

AQUAMOD: 'n twee-dimensionele Galerkin eindige element simulatieprogram vir mikrorekenaars vir die voorspelling van versadigde grondwatervloei en besoedeling

GJ van Tonder* en VE Cogho

Instituut vir Grondwaterstudies, Posbus 339, UOVS, Bloemfontein 9300, Suid-Afrika.

Abstract

AQUAMOD is a computer program which simulates ground-water movement and transport of dissolved substances in a saturated subsurface environment using a micro-computer. The program employs a two-dimensional Galerkin finite-element method to approximate the governing equations that describe the two processes which are simulated by AQUAMOD.

AQUAMOD is primarily intended for two-dimensional simulation of flow and solute transport in saturated systems, and provides die fluid pressures and solute concentrations, as they vary with time, everywhere in the simulated aquifer system.

AQUAMOD runs on an IBM compatible micro-computer with a 520 K memory.

Inleiding

Gedurende die afgelope dekade het die gebruik van gesofistikeerde rekenaarmodelle vir die beskrywing van die vloei van grondwater algemeen geword in grondwaterstudies. Die enkele belangrike rede hiervoor was die snelle ontwikkeling wat op die gebied van rekenaartegnologie plaasgevind het. Die twee numeriese metodes wat in grondwaterstudies gebruik word, is hoofsaaklik die eindige verskil (EV) en die eindige element (EE) metodes. Alhoewel die eindige verskil metode baie eenvoudiger as die eindige element metode is, het dit egter tog sekere nadele in grondwaterstudies. Dit is baie moeilik om onreëlmatige grense met die EV na te boots, in teenstelling met die gemak waarmee die EE sulke tipe grense simuleer. 'n Verdere voordeel van die EE bo die EV metode is die gemak waarmee verskillende geohidrologiese eienskappe van die akwifer in die EE netwerk ingebou kan word (die EV elemente moet reghoekig wees). Dit is dus baie moeilik om waarnemings- en produksieboorgate met knooppunte in die EV-netwerk te laat ooreenstem.

'n EE program wat algemeen in SA en die wêreld gebruik word is ISOQUAD wat deur G.F. Pinder van die Princeton Universiteit in die VSA ontwikkel is (Pinder, 1974). ISOQUAD is 'n gekombineerde grondwatervloei- en besoedelingsprogram wat op 'n IBM 370 of soortgelyke rekenaar loop. Weens die groot geheue wat programme soos ISOQUAD benodig, is dit nie moontlik om dit op 'n mikrorekenaar te implementeer nie. Verskeie modelle is al met ISOQUAD in SA gekonstrueer (bv. modelle vir die Sishen-akwifer (Lynch, 1982); die Omaruru Delta-akwifer (Van Tonder en Botha, 1983) en die Grootfontein-akwifer (Janse van Rensburg *et al.*, 1985). Na voltooiing van hierdie ondersoek met ISOQUAD, is die modelle nooit weer geloop nie, hoofsaaklik omdat rekenaars van die IBM 370 tipe nie algemeen beskikbaar en toeganklik is vir gebruikers nie. Die beskikbaarheid van 'n soortgelyke program as ISOQUAD op 'n mikrorekenaar sou dus hierdie probleem uitgeskakel het.

Daar is dus besluit om 'n program soortgelyk aan ISOQUAD vir 'n mikrorekenaar te ontwikkel. Die program word AQUAMOD genoem en bestaan uit twee dele, nl.

- 'n twee-dimensionele grondwatervloei-model (AQUAMOD1); en

- 'n twee-dimensionele grondwaterbesoedelingsmodel (AQUAMOD2) wat op die Galerkin eindige element metode berus.

Die rekenaarprogram loop op 'n IBM aanpasbare mikrorekenaar van 520 K geheue en gebruik FORTRAN 77 as rekenaartaal.

AQUAMOD1

AQUAMOD1 is 'n rekenaarprogram wat die beweging van grondwater in die versadigde sone beskryf. Die model implementeer 'n twee-dimensionele Galerkin eindige element metode met lineêre basisfunksies om die algemene grondwatervloei vergelyking te benader. Ingeslote-, semi-ingeslote- en water-tafelakwifere kan deur die program hanteer word. AQUAMOD1 verskaf as primêre antwoord die watervlakhoof by elke knooppunt in die netwerk as 'n funksie van tyd. Die gemiddelde grondwatersnelheid by elke element in die gebied kan ook verkry word.

