

Das „Random-Walk“-Verfahren – Möglichkeiten einer weitergehenden Implementierung zur Beschreibung von Transportprozessen im Grundwasser

The „Random-Walk“-Method – Possibilities of an Advanced Implementation for the Description of Transport Processes in Groundwater

A. Matheja

Transportprozesse, Grundwasser, Random-Walk, stochastische Modellierung
Transportprocesses, groundwater, random-walk, stochastic modeling

Zusammenfassung: Aufbauend auf den Arbeiten von *Prickett* et al. (1981) und *Uffink* (1990) werden Möglichkeiten für eine weitergehende Implementierung des „Random-Walk“-Verfahrens zur Beschreibung von Transportprozessen im Grundwasser dargestellt und in ihren Auswirkungen diskutiert. Die Erfassung des Schadstoffeintrages bzw. -austrages und ihre Abbildung im numerischen Modell werden erläutert. Hierbei wird insbesondere auf die Realisierung von Grenzzonenkonzepten zur Definierung des Partikelaustrages eingegangen. Die Anwendbarkeit des Verfahrens bei der Untersuchung von realen Anwendungsfällen wird dargelegt. Abschließend werden die erforderlichen Rechnerkapazitäten aufgezeigt und mögliche Erweiterungen des Verfahrens vorgestellt.

Summary: Following the work of *Prickett* et al. (1981) and *Uffink* (1990) possibilities of an advanced implementation of the „random-walk“-method for the description of transport processes in groundwater are described and their effects discussed. The numerical description of pollutant entry and the modelling concepts to carry out these pollutants from the aquifer system are explained. Especially the realization of the boundary radius concept for the extraction of particles from the aquifer system is shown. The applicability of the model to real studies is presented. Finally, the necessary computer resources are shown and possible extensions are introduced.

1 Einleitung

Das verfügbare Grundwasserdargebot wird bereits heute in weiten Bereichen intensiv genutzt und in den meisten Fällen zur Trinkwassergewinnung gezielt bewirtschaftet. Qualitätsaspekte gewinnen aufgrund anthropogener Beeinträchtigungen (Nitratproblematik, CKW-Schadensfälle etc.) zunehmend an Bedeutung. In diesem Zusammenhang wird der Möglichkeit, anhand numerischer Modelle, verschiedene Vorgehensweisen bei der Aquiferbewirtschaftung in ihren qualitativen Auswirkungen zu vergleichen, ein wachsendes Interesse eingebracht.

2 Fragestellung

Für die Modellierung von Transportprozessen im Grundwasser existieren verschiedene Verfahren, die von *Kinzelbach* (1987) zusammenfassend vorgestellt und verglichen wurden. Da für den Fall des „Random-Walk“-Verfahrens die ausgeführten stochastischen Einzelschritte zwar die Fokker-Planck-Gleichung erfüllen, nicht jedoch die Transportgleichung, wurden Gegenterme zur Kompensation der unphysikalischen Partikeldrift in Gebieten mit kleinen Dispersionskoeffizienten eingeführt (z. B. *Kinzelbach*, 1987). Diese Gegenterme ergänzen das von *Prickett* et al. (1981) entwickelte Modell und verhindern die oben beschriebene Partikeldrift und damit auch die Anhäufung von Partikeln in Staupunkten. Die Anwendung des Verfahrens wurde von *Uffink* (1985, 1988, 1990) auf den dreidimensionalen Fall übertragen. Die im Falle des ideal geschichteten Aquifers auftretenden Singularitäten innerhalb der Gegenterme beim Übergang von größeren Dispersionskoeffizienten zu kleineren Dispersionskoeffizienten und die damit verbundene Inkonsistenz zwischen Wasserbilanz und Partikeltransport wurde hier durch die teilweise Reflektion von Partikeln an den Schichtgrenzen aufgehoben. Trotz dieser Weiterentwicklung verblieben Schwierigkeiten, welche die Anwendbarkeit des „Random-Walk“-Verfahrens bei Praxisfällen einschränken:

1. Die Methode ist immer zufallsbehaftet, was in Teilen des Modellgebietes mit geringer Partikelbelegung zu Ergebnissen führen kann, die nicht signifikant zu sein brauchen. Dieses Phänomen liegt

