspersyjnym w równaniu transportu.

¹ Polska Akademia Nauk, Instytut Budownictwa Wodnego, ul. Kościarska 7, 80-328 Gdańsk; email: macstan@ibwpan.gda.pl

RÓWNANIE OPISUJĄCE PRZEPIY WODY

Do opisu płaskiego w planie ruchu wody w nasyconej warstwie wodonośnej stosuje się równanie Boussinesqa (m.in. Bear, 1972), które dla przypadku przepływu ustalonego przyjmuje postać:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[k_{ij} (h - z_s) \frac{\partial h}{\partial x_j} \right] + q = 0 \quad [1]$$

gdzie:

- h – położenie zwierciadła wody gruntowej, [m]
- z_s – położenie spagu warstwy nieprzepuszczalnej, [m]
- k_{ij} – składowa tensora przewodności hydraulicznej, [m/d]
- q – człon źródłowy, [m/d]
- x_i, x_j – zmienne przestrzenne ($i, j = 1, 2$).

Równanie [1] pozwala wyznaczyć rozkład ciśnień hydrodynamicznych w obszarze ruchu dla założonych warunków brzegowych.

Rozwiązanie równania [1] uzyskano metodą wariacyjną za pomocą metody elementów skończonych z użyciem elementów czworokątnych (Zaradny, Martuszevska, 1986; Zaradny, Stańczyk, 1988). Wyznaczone w ten sposób pole ciśnień hydrodynamicznych pozwoliło wyznaczyć pole prędkości przepływu wody gruntowej v , korzystając z prawa Darcy:

$$v_i = -\frac{k_{ij}}{n} \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad [2]$$

gdzie:

- n – porowatość, [-].

Obliczone wartości położenia zwierciadła wody gruntowej i prędkości przepływu w węzłach siatki obliczeniowej stanowiły dane wejściowe do modelu transportu zanieczyszczeń.

RÓWNANIE TRANSPORTU ZANIECZYSZCZEŃ

Transport zanieczyszczeń w nasyconej wodą warstwie wodonośnej opisany jest równaniem dyspersji hydrodynamicznej (m.in. Bear, 1972):

$$\frac{\partial [(h - z_s)C]}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} (h - z_s) \frac{\partial C}{\partial x_j} - v_i (h - z_s) C \right] + S \quad [3]$$

gdzie:

- C – koncentracja zanieczyszczenia w wodzie gruntowej, [kg/m³]
- D_{ij} – składowa tensora dyspersji hydrodynamicznej, [m²/d]
- S – człon źródłowy, [kg·m⁻²·d⁻¹].

Równanie dyspersji hydrodynamicznej rozwiązano za pomocą metody Monte Carlo. Omówienie tej metody oraz jej zastosowanie znaleźć można w wielu pracach, m.in.: Kinzelbach (1988), James i Oldenburg (1997), Marseguerra i Zio (1997, 2001), Ballio i Guadagnini (2004).

Rozwiązanie równania dyspersji zanieczyszczeń metodą Monte Carlo polega na znalezieniu stochastycznego równania Ito odpowiadającego równaniu transportu [3] (Papoulis, 1972). Równanie Ito dla omawianego zagadnienia możemy zapisać w postaci:

$$dx_i = m_i dt + \sigma_{ik} dB_k \quad [4]$$

gdzie B_k jest procesem Wienera, będącego modelem teoretycznym ruchów Browna, a związek między składowymi tensora σ i tensora D ma postać:

$$2D_{ij} = \sigma_{ik} \sigma_{kj} \quad [5]$$

natomiast m_i jest określone równaniem:

$$m_i = v_i + \frac{\partial D_{ij}}{\partial x_j} + \frac{D_{ij}}{h - z_s} \frac{\partial (h - z_s)}{\partial x_j} \quad [6]$$

Analog różnicowy równania Ito ma postać:

$$\Delta x_i = m_i \Delta t + \sigma_{ik} V_k \sqrt{\Delta t} \quad [7]$$

gdzie:

- V_k – zmienna losowa o rozkładzie normalnym, o wartości oczekiwanej równej 0 i wariancji równej 1, [-]

- Δt – krok czasowy, [d].