Teoretiese agtergrond van AQUAMOD1

Galerkin se metode word toegepas op die bekende twee-dimensionele grondwatervloei vergelyking:

$$T \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) = S \frac{\partial h}{\partial t} + Q + \frac{K'}{l'} (H_w - h)$$

waar

T = transmissiwiteit in m²/d

S = bergingskoeffisiënt

Q = pomptempo in m³/d

h = drukhoof in akwifer

K' = hidrouliese geleiding van die lekkende laag in m/d

l' = dikte van die lekkende laag

H_w = drukhoof in die lekkende laag

Deur van die proefoplossing $h(x,y,t) = \sum_{i=1}^N h_{1i}(t)N_{1i}(x,y)$

(waar $h_{1i}(t)$ = drukhoof by tyd t en $N_{1i}(x,y)$ = knooppuntbasisfunksie, L = die knooppuntnommer en N = aantal knooppunte in die gebied is) gebruik te maak, lewer die gewegde residu

*To whom all correspondence should be addressed.
Received 5 December 1986.

oplossing van Galerkin die volgende matriksvergelyking:

$$[G]\{h\} + [P]\left\{\frac{\partial h}{\partial t}\right\} = \{f\} \quad (1)$$

waar G die geleidingsmatriks is met tipiese elemente:

$$G_{Li} = \iint (T_x \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_i}{\partial x} + T_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_i}{\partial y} + \frac{K' N_i N_i}{l'}) dx dy$$

en P die styfheidsmatriks is met tipiese elemente:

$$P_{Li} = \iint S N_i N_i dx dy$$

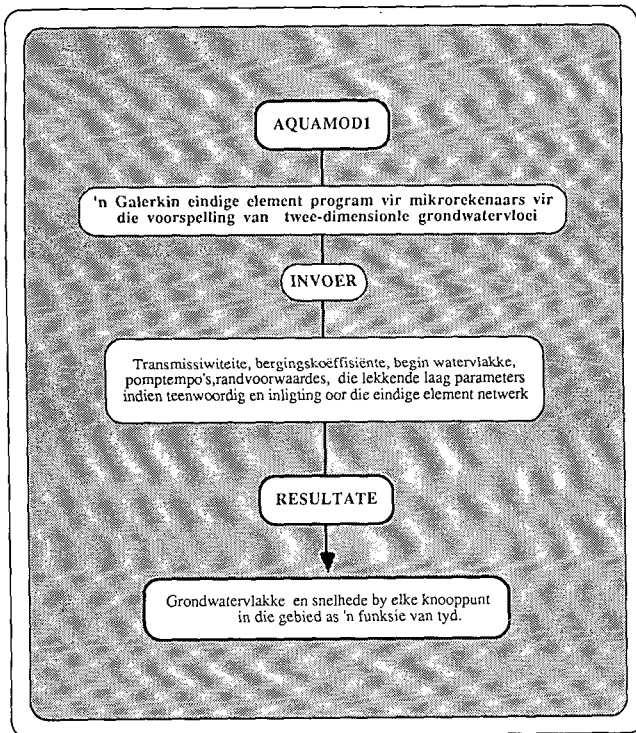
en {f} die kolomvektor is wat die randvoorwaardes en die ander bekendes bevat.

Die dubbel integraal in bostaande vergelyking word deur middel van Gauss-integrasie opgelos.

Vergelyking (1) is 'n eerste orde differensiaalvergelyking. Om dit op te los word gebruik gemaak van 'n implisiete eindige verskilbenadering. Nou word vergelyking (1)

$$([G] + [P]/\Delta t) \{h\}^{t+\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} [P]\{h\}^t + \{f\} \quad (2)$$

waar die regterkant bekende waardes is.



Figuur 1

Voorstelling van die werking van die rekenaarprogram AQUAMOD1.

Die matriks $[G] + [P]/\Delta t$ is simmetries, wat die oplossing van (2) vergemaklik deur dit as 'n bo-driehoekige matriks te skryf. Hierdie matriks is nie alleenlik yl nie, maar ook 'n bandmatriks wat die oplossing verder vergemaklik.