- in der angewandten Methodik begründet und kann daher nie ganz ausgeschlossen werden.
2. Die stochastische Natur des dispersiven Schrittes kann die Wasser- und Partikelbewegung entkoppeln, was zu unphysikalischen Konzentrationsfluktuationen führen kann.
 3. Da für die Berechnung signifikanter Konzentrationsverteilungen, gerade in ausgedehnten Aquifersystemen mit diffussem Schadstoffeintrag und mehreren Schadstoffen, hohe Partikelzahlen notwendig sind, ist der Rechenzeit- und Speicherbedarf groß. Dies gilt besonders dann, wenn die Berücksichtigung der Gegenterme notwendig wird bzw. Abbauparameter und Partikelpositionen mitzuführen sind.
 4. Eine räumliche Diskretisierung des Modellgebietes kann zu rauen Konzentrationsverteilungen im Falle eines zu geringen Gitterabstandes und zu stark gemittelten Ergebnissen im Falle eines zu großen Gitterabstandes führen (*Kinzelbach*, 1987).
 5. Die Einführung von Grenzradienkonzepten zum Partikeleinfang an Entnahmebrunnen und Vorflutern ist nach *Kinzelbach* (1987) mit bestimmter Willkür behaftet, da die Größe des anzusetzenden Einfangradius an Entnahmenbrunnen sich am Abstand des Staupunktes vom Brunnen orientieren muß und damit nicht a priori bekannt ist.

Die zuvor genannten Schwierigkeiten können durch eine Erhöhung der Partikelanzahl bzw. eine engmaschigere räumliche Diskretisierung in ihren negativen Auswirkungen stark eingeschränkt werden.

3 Methodik

3.1 Bewegungsgleichungen für den zweidimensionalen Fall

Für die Simulation von Transportprozessen werden innerhalb des „Random-Walk“-Verfahrens Partikel in der Stömung mitbewegt, um aus ihrer Position eine Konzentrationsverteilung zu berechnen. Grundgedanke des Verfahrens ist die Tatsache, daß die Bewegung von Inhaltsstoffen im Grundwasser als regelloser statistischer Vorgang betrachtet werden kann. Die Bewegung des Partikels wird in zwei Schritte zerlegt. Im ersten Schritt bewegt sich der Partikel mit der mittleren Fließgeschwindigkeit entlang der Stromlinien (konvektiver Anteil). Im zweiten Schritt unterliegt er einer stochastischen Ortsveränderung entsprechend der longitudinalen und transversalen Dispersion (dispersiver Anteil). Mathematisch gesteuert wird der zweite Prozeß durch einen gaussverteilten Zufallszahlengenerator. Unter Berücksichtigung der Fokker-Planck'schen Gegenterme ergeben sich die Bewegungsgleichungen für den zweidimensionalen Fall wie folgt:

$$x_p(t + \Delta t) = x_p(t) + va'_x \Delta t + z_1 \sqrt{2D_L \Delta t} \frac{va_x}{v} - z_2 \sqrt{2D_T \Delta t} \frac{va_y}{v}$$

$$y_p(t + \Delta t) = y_p(t) + va'_y \Delta t + z_1 \sqrt{2D_L \Delta t} \frac{va_y}{v} + z_2 \sqrt{2D_T \Delta t} \frac{va_x}{v}$$

$$v = \sqrt{va_x^2 + va_y^2}$$

$$va'_x = va_x + FPG_1 = va_x + \frac{\partial D_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial D_{xy}}{\partial y}$$

$$va'_y = va_y + FPG_2 = va_y + \frac{\partial D_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial D_{yy}}{\partial y}$$

mit

$x_p(t + \Delta t)$ x – Position des Partikels zum Zeitpunkt $(t + \Delta t)$ [L]

$y_p(t + \Delta t)$ y – Position des Partikels zum Zeitpunkt $(t + \Delta t)$ [L]

z_1, z_2 normalverteilte Zufallsvariablen [-]

va'_x, va'_y Abs tan dsgeschwindigkeiten in x - bzw. y - Richtung unter Berücksichtigung der Fokker – Planck'schen Gegenterme [L/T]

FPG_1, FPG_2 Fokker – Planck'sche Gegenterme [L/T]