Rozwiązanie tak postawionego zagadnienia polega na symulacji numerycznej procesu stochastycznego opisanego równaniem Ito. Całość zanieczyszczenia dzieli się na n równych wirtualnych cząstek, a następnie oblicza się ich kolejne położenia w kolejnych krokach czasowych, posługując się wzorem [7]. Znając rozkład położenia poszczególnych cząstek, możemy wyznaczyć pole koncentracji zanieczyszczeń w obszarze.

PRZYKŁAD OBLICZEŃ

Aby zademonstrować możliwości proponowanej metody, przeprowadzono przykładowe obliczenia. Na figurze 1 przedstawiono schemat obszaru oraz przyjęty podział na siatkę elementów czworokątnych. Siatkę tę użyto w metodzie elementów skończonych do wyznaczenia położenia zwierciadła wody gruntowej. Jako warunek brzegowy przy-

jęto zadaną funkcję w miejscach, gdzie brzeg obszaru stanowił ciek lub zbiornik wody, oraz zerową wartość pochodnej funkcji (n – kierunek normalny do brzegu), za pomocą której modelowano brak przepływu na pozostałym brzegu obszaru.

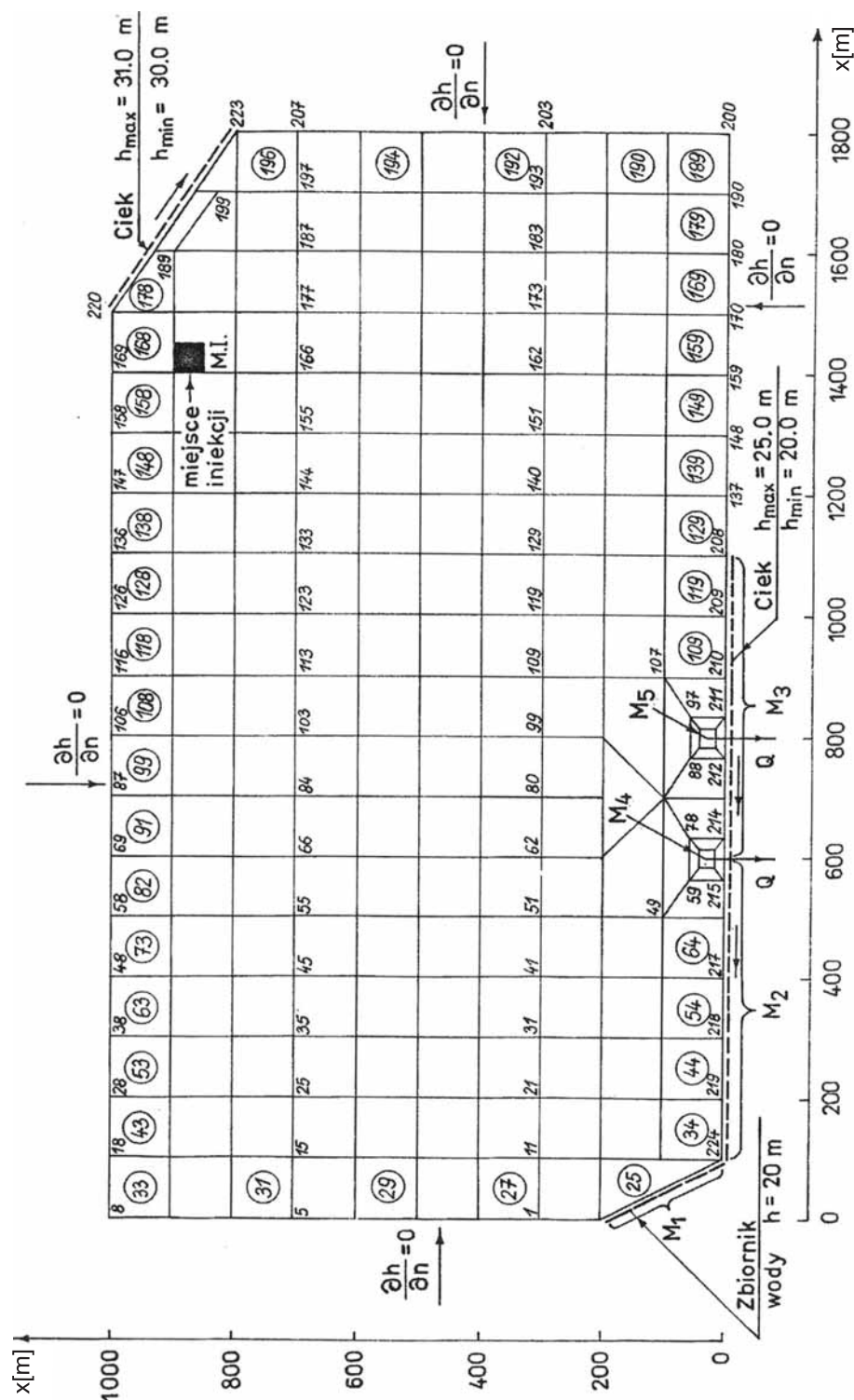