Netwerkgenerator

Daar bestaan 'n opsie in AQUAMOD1 wat 'n eindige element netwerk kan genereer. Punte van kardinale belang in 'n gebied soos die posisie van grense en boorgate word aan AQUAMOD1 verskaf. 'n Reghoekige rooster word gegenereer en met behulp van die PROCAD grafiese sisteem word hierdie rooster dan nou oor die akwifere gepas en gerek om knooppunte met die kardinale punte in die akwifere te laat ooreenstem. Hierdie opsie is baie tydeffektief en antwoorde van 'n akwifere-simulasie kan binne enkele minute met behulp van hierdie generator verkry word.

Invoer van AQUAMOD1

Nadat die eindige element netwerk vir die akwifere opgestel is, benodig AQUAMOD1 die volgende parameters as invoer:

- Die (x,y)-koördinaat van elke knooppunt in die netwerk.
- Posisies van observasie- en produksieboorgate.
- Waarde vir die transmissiwiteit (T) en bergingskoeffisiënt (S) by elke knooppunt.
- Die pomptempo van elke boorgat in m^3/d . Daar bestaan 'n opsie in die model waarmee pompe aan en af geskakel kan word of teen nuwe pomptempos bedryf kan word.
- Die begin watervlakhoof by elke knooppunt.
- Die grensvoorwaardes by elke randknooppunt in die netwerk. Dirichlet- of Neumannvoorwaardes kan ingevoer word.
- Die knooppuntnummers van elke element in die netwerk.

Resultate van AQUAMOD1

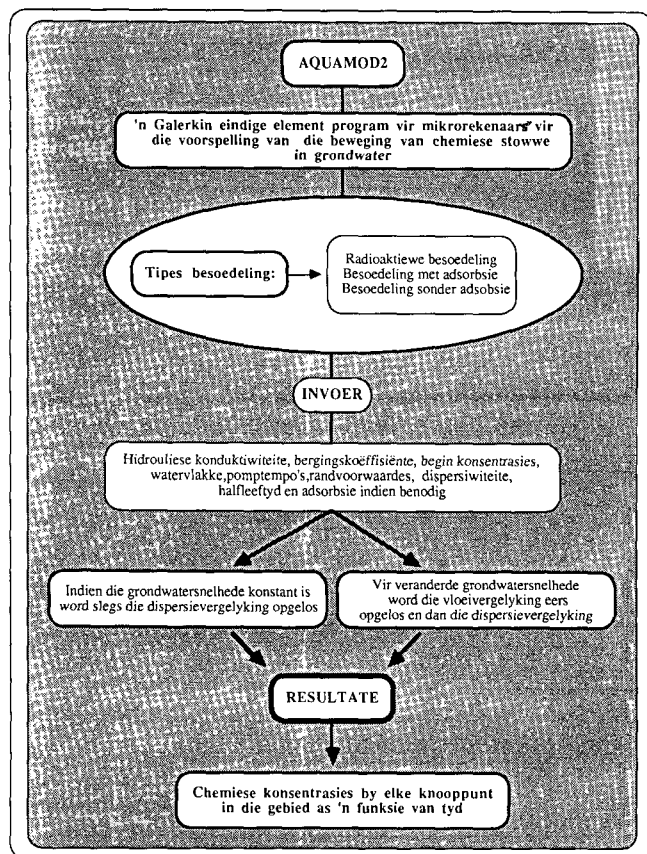
Die model verskaf die volgende resultate:

- Watervlakhoofde as funksie van tyd (die gebruiker kan vir die model vooraf sê by watter tye watervlakhoofde verlang word). Opsies in AQUAMOD1 gee aan die gebruiker die keuse van 'n wye verskeidenheid van hoe die watervlakhoofde uitgedruk moet word. Die watervlak by elke knooppunt kan bv. in tabelvorm verkry word of 'n lêer van (x,y,watervlak) vir elke tyd kan verkry word. Die laaste is veral baie handig indien watervlakkontoere met behulp van ondersteuningsprogramme soos PLOT88, verkry wil word.
- Die gemiddelde grondwatersnelheid van elke element by elke tydstep.

Figuur 1 gee 'n opsomming van die invoer en uitvoer van AQUAMOD1.