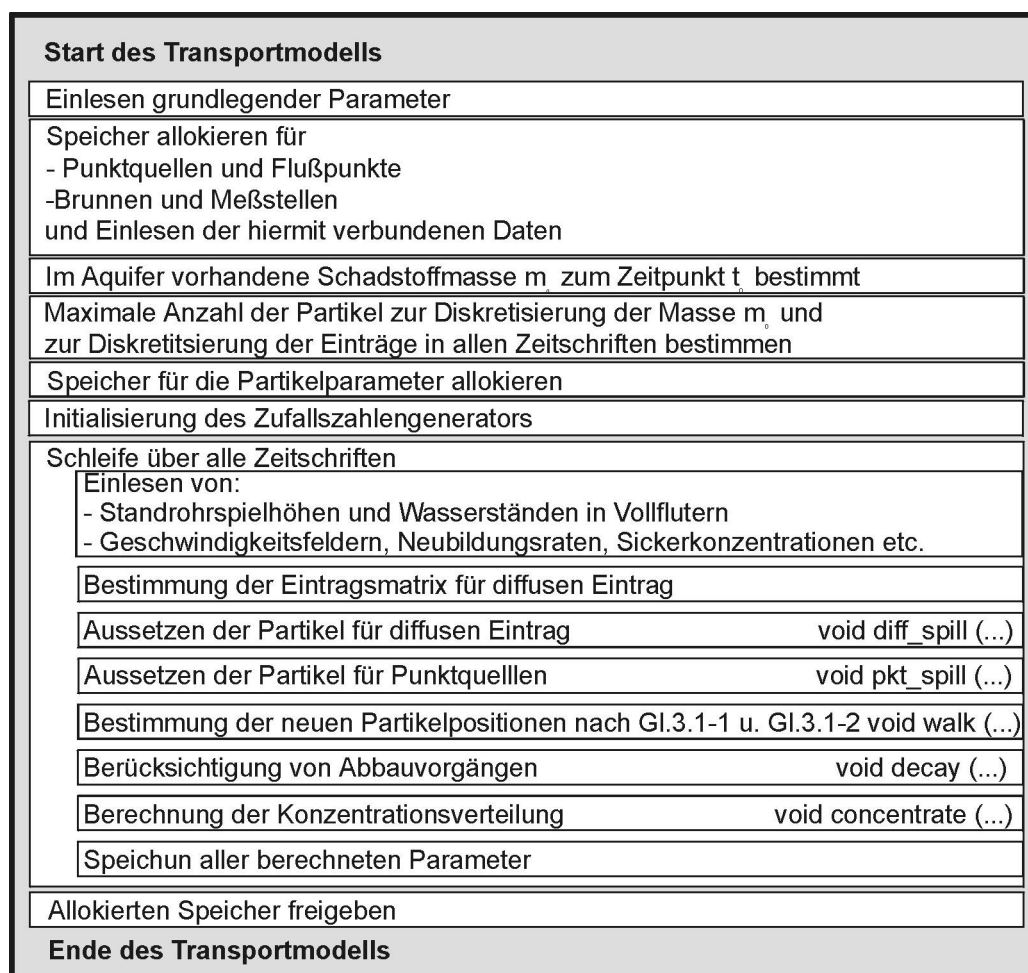
D_{xx}, D_{xy} Dispersivitäten in den verschiedenen Richtungen [L²/T]

D_{yx}, D_{yy} (.." ..)

D_L Longitudinale Dispersivität [L²/T]

D_T Transversale Dispersivität [L²/T]

Aufgrund der statistischen Unabhängigkeit der einzelnen Zufallspositionen können Lösungen überlagert werden. Die mittlere Konzentration in der Zelle wird durch Auszählen der Partikel bestimmt.



*Abb. 1. Umsetzung des "Random-Walk"-Verfahrens
Fig. 1. Realisation of the "random-walk"-method*

3.2 Aufbau des Algorithmus

Der in Abb. 1 dargestellte Algorithmus beschreibt die Implementierung des „Random-Walk“-Verfahrens. Der Algorithmus wurde in der Programmiersprache „C“ unter dem Betriebssystem AIX bei weitgehender Einhaltung des ANSI- Standards realisiert.

Es ist daher relativ einfach möglich, den Algorithmus auf andere Rechnerplattformen zu portieren. Die

Reprint: Das „Random-Walk“-verfahren - Möglichkeiten einer weitergehenden Implementierung zur Beschreibung von Transportprozessen im Grundwasser. Zeitschrift für Kulturtechnik und Landentwicklung, Vol. 38, No. 2, pp. 66-70, 1997.

