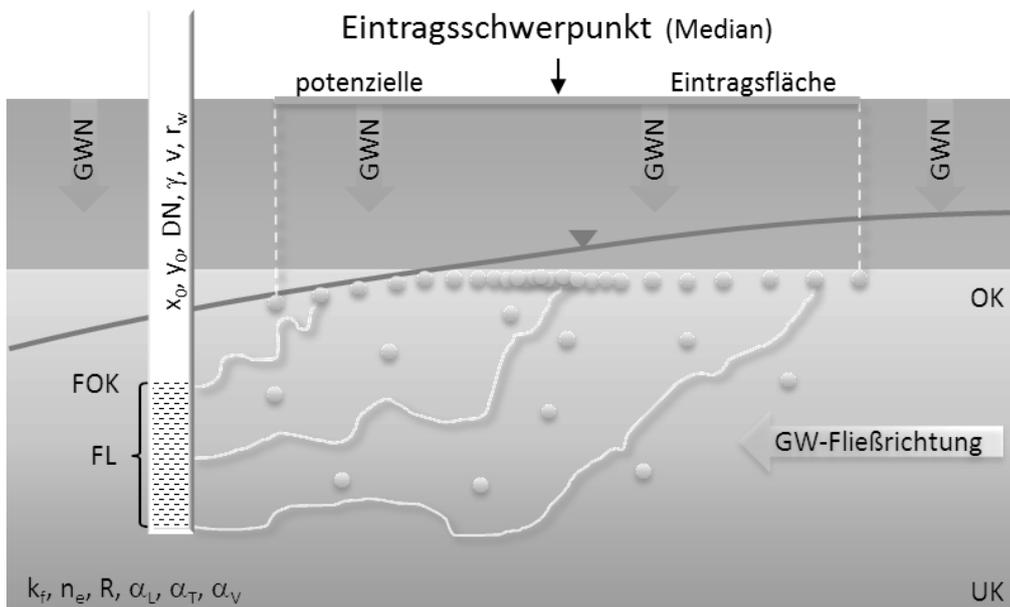




Monte-Carlo-Simulation des inversen 3D-Random-Walk-Particle-Tracking zur Eintragsflächenermittlung von Grundwassermessstellen



Hydro-Geologie-Nord GbR
Dipl.-Ing. Toralf Hilgert

Schwerin, 31.08.2018

Motivation und Lösungsidee

Zur Ermittlung des chemischen Zustandes der Grundwasserkörper wird in der EU-WRRL sowie in der Grundwasserverordnung (GrwV2010) die Auswertung der Beschaffenheitsdaten von Grundwassermessstellen verlangt.

In Mecklenburg-Vorpommern weisen einige hauptsächlich im obersten Grundwasserleiter ausgebauter Grundwassermessstellen sehr hohe Konzentrationen an Stickstoffverbindungen auf. Aufgrund der Nitrat- und Ammoniumbelastungen musste das Land Mecklenburg-Vorpommern im Jahr 2009 18 von 49 Grundwasserkörpern in den schlechten Zustand einstufen und der EU melden¹.

Alle EU-Mitgliedstaaten sind gefordert, eine weitere Verschlechterung des Zustandes zu verhindern. Ob bzw. wann die betroffenen Grundwasserkörper den guten Zustand erreichen, ist in einer Risikoabschätzung zu prognostizieren (LAWA 2013). Ebenso sind zur Erreichung der Umweltziele gemäß Artikel 4 der EU-WRRL für die Grundwasserkörper geeignete Maßnahmen vorzusehen.

Neben der Verweilzeit in der ungesättigten Zone und Ausprägung dieser sind zur Planung effektiver Maßnahmen u.a. folgende Fragen zu beantworten:

- Woher kommt das Grundwasser in der Grundwassermessstelle?
- Wo liegt die potentielle Eintragsfläche? Mit welcher Sicherheit kann die Aussage getroffen werden?
- Wie lange fließt das Grundwasser von der Eintragsfläche bis zum Filter der Grundwassermessstelle?
- Falls die Grundwasserdynamik im Umfeld der Grundwassermessstelle unsicher ist, können lokale Untersuchungen (PHREALOG-Messungen, Hydrogeologisches Dreieck, etc.) einbezogen werden?