AQUAMOD2

AQUAMOD2 is 'n rekenaarprogram wat die beweging van chemiese elemente deur die versadigde sone van 'n akwifere beskryf. Die probleem van grondwaterbesoedeling kan met behulp van AQUAMOD2 ondersoek word. Die wiskundige basis



Figuur 2

Voorstelling van die werking van die rekenaarprogram AQUAMOD2.

van AQUAMOD2 is dieselfde as vir AQUAMOD1 behalwe dat die dispersievergelyking ook nou in aanmerking geneem word.

Teoretiese agtergrond van AQUAMOD2

Die Galerkin metode word op die volgende twee-dimensionele dispersievergelyking toegepas:

$$\frac{\partial}{\partial x} (n D_x \frac{\partial C}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (n D_y \frac{\partial C}{\partial y}) - \frac{\partial}{\partial x} (n C v_x) - \frac{\partial}{\partial y} (n C v_y) = \frac{\partial}{\partial t} (n R C) + n \lambda C$$

waar

- n = poreusheid
- v = sypelsnelheid in m/d
- D = dispersiekoëffisiënt
- R = retardasiekoëffisiënt = $[1 + (\rho K_d/n)]$, waar K_d = distribusiekoëffisiënt
- λ = $\ln 2$ /halfleeftyd

Die verdere wiskundige ontwikkeling is presies dieselfde as die van AQUAMOD1. 'n Belangrike verskil is egter dat die koëffisiënte matrigs nie meer simmetries is nie, sodat die bo-driehoekige oplosmetode nie meer gebruik kan word nie. Die dispersievergelyking is moeiliker om numeries op te los as die vloei-vergelyking en numeriese ossillasies kan dus maklik voorkom, veral as die tydspanlengte en die netwerkelemente te groot is.

AQUAMOD2 gebruik die Peclet- en die Courant-getal om hier-voor te toets en wel as volg:

$$\text{Peclet} = P_c = q \Delta l / D \text{ en Courant} = C_r = q \Delta t / \Delta l$$

waar q = Darcy snelheid en Δl = maksimum Δx of Δy van elemente. Om numeriese ossillasies te beperk moet die Peclet-getal kleiner as 10, en die Courant-getal kleiner as 1 wees.

AQUAMOD2 kan aangewend word vir die volgende tipes besoeiding:

- radioaktiewe besoeiding;
- besoeiding met 'n retardasiefaktor (adsorpsie vind plaas); en
- besoeiding sonder retardasie.

Invoer van AQUAMOD2

Die invoer van AQUAMOD2 is dieselfde as vir AQUAMOD1 behalwe dat die volgende bykomende inligting ook verskaf moet word:

- In plaas van die T-waarde by elke knooppunt benodig AQUAMOD2 die hidrouliese geleiding (K) in beide die x- en y-rigtings.
- Die konsentrasie van die chemiese stof word by elke knooppunt benodig.
- Die transversale en longitudinale dispersiwiteit asook die molekulêre diffusiekoëffisiënt moet verskaf word.

Resultate van AQUAMOD2

Indien die grondwatersnelhede met tyd verander, word dit deur AQUAMOD2 bereken. Uit hierdie snelhede en die dispersiwiteit bereken die model dan die dispersiekoëffisiënte van elke element in die netwerk. Vervolgens word die dispersievergelyking dan opgelos wat die konsentrasie van die chemiese element by elke knooppunt met verloop van tyd verskaf.

Figuur 2 gee 'n opsomming van die invoer en uitvoer van AQUAMOD2.