Initialisierung des Zufallszahlengenerators muß vor der Zeitschleife erfolgen, da sich ansonsten die Zufallsfolgen in den einzelnen Zeitschritten wiederholen. Dies gilt auch bei Anwendung anderer Zufallsgeneratoren wie z.B. random() oder rand48(). Konkret bietet sich eine Initialisierung über die Systemzeit an:

```
# include<time.h>
time_t
zuf;
void srand ( (unsigned int)
time (&zuf) );
```

Innerhalb der Routine void walk(...) werden die neuen Partikelpositionen berechnet (Abb.2). Außerdem werden Partikel entfernt, wenn sie das Modellgebiet verlassen oder durch Brunnen und Vorfluter aus dem System entnommen werden.

Die Anwendung der Chapeau-Funktion ist nicht zwingend, da sie in Abhängigkeit der Partikelposition (1., 2., 3. oder 4. Quadrant einer Zelle) lediglich die Geschwindigkeiten angrenzender Zellen berücksichtigen. Außerdem setzt ihre Anwendung eine Rechteckdiskretisierung voraus, was ebenfalls nicht zwingend erforderlich ist. Die Zeitschrittdauer wird durch eine Begrenzung des konvektiven Schrittes auf ein Fünftel der für den jeweiligen Partikel aktuellen minimalen Zellabmessungen unterteilt. Dieses Kriterium kann auch den Erfordernissen der Praxis, insbesondere bei großen Zellabmessungen, angepaßt werden.

3.3 Wahl der Partikelanzahl

Anders als bei *Prickett* et al. (1981) ist die Partikelanzahl nur durch den zur Verfügung stehenden Speicher begrenzt. Der für die Speicherung verschiedener Partikelparameter (Masse, Eintragszeit, Position in x- und y-Richtung) notwendige Speicher wird dynamisch allokiert. Hierfür wird eine weitere Routine zur Bestimmung der maximalen Partikelanzahl notwendig, in welcher die maximale Partikelanzahl über zwei verschiedene Mechanismen festgelegt werden kann:

1. Die Bestimmung der maximalen Partikelanzahl erfolgt über vorgegebene Partikelanzahlen für die einzelnen Zeitschritte und Eintragsarten (diffus und punktuell) oder
2. Die Bestimmung erfolgt durch Division der zu diskretisierenden Gesamtmasse bei einer a priori vorgegebenen Einzelpartikelmasse.

Die beiden Konzepte halten die Massen der einzelnen Partikel auf einem gleichen Niveau und verhindern gleichzeitig die bei *Prickett* et al. (1981) notwendige Neuberechnung der Partikelmassen beim Überschreiten der maximal möglichen Partikelzahl.

3.4 Schadstoffeintrag in den Aquifer

Der Schadstoffeintrag in den Aquifer kann über Eintragsmatrizen in Form der jeweils gewählten Gebietsdiskretisierung realisiert werden (diffuser Eintrag). Für Schadensfälle besteht die Möglichkeit, Quellen in Form von Rechtecken oder Kreisen zu spezifizieren (punktueller Eintrag).

Die Partikel werden in den so definierten Gebieten mit Hilfe eines Zufallsgenerators ausgesetzt. Die benötigte Zeit für die Durchdringung der ungesättigten Zone kann entweder exakt vorgegeben oder aus dem Flurabstand und einer abgeschätzten Sickergeschwindigkeit berechnet werden. Abbauvorgänge werden in später vorgestellten Beispielen im Bereich der ungesättigten Zone nicht berücksichtigt, könnten aber bei bekanntem aquiferspezifischem Abbauverhalten leicht berücksichtigt werden.