Ziel dieser Arbeit ist es, ein entsprechendes Verfahren zu entwickeln, das im Ergebnis vor allem die Beantwortung der Frage zulässt, ob eine mögliche Quelle des Eintrages von Stickstoffverbindungen landwirtschaftliche Flächen sind und damit ein entsprechender Zusammenhang zwischen Emission und Immission hergestellt werden kann.

Als Lösung für dieses Problem bietet sich die Fundstellenklärung mit Hilfe eines inversen Random-Walk-Particle-Tracking-Verfahrens (iRWPT) nach [UFFINK & RÖMKENS 2001] an.

¹ 18. Gewässersymposium „Landwirtschaft und Gewässerschutz“ des LUNG M-V, 20.11.2013 in Güstrow
Kurzfassung des Vortrages: Methoden zur Fundstellenaufklärung von Schad- und Nährstoffen im Grundwasser
– Möglichkeiten und Grenzen, Dr. Stephan Hannappel, HYDOR Consult GmbH, Berlin

Mathematische und physikalische Grundlagen

Die Fluidynamik und somit auch der Stofftransport im Grundwasser können in der Lagrange'schen Sichtweise betrachtet werden. Hier ist die im Wasser gelöste Masse mit einem Partikel verbunden, welcher sich mit dem Strömungsfeld bewegt. Ein Verfahren zur Modellierung des Stofftransportes im Grundwasser das nach diesem Prinzip funktioniert ist das Random-Walk-Particle-Tracking [KINZELBACH 1992]. Es kann mit folgender Gleichung beschreiben werden:

$$X_p(t + \Delta t) = X_p(t) + \left(u(X_p, t) + \nabla D(X_p, t) \right) \Delta t + B(X_p, t) Z(t) \sqrt{2\Delta t}$$

- $X_p(t)$: Partikelposition zum Zeitpunkt t
 u : Geschwindigkeitsvektor
 D : Dispersionstensor
 B : Versetzungsmatrix zur Berücksichtigung der Dispersion
 Z : Vektor mit normalverteilten Zufallszahlen (Mittelwert=0, Standardabw.=1)

$$D = \begin{pmatrix} \frac{\alpha_L u_x^2 + \alpha_T u_y^2 + \alpha_V u_z^2}{|u|} & \frac{u_x u_y}{|u|} (\alpha_L - \alpha_T) & \frac{u_x u_z}{|u|} (\alpha_L - \alpha_V) \\ \frac{u_y u_x}{|u|} (\alpha_L - \alpha_T) & \frac{\alpha_T u_x^2 + \alpha_L u_y^2 + \alpha_V u_z^2}{|u|} & \frac{u_y u_z}{|u|} (\alpha_L - \alpha_V) \\ \frac{u_z u_x}{|u|} (\alpha_L - \alpha_V) & \frac{u_z u_y}{|u|} (\alpha_L - \alpha_V) & \frac{\alpha_V (u_x^2 + u_y^2) + \alpha_L u_z^2}{|u|} \end{pmatrix}$$

- α_L : longitudinale Dispersivität [m]
 α_T : transversale horizontale Dispersivität [m]
 α_V : transversale vertikale Dispersivität [m]
 $|u|$: Betrag der Geschwindigkeit = $\sqrt{u_x^2 + u_y^2 + u_z^2}$
 u_x, y, z : Komponenten des Geschwindigkeitsvektors