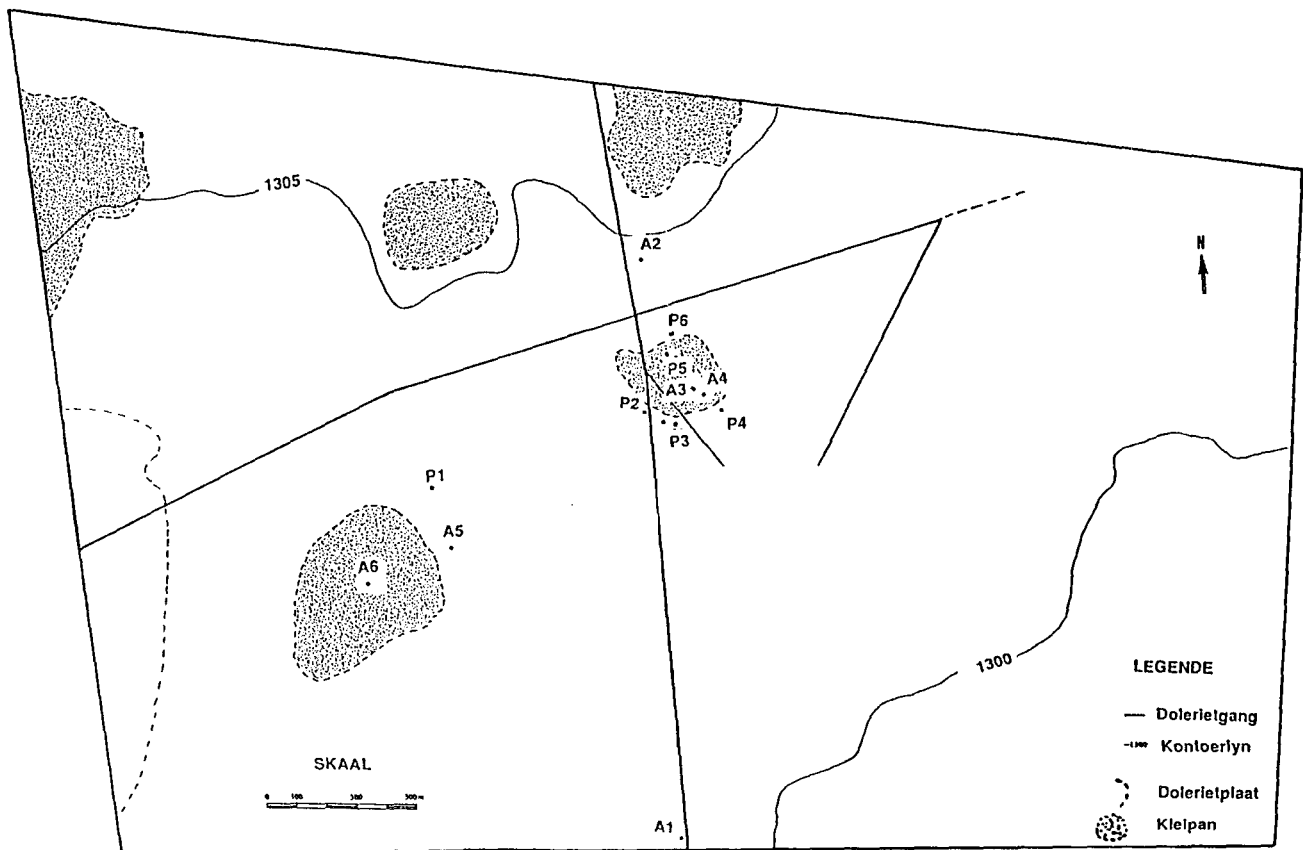
Die korrektheid van AQUAMOD (1 en 2) is aan die hand van analitiese oplossing getoets en geverifieer.

Toepassing van AQUAMOD1

Om die toepasbaarheid van AQUAMOD1 te toon, is 'n ondersoek na die benutting van grondwater op die plaas Putpan in die Bainsvlei-omgewing, 25 km wes van Bloemfontein, onderneem.

Fisiografie

Die oppervlaktopografie is redelik plat en verskil nie met meer as 5 m oor die hele gebied nie. Die omgewing word gekenmerk deur 'n aantal noord-wes strekkende kleipanne. Die reënval kom meestal gedurende die somermaande voor met 'n gemiddelde van 500 mm/a. Die grootste gedeelte van die gebied van 500 ha word omgeploeg vir die verbouing van grondboontjies en koring.



Figuur 3
Kaart van die plaas Putpan waarop AQUAMOD toegepas is.

Geologie

Die hele gebied word beslaan deur skalie en moddersteen van die westelike fasies van die Ecca Groep van die Karoo-Opeenvolging. Dolerietintrusies kom as gange en plate voor (Fig. 3).

Geohidrologie

Grondwater word teen 'n tempo van gemiddeld 20 000 l/h uit 6 produksieboorgate (genommer P1 tot P6 in Figuur 3) onttrek. Hierdie water word gebruik om 50 ha koring en grondboontjies met behulp van 'n spilpunt te besproei. Die lewerings van hierdie produksieboorgate wissel tussen 18 000 en 76 500 l/h. Die water is gevind op dieptes wat wissel tussen 24 en 37 meter onder die grondoppervlak. Die goeie lewerings van die boorgate kan hoofsaaklik toegeskryf word aan die teenwoordigheid van dolerietgange in die gebied.