3.5 Schadstoffaustrag aus dem Aquifer

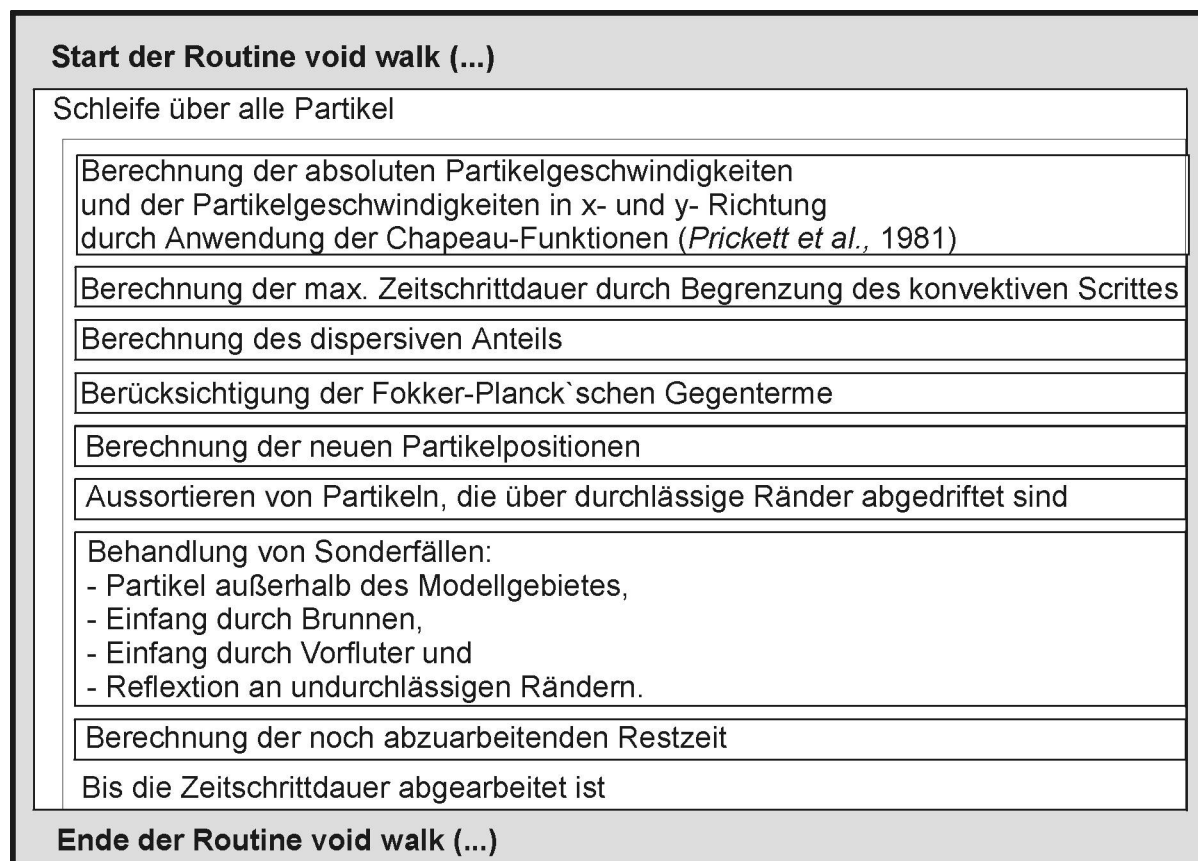
Für den Austrag von Schadstoffen aus dem Aquifer müssen zwei Austragsarten berücksichtigt werden:

1. Austrag über durchlässige Systemränder und
2. Entfernung durch Entnahmebrunnen oder Vorfluter.

Der erstgenannte Effekt kann durch einfache Betrachtung der Partikelposition (innerhalb oder außer-

halb des Aquifers) Berücksichtigung finden. Für Punkt zwei wurde hier ein Grenzradienkonzept implementiert, das neben einem horizontalen auch einen vertikalen Einfangradius beinhaltet. Für den Fall des Partikelaustrages durch Vorfluter wird dies in Abb. 3 dargestellt.

Bei mächtigen Aquiferen wird somit eine Umströmung von Brunnen bzw. Unterströmungen von Vorflutern abbildbar. Die vertikale Partikelposition z_p (Abb. 3) kann über einen entsprechend gewählten Zufallszahlengenerator mit angepaßter Verteilungsfunktion oder die ohnehin mitgeführte Aufenthaltszeit des Partikels im Aquifer ermittelt werden, wenn auf eine dreidimensionale Modellierung gänzlich verzichtet werden soll. Auch in dreidimensionalen Modellen kann dieses Konzept für den Fall relativ mächtiger Schichteinheiten sinnvoll sein.



*Abb. 2. Berechnung der neuen Partikelposition und Entfernen von Partikeln aus dem Aquifer
Fig. 2. Calculation of new particle positions and erasing of particles from the aquifer*

4 Ergebnisse

4.1 Anwendung in Praxisfällen

Das vorgestellte Verfahren wurde u.a. von *Härig* (1991) und *Pielke* (1992) in vereinfachter Form angewendet.

Matheja (1996) wendete das beschriebene Verfahren innerhalb eines Bewirtschaftungsmodells für Verbundsysteme an, um die Grundwasserqualität in den Mehrzielentscheidungsprozeß für die Entwicklung von Bewirtschaftungsstrategien einbeziehen zu können. Abb. 4 zeigt einen dieser Arbeit entnommenen Eichzustand für Nitratkonzentrationen.