Fig. 1. Schemat obszaru badań i siatka elementów czworokątnych

Calculation area and the network of quadrangular elements

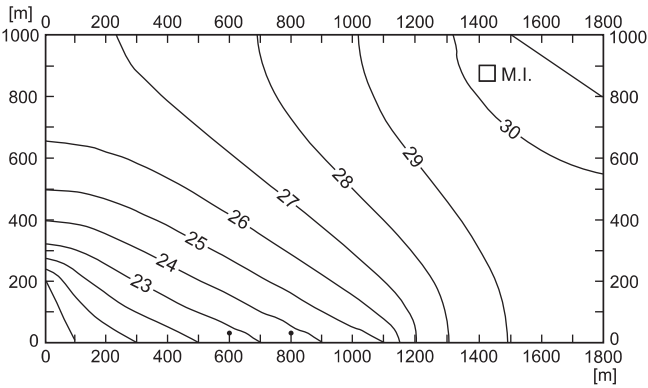


Fig. 2. Linie equipotencjalne dla $Q = 0$, $k = 5$ m/d

Equipotential lines for $Q = 0$, $k = 5$ m/d

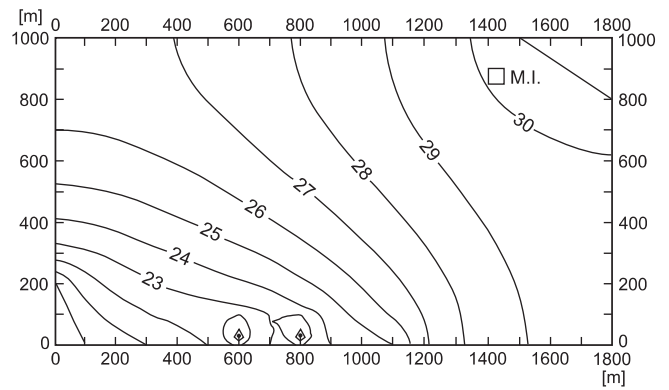


Fig. 3. Linie equipotencjalne dla $Q = 1000$ m³/d, $k = 5$ m/d

Equipotential lines for $Q = 1000$ m³/d, $k = 5$ m/d

Obliczenia przeprowadzono dla izotropowej warstwy wodonośnej o współczynniku przewodności hydraulicznej $k = 5$ m/d, położonej na horyzontalnej warstwie nieprzepuszczalnej, $z_s = 0$. Na całym obszarze przyjęto stały dopływ powierzchniowy q symulujący opady ($q(x,y) = 10^{-3}$ m/d). Rozpatrywano dwa przypadki ruchu: pierwszy to przepływ „naturalny”, natomiast w drugim założono działanie dwóch stu-

dni. Wydajność każdej studni przyjęto $Q = 1000$ m³/d. Dla obu przypadków na podstawie wyznaczonego pola ciśnień hydrodynamicznych obliczono ze wzoru [2] pole prędkości przepływu wód gruntowych.