Grondwaterbeweging word in die gebied gemonitor deur gebruikmaking van 6 observasieboorgate (A1 tot A6 in Figuur 3). Toe die gate in 1984 geboor is, was die watervlakushoogte gemiddeld 6 m onder die bek van die boorgate. Tans is die regionale rusvlak op gemiddeld 10 tot 11 m onder die bekhoogte. Na alle waarskynlikheid is daar dus myning van grondwater.

Twee pomp-toetse (by boorgat P1 en P5) is uitgevoer om die T en S waardes van die akwifer te kry. Die gebied naby boorgat P1 het 'n gemiddelde $T = 120 \text{ m}^2/\text{d}$ en $S = 0,003$ gelewer terwyl die akwifer in die omgewing van P5 'n $T = 550$ en $S = 0,007$

naby die gange, en 'n $T = 55$ en $S = 0,005$ weg van die gange gelewer het.

Model

Die netwerkgenerator van AQUAMOD1 is gebruik by die opstelling van die eindige element rooster van Figuur 4. Die gebied is in 301 elemente met 340 knooppunte verdeel. Om die grense goed te kan beheer is 'n ry smal elemente vir die rande gebruik. Die linkerkant van die gebied is as 'n Neumann-grens van geen vloei benader terwyl die ander grense as voorgeskrewe Neumann-grense benader is.

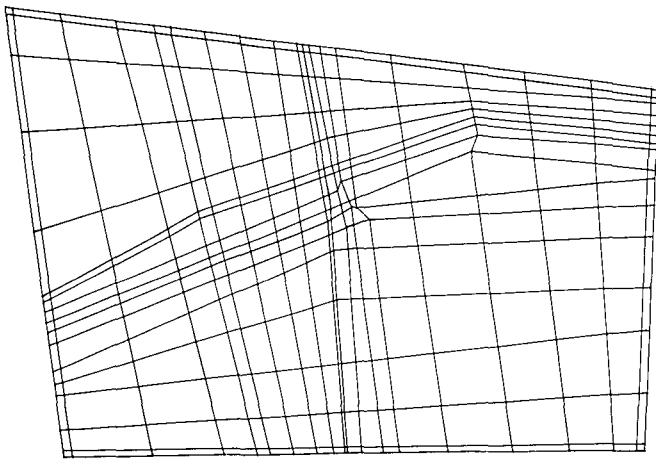
Tydens die yking van die model is gepoog om die gedrag van die waargenome watervlakke so goed as moontlik na te boots. In welke mate hierin geslaag is kan duidelik uit Figuur 5 gesien word wat die werklike en gesimuleerde watervlak by 2 van die 6 observasieboorgate toon. Die ander 4 observasieboorgate het 'n soortgelyke akkuraatheid getoon. Figuur 6 toon die verwagte grondwatervlakreaksies vir die volgende 7 maande soos deur AQUAMOD1 voorspel.

Om die effektiwiteit van AQUAMOD1 te illustreer kan die volgende gegewens van die projek genoem word:

- Die opstel van die data en die invoer daarvan aan AQUAMOD1 het 8 h geduur.
- Die eerste resultate was dus binne 1 d bekend.

- Die yking van die model het 3 d geduur.
- Die konstruksie en yking van die model het dus binne 1 week plaasgevind, wat as baie goed beskou kan word.
- Die tyd geneem vir 1 tydstepberekening is 88 s. 10 Tydstappe is binne 15 min op die mikro-rekenaar uitgevoer. Hierdie 10 tydsteppe het 'n periode van 180 d gedek.

Gemeet aan 'n soortgelyke model wat onlangs op die hoofrekenaar van die UOVS uitgevoer is en 2,5 maande geneem het vir konstruksie en yking, is AQUAMOD1 dus hoogs tyd- en koste effektief. Weens die groot mobiliteitsvermoë van mikrorekenaars, is simulaties dus nie meer net gebonde aan plekke waar hoofraamrekenaars beskikbaar is nie.