Nach [BURNETT & FRIND 1987] hat zur Berücksichtigung der Dispersion notwendige Versetzungsmatrix B im 3D-Fall vereinfacht folgende Komponenten²:

$$B = \begin{pmatrix} \frac{u_x}{|u|} \sqrt{\alpha_L |u|} & -\frac{u_y}{\sqrt{u_x^2 + u_y^2}} \sqrt{\frac{(\alpha_T (u_x^2 + u_y^2) + \alpha_V u_z^2)}{|u|}} & -\frac{u_x u_z}{|u| \sqrt{u_x^2 + u_y^2}} \sqrt{\alpha_V |u|} \\ \frac{u_y}{|u|} \sqrt{\alpha_L |u|} & \frac{u_x}{\sqrt{u_x^2 + u_y^2}} \sqrt{\frac{(\alpha_T (u_x^2 + u_y^2) + \alpha_V u_z^2)}{|u|}} & -\frac{u_y u_z}{|u| \sqrt{u_x^2 + u_y^2}} \sqrt{\alpha_V |u|} \\ \frac{u_z}{|u|} \sqrt{\alpha_L |u|} & 0 & \frac{\sqrt{u_x^2 + u_y^2}}{|u|} \sqrt{\alpha_V |u|} \end{pmatrix}$$

Die normalverteilten Zufallszahlen Z lassen sich mit Hilfe der *Polar-Methode* nach MARSAGLIA³ simulieren. Dieser Algorithmus wurde in dieser Arbeit angewandt.

Für räumlich geringe Gradienten der Dispersion können die sich aus der FOKKER-PLANCK-Gleichung gegebenen Gegenterme $[\nabla D(X_p, t)]$ in erster Näherung vernachlässigt werden [KINZELBACH 1992].

Wie bei [UFFINK & RÖMKENS 2001] werden zur Ermittlung der Eintragsflächen die Gegenterme nicht weiter beachtet. Die Komponenten der Grundwassergeschwindigkeit lassen sich dann wie folgt ermitteln:

$$u_x = \left(F \cdot v \cos \gamma + (1 - F) \cdot k_f \cdot \frac{\partial h(x, y)}{\partial x} \right) \cdot \frac{1}{n_e \cdot R}$$

$$u_y = \left(F \cdot v \sin \gamma + (1 - F) \cdot k_f \cdot \frac{\partial h(x, y)}{\partial y} \right) \cdot \frac{1}{n_e \cdot R}$$

- v : lokale Fließgeschwindigkeit (Darcy) in der Nähe der GWM
- γ : Grundwasserherkunftsrichtung in der Nähe der GWM
- k_f : Durchlässigkeitsbeiwert des Grundwasserleiters [m/s]
- n_e : durchströmte Porosität
- R : Retardationsfaktor
- $h(x, y)$: regionale Grundwasserspiegelhöhe (z.B. aus einem SURFER-Grid)
- F : Wichtungsfaktor für Berücksichtigung der lokalen Grundwasserdynamik

² hier unter Vernachlässigung der Diffusion geschrieben

³ <http://de.wikipedia.org/wiki/Polar-Methode>

Die zur Ermittlung der Grundwassergeschwindigkeit notwendigen Richtungsableitungen werden wie folgt numerisch bestimmt:

$$\frac{\partial h(x, y)}{\partial x} = \frac{h\left(x + \frac{w_x(x, y)}{2}, y\right) - h\left(x - \frac{w_x(x, y)}{2}, y\right)}{w_x(x, y)}$$

$$\frac{\partial h(x, y)}{\partial y} = \frac{h\left(x, y + \frac{w_y(x, y)}{2}\right) - h\left(x, y - \frac{w_y(x, y)}{2}\right)}{w_y(x, y)}$$

$w_x, w_y(x, y)$: Zellweite des SURFER-Grids am Punkt (x,y)

Die Berechnung der Grundwasserspiegelhöhen erfolgt durch ein bilineares Interpolationsschema aus einem diskret vorgegebenen SURFER-Grid.