Metodą Monte Carlo obliczono rozkłady gęstości zanieczyszczenia. Zanieczyszczenie to zostało jednorazowo zainiekwowane w warstwie wodonośnej w obszarze zaznaczonym

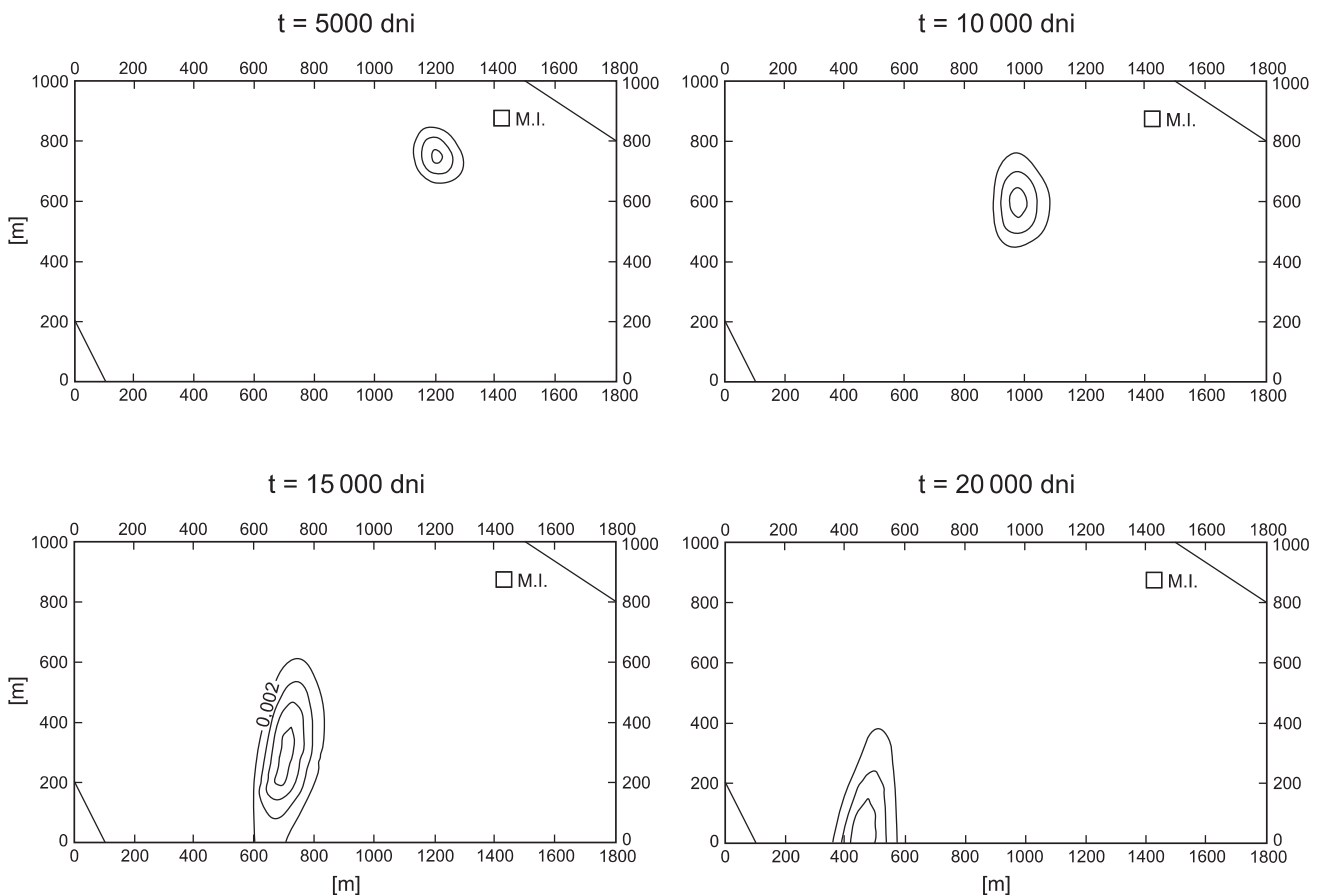


Fig. 4. Rozkład koncentracji zanieczyszczeń dla $Q = 0$

Distribution of contaminant concentration for $Q = 0$

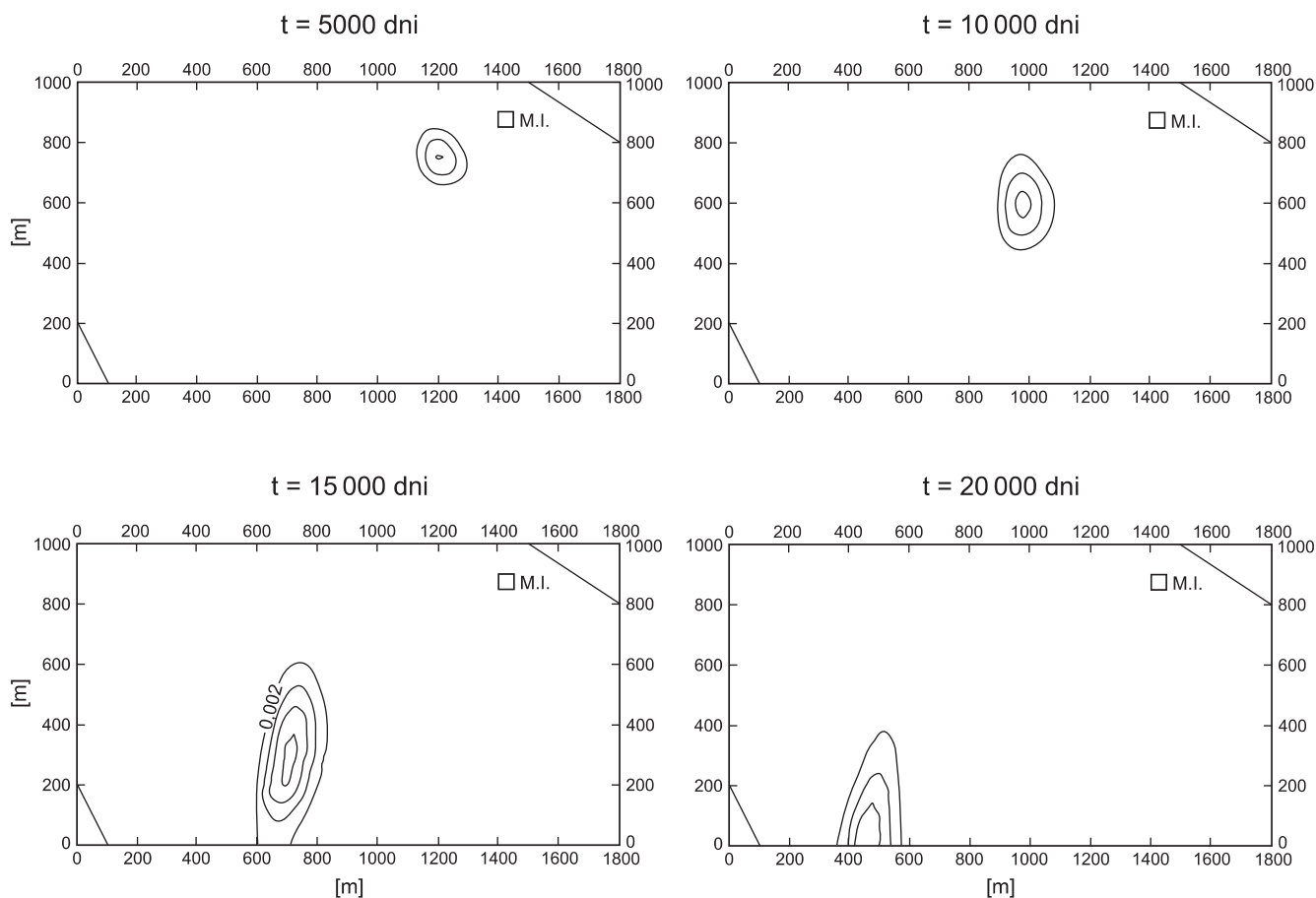


Fig. 5. Rozkład koncentracji zanieczyszczeń dla $Q = 1000 \text{ m}^3/\text{d}$

Distribution of contaminant concentration for $Q = 1000 \text{ m}^3/\text{d}$

na figurze 1 oraz na figurach 4 i 5 przedstawiających zmiany koncentracji zanieczyszczenia. Przyjęto, że masa zanieczyszczenia, które dostało się do gruntu w chwili $t = 0$, wynosiła $M = 1$. Masę tę podzielono na 100 000 cząstek i symulowano ruchy tych cząsteczek, korzystając ze wzorów [6] i [7]. Założono, że współczynniki dyspersji podłużnej i poprzecznej były równe i wynosiły $D_L = D_T = 0,01 \cdot |v| + D_d$, gdzie D_d – dyspersja molekularna w gruncie (założono $D_d = 3,225 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{d}$).