	CPU-Zeit [s]	
	Referenzmodell	<i>Kinzelbach</i> (1987)
Testbeispiel	RS/6000 Mod.220	CRAY-CPU
1/1	15,17	50,6
3/1	14,98	48,35
4/1	15,07	51,76

*Tab. 1. Vergleich der Rechenzeiten (CPU)-Zeit für Beispiele aus Kinzelbach (1987)
Table 1. Comparison of calculation time (CPU-time) for examples from Kinzelbach (1987)*

Die lokal auftretenden Abweichungen zwischen gemessenen und berechneten Werten sind hier in erster Linie auf die Schadstoffeinträge aus intensiver Bewässerungslandwirtschaft zurückzuführen, die bei zeitlich und räumlich hochvariabler Bewirtschaftung in ihrer Höhe und Verteilung nur schwer abzuschätzen waren.

Die geschilderten Fälle zeigen jedoch die prinzipielle Anwendbarkeit des Verfahrens bei der Untersuchung von realen Anwendungsfällen.

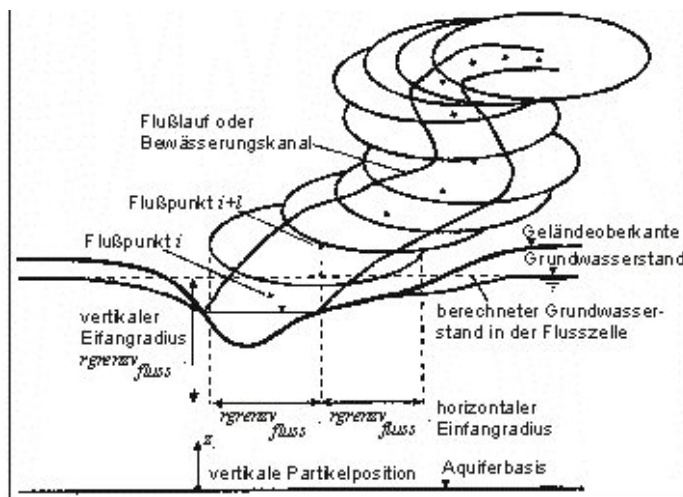


Abb. 3. Grenzradienkonzept für die Beschreibung des Partikelaustrages in Oberflächengewässern
Fig. 3. Critical distance concept for the description of particle tracking to surface water bodies

4.2 Rechenzeiten und erforderliche Ressourcen

Die hier beschriebenen Erfahrungswerte basieren auf den durchgeführten Berechnungen von *Matheja* (1996). Außerdem wurden Testläufe für die von *Kinzelbach* (1987) beschriebenen Beispiele durchgeführt. Alle Rechenzeiten beziehen sich auf einen Zustand ohne Begrenzung des Kernspeichers für den jeweiligen Benutzer und eine maximale Zuteilung von Prozessorzeit im Multi-User-Mode. Das „renice“-Kommando wurde nicht ausgeführt. Als Referenzsystem wurde eine RS/6000 Modell 220 unter dem Betriebssystem AIX 3.4.2 gewählt. Der Rechner besitzt 32 MB Kernspeicher und einen swap-space von 128 MB.

Die Benutzer interessierende reale Rechenzeit (Wartezeit), kann je nach Systemauslastung, erheblich über der erforderlichen CPU- Zeit liegen. Im Falle der für den Tulum-Tal-aquifer durchgeführten Untersuchungen schwankten die Rechenzeiten stark (Tab. 2).

Der jeweils notwendige Speicherplatzbedarf auf Massenspeichern ist abhängig von der Partikelzahl und den mitzuführenden Parametern. Für die Modellierung eines Schadstoffes und Mitführung von Abbauparametern, Partikelmassen und Partikelpositionen können bei 10 Zeitschritten und ca. 2 Mio. Partikeln je Zeitschritt schnell Ergebnisdateien von 30 bis 40 MB erreicht werden.