Für einzelne Grundwassermessstellen existieren aus unterschiedlichen Quellen (hydrogeologisches Dreieck, PHREALOG-Messungen) lokale Angaben zur Grundwasserfließrichtung. Um diese Angaben mit zu berücksichtigen wird in Abhängigkeit der Entfernung zur Grundwassermessstelle der Einfluss der lokalen Grundwasserdynamik mit Hilfe eines Wichtungsfaktors gewürdigt. Aus einem subjektiv vorzugebenden Halbwertswirkradius⁴ wird dann der Wichtungsfaktor F wie folgt berechnet:

$$F = e^{\frac{-\ln(2)}{r_w} \sqrt{(x_0-x)^2 + (y_0-y)^2}}$$

x_0, y_0 : Koordinaten der Grundwassermessstelle

r_w : Halbwertswirkradius [m]

Die für die weiteren Berechnungen notwendige vertikale Komponente der Grundwassergeschwindigkeit lässt sich nach [STRACK 1984], zitiert in [KINZELBACH 1992], näherungsweise aus der Grundwasserneubildung ableiten:

$$u_z = \frac{GWN}{n_e \cdot R} \cdot \frac{M - z}{M}$$

GWN : Grundwasserneubildung aus dem Niederschlag [m³/m²/s]

M : Mächtigkeit des Grundwasserleiters [m]

z : die von der Grundwasseroberfläche nach unten gemessene vertikale Koordinate [m]

⁴ An dieser Stelle kann die Zuverlässigkeit der Angaben der lokalen Grundwasserdynamik berücksichtigt werden.

Durch Integration kann daraus folgende Beziehung zur ersten Abschätzung der Fließzeit eines Partikels bis zur Grundwasseroberfläche angegeben werden:

$$t = \frac{n_e \cdot R \cdot M}{GWN} \cdot \ln \frac{M}{M - s}$$

t : Fließzeit bis zur Grundwasseroberfläche [Jahre]

s : Filteroberkante bzw. -unterkante von der Grundwasseroberfläche nach unten gemessen [m]

Am horizontalen Eintrittspunkt des Grundwassers in die Grundwassermessstelle werden über die gesamte Filterlänge gleichverteilt die Startpunkte der Partikel gesetzt und invers deren Herkunft (d.h. die potentielle Eintragsfläche) sowie deren Fließzeit berechnet.

berechnet.

Umsetzung

Das beschriebene Verfahren wurde in VBA auf Grundlage von Excel 2016 programmiert. Nachfolgend ist das druckbare Berechnungsprotokoll für die Eingangsdaten der Monte-Carlo-Simulation des inversen RWPT sowie für die Berechnungsergebnisse dargestellt.