Figuur 4
Eindige element netwerk soos gebruik deur AQUAMOD.

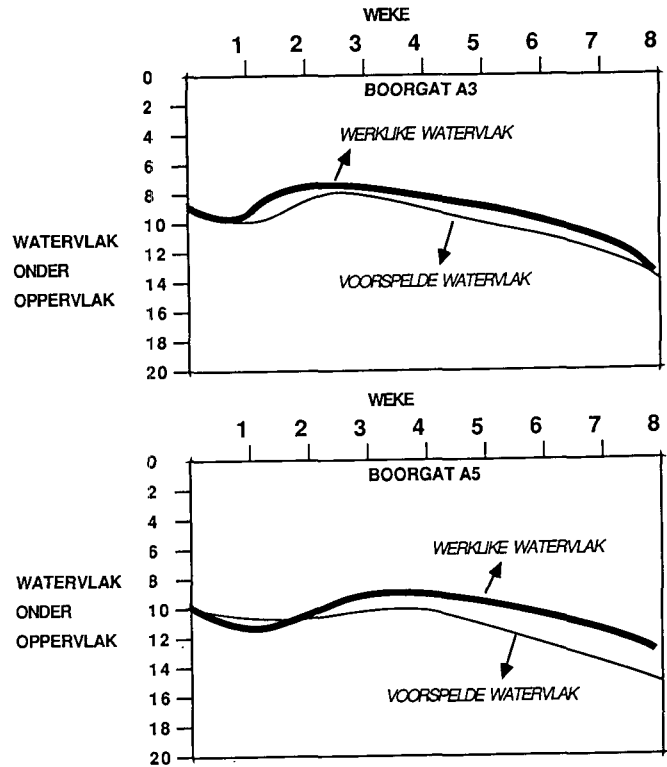
Toepassing van AQUAMOD2

Dieselfde akwifer as vir die gevallestudie by AQUAMOD1 sal beskou word. Al wat ekstra benodig word vir hierdie oefenloop is die longitudinale en transversale dispersiwiteite. 'n Eenvoudige injeksietoets wat met NaCl uitgevoer is, het 'n longitudinale dispersiwiteit van 5 m gelewer. Vir die transversale dispersiwiteit is aangeneem dat dit een vyfde die waarde van die longitudinale dispersiwiteit is.

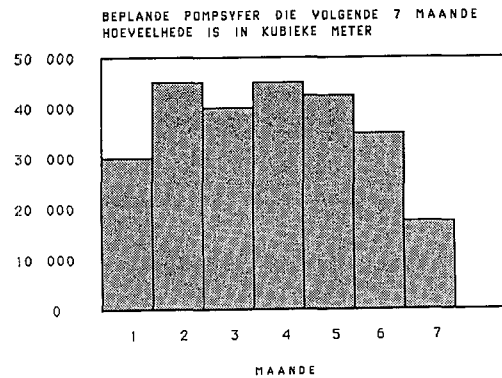
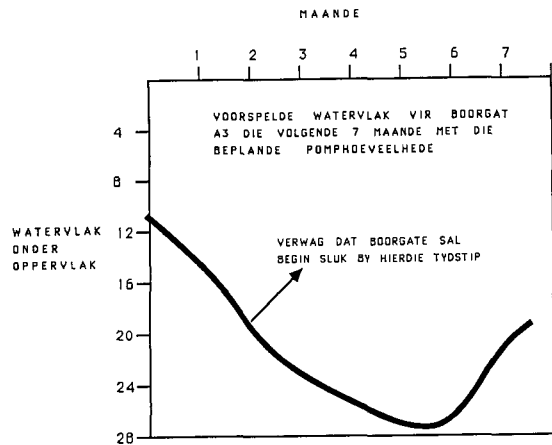
Veronderstel dat besoedeling in die suid-oostelike hoek van die akwifer plaasvind. Die bron van besoedeling het 'n genormaliseerde konsentrasie van 1. Figuur 7 toon hoe AQUAMOD2 die beweging van die besoedelingspluim voorspel.