Wyznaczone izolinie zwierciadła wody gruntowej pokazane są na figurach 2 i 3, natomiast rozkłady koncentracji zanieczyszczenia wybranych czasów na figurach 4 i 5. Rozkłady koncentracji zanieczyszczenia zilustrowano dla $t = 5000$, $10\ 000$, $15\ 000$ i $20\ 000$ dni, dla przypadku gdy studnie nie są czynne ($Q = 0,0 \text{ m}^3/\text{d}$) i gdy pracują ($Q = 1000 \text{ m}^3/\text{d}$). Izolinie mają następujące wartości (idąc od wnętrza każdego pola koncentracji):

- dla $t = 5000$ dni: 0,03; 0,02 i 0,01;
- dla $t = 10\ 000$ dni: 0,015; 0,010 i 0,005;
- dla $t = 15\ 000$ dni: 0,008; 0,006; 0,004 i 0,002;
- dla $t = 20\ 000$ dni: 0,0015; 0,0010 i 0,0005.

Ponieważ w miarę upływu czasu następuje rozcieńczenie zanieczyszczenia, to dla poszczególnych czasów na figurach 4 i 5 przedstawiono izolinie o coraz mniejszych wartościach koncentracji.

Na figurze 6 przedstawiono masę zanieczyszczenia docierającego do pierwszego i drugiego odcinka rzeki (M_2 , M_3). Obliczenia pokazały, że zanieczyszczenie do zbiornika

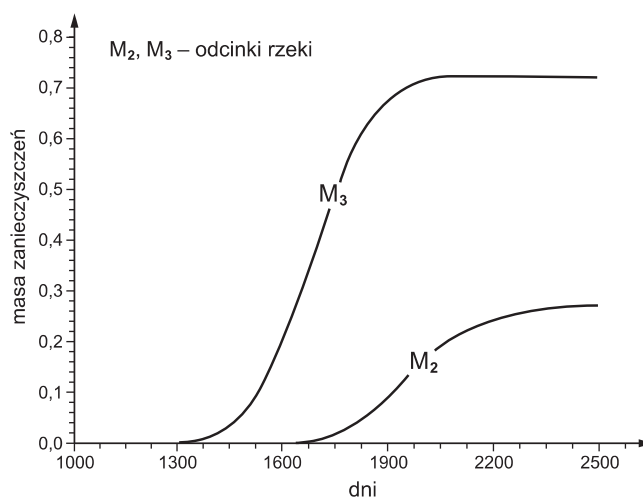


Fig. 6. Sumaryczny dopływ zanieczyszczenia do ciekłu dla $Q = 0$ ($M_1 = 0$)

Total load of contaminant entering a stream for $Q = 0$ ($M_1 = 0$)

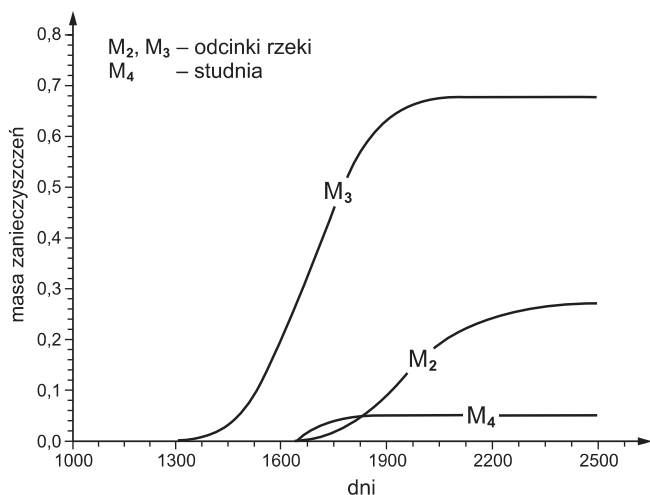


Fig. 7. Sumaryczny dopływ zanieczyszczenia do cieków i studni dla $Q = 1000 \text{ m}^3/\text{d}$ ($M_1 = 0$ i $M_5 = 0$)