	Rechenzeiten für 5 Zeitschritte [s]		
	ohne gegenterme	mit Gegentermen	mit Gegentermen
	und ohne Abbau	und ohne Abbau	und Abbau
Beispiel 1	17755		30717
Beispiel 2	18421	32053	32237
Beispiel 3	40526	71318	72542
Beispiel 4	51579	91294	91810

Tab. 2. Benötigte Rechenzeiten für verschiedene Beispiele im Zuge der Untersuchung des Tulum-Tal-Aquifers (*Matheja*, 1996)

Table 2. Needed calculation times for different examples during the analysis of the tulum-valley-aquifer (*Matheja*, 1996)

Erläuterungen:

Beispiel 1: 2 Mio. Partikeln je Zeitschritt für eine Punktquelle in der Mitte des Projektgebietes, d.h. keine Reflexion an komplizierten Geometrien, keine Sonderfälle etc.

Beispiel 2: 2 Mio. Partikeln je Zeitschritt für diffusen Eintrag im gesamten Projektgebiet

Beispiel 3: wie Beispiel 2, jedoch mit 4 Mio. Partikeln je Zeitschritt

Beispiel 4: wie Beispiel 2, jedoch mit 6 Mio. Partikeln je Zeitschritt

5 Diskussion

Das vorgestellte Verfahren erlaubt Erweiterungen in Richtung Abbau höherer Ordnung, Reaktionskinetik zwischen verschiedenen Stoffen und Modellierung dreidimensionaler Transportvorgänge. Diese Erweiterungen sind relativ einfach zu realisieren, was einen unbestreitbaren Vorteil gegenüber anderen Verfahren bedeutet.

Eine Erhöhung der Partikelanzahlen ist nur noch abhängig von den zur Verfügung stehenden Rechnerkapazitäten. Die aufgeführten Rechenzeiten beziehen sich auf ein Basismodell. Mit Hilfe anderer CPU's kann das Verfahren schon heute um das 50 bis 200fache schneller abgearbeitet werden, ohne den Workstationbereich zu verlassen. Die Realisierung in einzelnen Modulen (Abb. 3 und Abb. 4) bietet zudem die Möglichkeit, rechenintensive Routinen (z.B. void walk [...]) gezielt zu optimieren. Dies könnte durch Parallelisierung des Codes, den Aufbau eines distributed thread systems für Workstation Cluster (Bubeck u. Rosenstiel, 1995) oder die Entwicklung einer verteilten Anwendung unter Ausnutzung der CORBA- Standards (Common Object Request Broker Architecture) realisiert werden. Die letztgenannte Möglichkeit wurde in Krabbe (1995) für den Aufbau komplexer Umweltinformationssysteme angedeutet. Auf diese Art und Weise könnten die drei erstgenannten Punkte in Abschnitt 2 in ihren negativen Auswirkungen spürbar eingeschränkt werden. Gleiches gilt für Punkt 4, da das „Random-Walk-Verfahren“ jedem untergelagerten Strömungsmodell (z.B. einem FE-Strömungsmodell mit engmaschiger Diskretisierung) nachgeschaltet werden kann. In diesem Falle hat auch die Einführung von Grenzradialkonzepten nur noch beschränkten Einfluß auf die Untersuchungsergebnisse, was sich bereits in den Untersuchungen von Matheja (1996) andeutete. Nicht immer ist die Mitführung der Partikelpositionen erforderlich, so daß der notwendige Speicherplatz überschaubar bleibt und das Verfahren anwendbar ist.