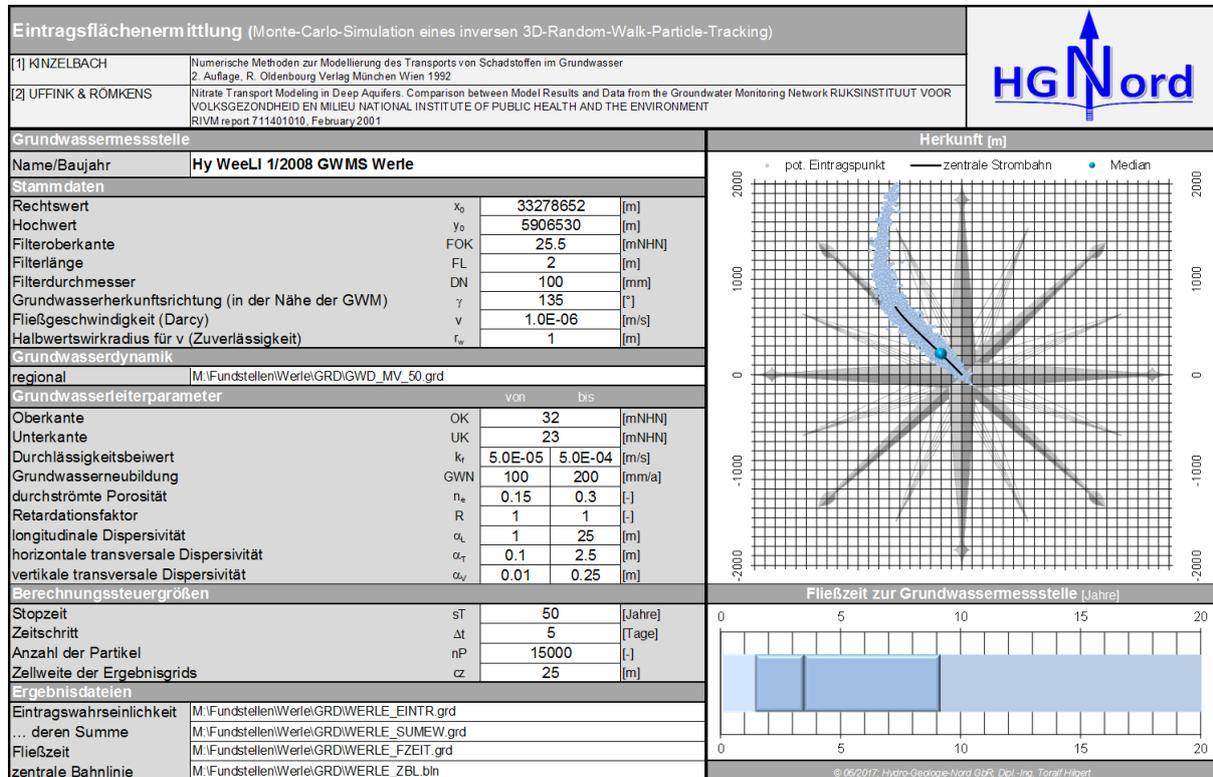


Abbildung 2: Berechnungsprotokoll Ermittlung der Eintragsflächen mit iRWPT

Für die zu beurteilende Grundwassermessstelle müssen zur Berechnung folgende Stammdaten angegeben werden:

- Lagekoordinaten (Rechtswert, Hochwert) sowie
- Filteroberkante [mNHN], Filterlänge [m] und Filterdurchmesser [mm]

Falls im näheren Umfeld oder an der Grundwassermessstelle selbst weitergehende Untersuchungen bezüglich der lokalen Grundwasserdynamik gemacht wurden (z.B. PHREALOG-Messungen, Hydrogeologisches Dreieck, etc.), kann die

- GW-Herkunftsrichtung (aus: E \rightarrow 0°, N \rightarrow 90°, W \rightarrow 180°, S \rightarrow 270°) und die
- GWM-nahe Filtergeschwindigkeit (Darcy) [m/s]

vorgegeben werden.

Zur Wertung der Zuverlässigkeit der messstellennahen Angaben erfolgt eine Gewichtung in Abhängigkeit von der Entfernung zur Grundwassermessstelle. Die Angabe des Halbwertwirkradius von z.B. 10 m bewirkt dabei, dass nach 10 m die messstellennahe Geschwindigkeit nur noch zur Hälfte in die Berechnung eingeht. Für die vorliegende Bearbeitung wurde der Halbwertwirkradius bei Phrealog-Messungen in Abhängigkeit der Richtungsdivergenz zwischen Messergebnis und Landesdynamik zwischen 5 m und 20 m und bei Hydrologischem Dreieck mit überwiegend 10 m angesetzt. Mit zunehmender Entfernung zur Grundwassermessstelle gewinnt somit die regionale Grundwasserdynamik an Bedeutung. Diese wird über die regionale Verteilung der Grundwasserspiegellhöhen beschrieben und muss für den voraussichtlichen Untersuchungsraum als SURFER-Grid im „Surfer 7 binary grid format“ vorgegeben werden. Das Untersuchungsgebiet sollte so groß gewählt werden, dass Partikel möglichst nicht im vorgesehenen Simulationszeitraum den Rand erreichen.

Zusammen mit den Parametern zur Beschreibung des Grundwasserleiters:

- Ober- und Unterkante [m],
- kf-Wert [m/s],
- Grundwasserneubildung [mm/a],
- durchströmte Porosität [-],
- Retardationsfaktor [-],
- longitudinale, horizontale transversale, horizontale vertikale Dispersivität [m],

wird die inverse Simulation des Stofftransportes einer vorzugebenen Anzahl von Partikeln durchgeführt.