Total load of contaminant entering a stream and wells for $Q = 1000 \text{ m}^3/\text{d}$ ($M_1 = 0$ and $M_5 = 0$)

wody może dostać się wyłącznie poprzez ciek, transport z wód podziemnych $M_1 = 0$. Na figurze 7 zilustrowano dopływy zanieczyszczeń dla przypadku, w którym studnie są czynne ($Q = 1000 \text{ m}^3/\text{d}$). Zanieczyszczenie dotrze do pierwszej studni (bliżej zbiornika wody $M_4 > 0$), natomiast do drugiej studni i odcinka pierwszego nie dotrze ($M_1 = M_5 = 0$). Gdy znamy dopuszczalny ładunek zanieczyszczenia M_{dop} , możemy określić stopień zagrożenia ($M > M_{\text{dop}}$), a także określić czas, w którym założona dawka zanieczyszczenia (np. $M = M_{\text{dop}}$) dotrze do poszczególnych studni, odcinków rzek itp. (fig. 7).

Przeprowadzając dalsze obliczenia, można by uzyskać najkorzystniejsze położenie studni dla założonej lokalizacji iniekcji lub najmniej szkodliwą lokalizację źródła zanieczyszczenia w stosunku do założonego położenia studni.

PODSUMOWANIE

Przedstawione przykładowe obliczenia ilustrują możliwość stosowania metody Monte Carlo do prognozowania transportu zanieczyszczeń w wodach gruntowych. Metoda ta pozwala na określenie zagrożenia ujęć wody, określenie dopływu substancji chemicznych do cieków, zbiorników wodnych itp. Możliwe jest również wykorzystanie tej metody do poszukiwań optymalnych miejsc składowania zanieczysz-

czeń lub optymalnego ujęcia wody oraz do analizy skuteczności projektów ochrony wód przed zanieczyszczeniem, takich jak bariery studzien, rowy opaskowe, drenaże, przesłony absorbujące zanieczyszczenie itd. Metoda ta wraz z metodą elementów skończonych, stosowaną do wyznaczania ciśnień hydrodynamicznych, jest bardzo wygodnym narzędziem obliczeniowym.

LITERATURA

- BEAR J., 1972 – Dynamics of fluids in porous media. American Elsevier Publishing Co., New York.
- BALLIO F., GUADAGNINI A., 2004 – Convergence assessment of numerical Monte Carlo simulations in groundwater hydrology. *Water Resour. Res.*, **40**.
- JAMES A.L., OLDENBURG C.M., 1997 – Linear and Monte Carlo uncertainty analysis for subsurface contaminant transport simulation. *Water Resour. Res.*, **33**, 11: 2495–2508.
- KINZELBACH W., 1988 – The randomwalk method in pollutant transport simulations, in groundwater flow and quality modelling. *NATO ASI series C. Mathematical and Physical Sciences*, **224**.
- MARSEGUERRA M., ZIO E., 1997 – Modelling the transport of contaminants in groundwater as a branching stochastic process. *Ann. Nucl. Energy*, **24**, 8: 625–644.
- MARSEGUERRA M., ZIO E., 2001 – Mathematics and computers in simulation. IMACS sponsored Special issue on the second IMACS seminar on Monte Carlo methods, vol. 55, Issue 1–3: 167–176.
- PAPOULIS A., 1972 – Prawdopodobieństwo, zmienne losowe i procesy stochastyczne. WNT, Warszawa.
- ZARADNY H., MARTUSZEWSKA H., 1986 – Model obszarowej filtracji dla dowolnie złożonych warunków gruntowych i brzegowych. *W: Problemy hydrogeologiczne północno-zachodniej Polski. Pr. Nauk. Inst. Geot. PWroc.*, **49**: 363–368.
- ZARADNY H., STAŃCZYK J., 1988 – Modelowanie ujęć wody podziemnej w strefie morza na przykładzie wyspy Wolin. *W: Aktualne problemy hydrologii. Cz. I, Hydrologia Półwyspa i Pomorza*: 142–155. Instytut Morski, Gdańsk.

SUMMARY

The example of calculation presented in this paper shows the possibility of use of the Monte Carlo method to predict contaminant transport in groundwater. This method allows to determine contaminant hazard for water intakes, the load of chemical substances entering streams and water reservoirs, etc. It can also be used to search for an optimal placement

for industrial waste storage or to evaluate the efficiency of protection measures against groundwater pollution, such as barrier of wells, drainage ditches, pollutant-absorbing screens. The Monte Carlo method supported by the finite element method used for the calculation of the water pressure head constitutes a very useful simulation tool.