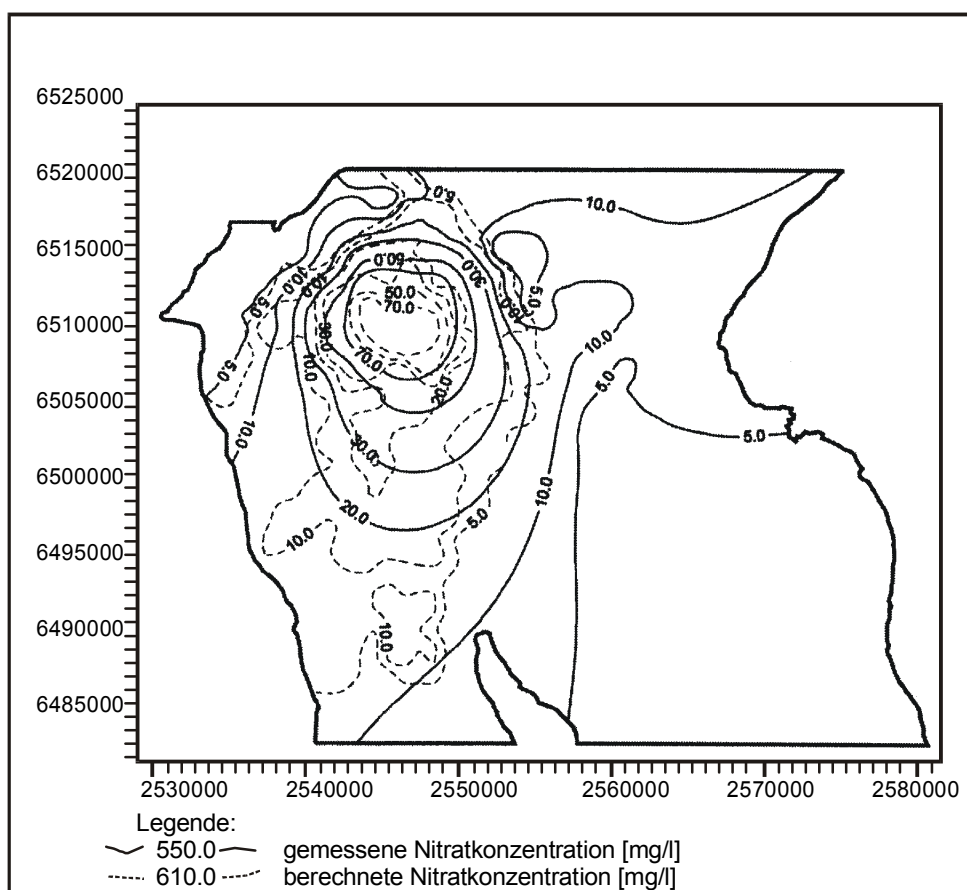


Abb. 4. Gemessene und berechnete Nitratkonzentration [mg/l] im Juli 1982 für den Tulum-Tal-Aquifer im Bereich von San Juan/Argentinien

Fig. 4. Measured and calculated Nitrat concentrations [mg/l] for July 1982 for the Tulum-valley-Aquifer in the area of San Juan/Argentina

Literatur

Bubeck, T. und W. Rosenstiel, 1995: Functional Parallelism on Workstation Cluster. – In: Krumm, H. (Hrsg.): Entwicklung und Management verteilter Anwendungssysteme. Reihe "Informatik für Systementwickler", Bd. 1. Krehl Verlag, Münster

Härig, F., 1991: Auswirkungen des Wasseraustausches zwischen undichten Kanalisationssystemen und dem Aquifer auf das Grundwasser. – Mitt. des Institutes für Wasserwirtschaft, Hydrologie und landwirtschaftlichen Wasserbau, Universität Hannover, Heft 78, 154-271.

Kinzelbach, W., 1987: Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser. – Oldenburg Verlag, München und Wien.

Krabbe, H., 1995: Konzeption einer Entwurfs- und Anwendungsunterstützung für verteilte Umweltinformationssysteme. – In: Krumm, H (Hrsg.): Entwicklung und Management verteilter Anwendungssysteme. Reihe „Informatik für Systementwickler“, Bd. 1. Krehl Verlag, Münster

Matheja, A., 1996: Langfristige Bewirtschaftung von Verbindingssystemen unter Einbeziehung der Grundwasserqualität in den Mehrzielentscheidungsprozeß. – Mitteilungen des Instituts für Wasserwirtschaft, Hydrologie und Landschaftlichen Wasserbau, Universität Hannover, Heft 81, 96-256.

Pielke, M., 1992: Bewirtschaftung des Grundwassers urbaner Räume. - Mitteilungen des Institutes für Wasserwirtschaft, Hydrologie und landwirtschaftlichen Wasserbau, Universität Hannover, Heft 78, 1-242.

Prickett, T.A., T.G. Naymik, und C.G. Lonquist, 1981: A "Random-Walk" Solute Transport Model for Selected Groundwater Quality Evaluations. - Bulletin 65, Illinois State Water Survey, Champaign, Illinois.

Uffink, G.J.M., 1985: A random walk method for the simulation of macrodispersion in a stratified aquifer. - Relation of Groundwater Quantity and Quality. IAHS Publication, No. 146, 103-114.

Uffink, G.J.M., 1988: Modeling of solute transport with the random walk method. - Groundwater Flow and Quality Modeling. NATO ASI Series, Series C: Mathematical and Physikal Science, No. 224, 95-110.

Uffink, G.J.M., 1990: Analysis of Dispersion by the Random Walk Method. - Thesis, Technische Universität Delft, Niederlande.