Für die praktische Handhabung wurde das inverse RWPT als Monte-Carlo-Simulation umgesetzt. So ist es möglich den gesamten plausiblen Parameterraum der bestimmenden Prozessgrößen

$k_f, n_e, R, \alpha_L, \alpha_T, \alpha_V$

innerhalb zu definierender Unter- und Obergrenzen während der Simulation zu berücksichtigen. Dazu wird jedem einzelnen Partikel zufällig ein individueller Parametersatz der geohydraulischen Prozessgrößen zugewiesen.

Die Startpunkte der Partikel werden über die gesamte Filterlänge der betrachteten Grundwassermessstelle gleich verteilt. Dabei erfolgt die Simulation unter Beachtung einer wählbaren Zeitschrittweite [Tage]. Die Berechnung für jedes Partikel endet entweder bei Erreichen der Grundwasseroberfläche oder spätestens nach der angegebenen Stoppzeit [Jahre].

Für eine sinnvolle Wahl der Zeitschrittlänge sowie der Zellweite für die Ergebnis-Grid-Dateien muss auf das von PRICKETT verschärfte COURANT-Kriterium geachtet werden [KINZELBACH 1992].

$$C_P = \frac{cz}{v_{max} \cdot \Delta t} \geq 5$$

v_{max} : maximale Abstandsgeschwindigkeit [m/s]

Δt : Zeitschritt [s]

cz : Zellweite der Ergebnis-Grids [m]

Das Kriterium bewirkt, dass für die Durchquerung einer Zelle mindestens fünf Zeitschritte notwendig werden und soll eine möglichst glatte Partikelverteilung sicherstellen.

Als Ergebnis der Simulation werden in dem Diagramm des Berechnungsprotokolls die Endpunkte des inversen Random-Walk-Particle-Tracking bezogen auf die Grundwassermessstelle dargestellt. Diese sind die potentiellen Eintragungspunkte. Der Medianwert stellt dabei den Schwerpunkt des Eintrages dar. Ebenso wird die zentrale Strombahn eines ohne Dispersion sich bewegenden Partikels abgebildet. In dem unter dem Diagramm dargestellten Boxplot wird die Verteilung der Fließzeiten zur Grundwassermessstelle von allen Eintragungspunkten dokumentiert. Für eine kartenmäßige Darstellung der Simulationsergebnisse wird über die Endpunkte ein regelmäßiges Raster gelegt und die prozentuale Anzahl der darin enthaltenden Partikel bestimmt sowie deren mittlere Fließzeit zur betrachteten Grundwassermessstelle berechnet. Beide Rasterinformationen werden als SURFER-Grid in das vorgegebene Verzeichnis geschrieben, ebenso die zentrale Strombahn, diese jedoch im SURFER-BLN-Format.

Hauptergebnis der Berechnung ist eine Einhüllende innerhalb derer sich z. B. 75% aller potentiellen Eintragungspunkte befinden (s. **Abbildung 3**).