Gevolgtrekking

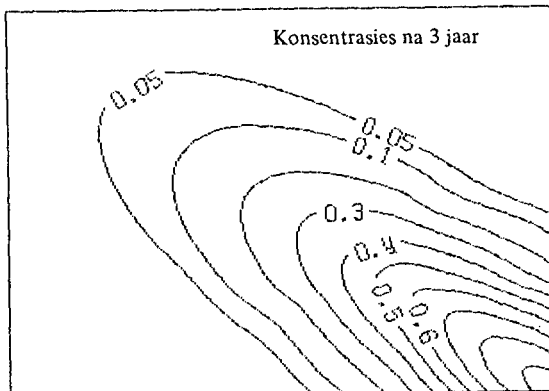
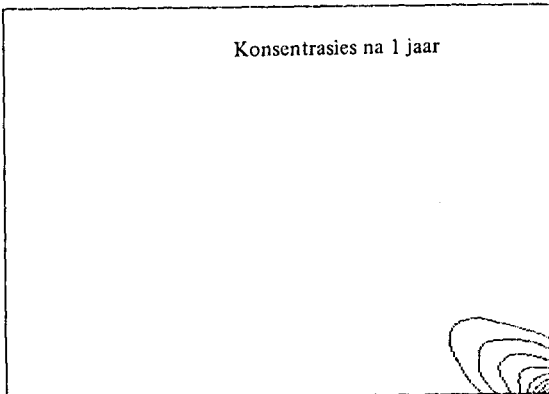
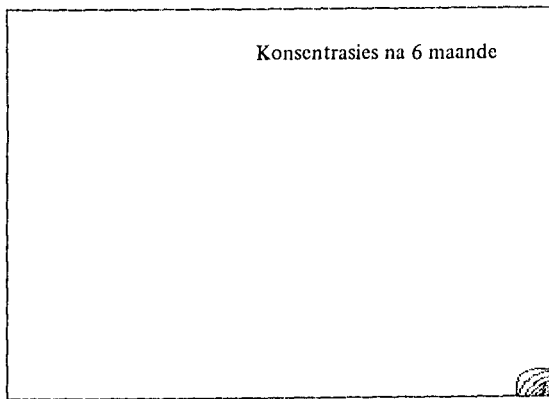
Die model AQUAMOD kan handig deur instansies soos munisipaliteite, myne, staatsdepartemente en grondwaterkonsultante in SA gebruik word om ons grondwaterbronne beter te verstaan en te benut. Die groot voordeel van AQUAMOD lê daarin dat die program gebruiksmaklik is. Persone sonder enige kennis van numeriese metodes kan die program dus gebruik.



Figuur 5
Vergelyking tussen die gemete- en voorspelde watervlak deur AQUAMOD1.



Figuur 6
Watervlakreaksie soos deur AQUAMOD1 voorspel vir die volgende 7 maande vir die beplande pomptempo's soos aangedui.



Bedanking

Graag word Prof. F.D.I. Hodgson, Direkteur van die Instituut vir Grondwaterstudies, bedank vir sy volgehoue belangstelling met die ontwikkeling van die programme asook die aankoop van die mikrorekenaar wat vir die ontwikkeling van AQUAMOD gebruik is. 'n Spesiale woord van dank aan Mej. A. Wierenga wat verantwoordelik was vir die praktiese insameling van die geohidrologiese gegewens van Putpan asook die kalibrasie van die model.

Verwysings

- JANSE VAN RENSBURG, H. (1985) 'n Ondersoek na die benutting van grondwater in die Grootfonteinkompartement (Wes-Transvaal). Ongepubliseerde M.Sc.-verhandeling, UOVS, Bloemfontein.
- LYNCH, S.D. (1982) Grondwatermodellering en parameteridentifikasie van die Sishen-akwifer. Ongepubliseerde M.Sc.-verhandeling, UOVS, Bloemfontein.
- PINDER, G.F. (1974) Galerkin-finite element models for aquifer simulation. Water Resources Program, Department of Civil Engineering, Princeton University, USA.
- VAN TONDER, G.J. en BOTHA, J.F. (1983) Modelling water-levels and contaminant transport in the Omaruru Delta. Verslag aan die Sekretaris van Waterwese van SWA, Windhoek.

*Figuur 7
Beweging van die
besoedelingspluim soos deur
AQUAMOD2 voorspel. 'n
Kontoerwaarde van 0,05 is as
afsnypunt gebruik. Die
ondersteuningsprogram PLOT88 is
gebruik om die kontoerkaart mee
te trek.*