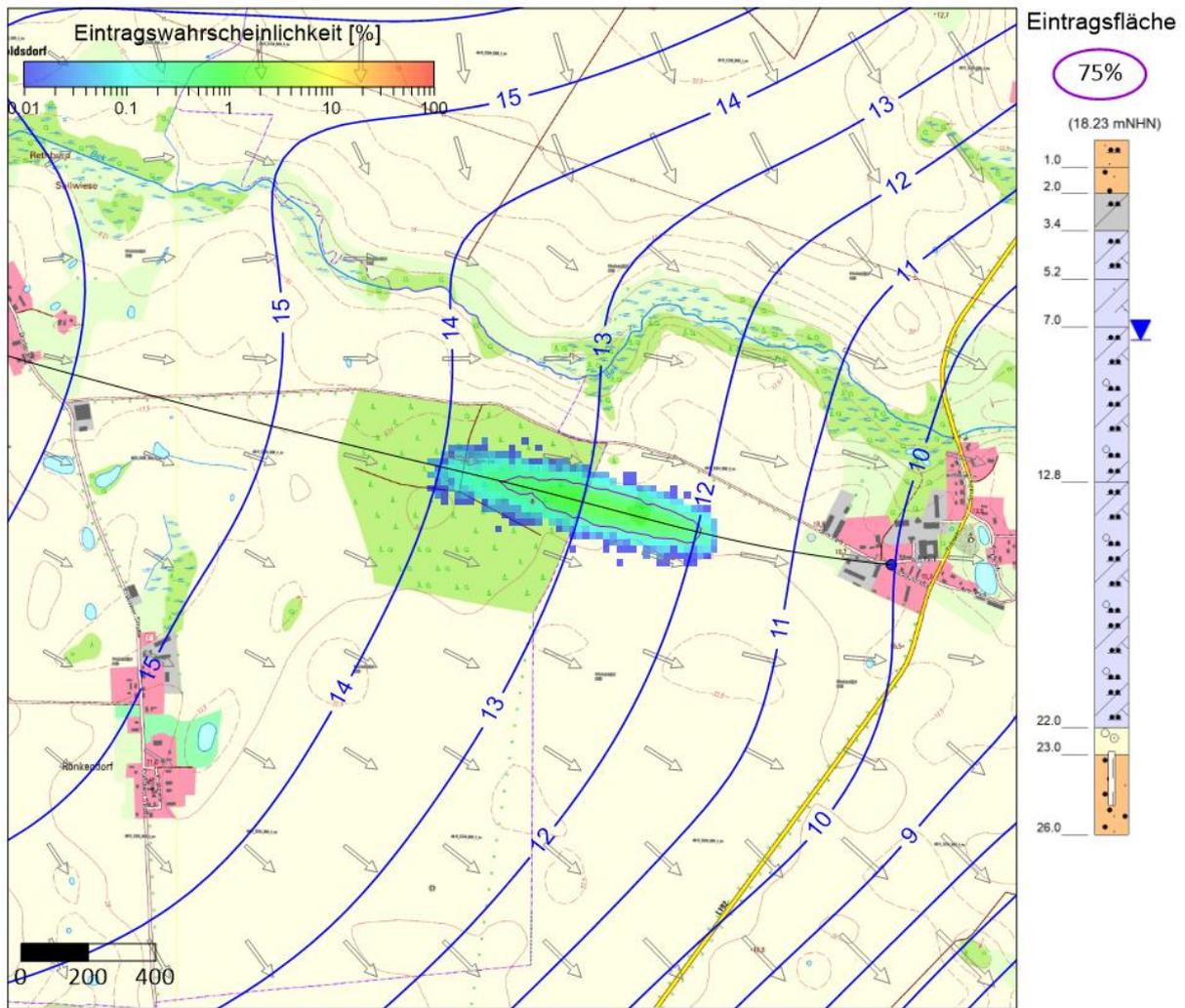


Abbildung 3: Ergebnisdarstellung der Beispielrechnung

Literatur

- [1] KINZELBACH 1992: Numerische Methoden zur Modellierung des Transportes von Schadstoffen im Grundwasser. - München, Wien : R. Oldenbourg Verlag 1992 (2. Auflage)
- [2] UFFINK & RÖMKENS 2001: Nitrate Transport Modeling in Deep Aquifers. Comparison between Model Results and Data from the Groundwater Monitoring Network RIJKSINSTITUUT VOOR VOLKSGEZONDHEID EN MILIEU NATIONAL INSTITUTE OF PUBLIC HEALTH AND THE ENVIRONMENT RIVM report 711401010, February 2001
- [3] BURNETT & FRIND 1987: Simulation of contaminant transport in three dimensions: 2. Dimensionality effects. Water Resources Research 23 (1987), Nr. 4