

Numerički eksperiment u cilju smanjenje neodređenosti 3D modela transporta zagađenja u podzemnim vodama

Dr Dragan Kaludjerovic dipl.ing.hidrogeologije

Email: advancedgwt@gmail.com

Mobilni: +381-62-965-1748

Abstrakt:

Značajne prostorne i vremenske varijacije u parametrima koje kontrolišu širenje zagađenja u podzemnim vodama (brzina podzemnog toka, disperzivnost, faktor retardacije...) su primarni faktor koji doprinosi visokom stepenu neodređenosti u simulacijama transporta zagađenja. Ovu vrstu neodređenosti je teško kvantifikovati i obično je potrebno sprovesti intenzivne terenske radove da bi se došlo do pouzdanih vrednosti ovih parametara. Druga vrsta neodređenosti je numeričkog porekla i leži u numeričkoj aproksimaciji advektivno - dispersive jednačine (Benett, Zheng 1995). Fundamentalna poteškoća u rešavanju jednačine transporta zagađenja je što u istoj jednačini postoji i prvi (advekcija) i drugi (disperzija i molekularna difuzija) izvod. I pored toga što je ovu vrstu neodređenosti lakše proceniti, njena kvantifikacija je značajan proces koji se može uraditi numeričkim eksperimentom.

Upotreba "klasičnih" metoda konačnih razlika ili konačnih elemenata ograničena je Peclet-ovim i Courant-ovim brojem ($Pe < 4$ i $Co < 1$) koji kontrolišu numeričke oscilacije i numeričku disperziju. Ovo je ozbiljno ograničenje posebno imajući u vidu male vrednosti vertikalne disperzivnosti kod 3D modela (Gelhar 1992). Kao alternativa često se koristi MOC metod (metod karakteristika) jer daje najbolje rezultate za vrednosti Peclet-ovog broja veće od 10, omogućavajući grublju diskretizaciju modela kako u horizontalnom tako i u vertikalnom pravcu. Obično, ovo je razlog da se umesto konačnih razlika ili elemenata koristi MOC metoda u modelima transporta zagađenja. Međutim, preciznost izračunatih koncentracija je i dalje pod uticajem rezolucije mreže i gruba diskretizacija može uzrokovati značajnu numeričku grešku posebno ako je broj čestica u modelu mali. U cilju ispitivanja numeričke greške rešenja MOC metode urađena je serija simulacija.

Abstract:

The significant spatial and temporal variations of parameters that control spreading of contaminants in groundwater (velocity of ground water, dispersivity, retardation factor...) are the primary factors that contribute to high level of uncertainty in contaminant transport modeling. This kind of uncertainty is hard to quantify and often requires intensive field investigation. A different type of

uncertainty arises from numerical approximations of the advection - dispersion equation (Benett, Zheng 1995). The fundamental difficulty in solving transport governing equation is that spatial first derivative term (advection) and the spatial second derivative term (mechanical dispersion and molecular diffusion) co-exist in a same transport equation. Although this type of error is easier to assess, the quantification of this error is still important process that can be accomplished through numerical experiment.

Use of "classical" finite difference or finite element methods is constrained by Peclet and Courant criteria ($Pe < 4$ i $Co < 1$) that control the numerical dispersion and artificial oscillation. This is a serious limitation, especially due to low values of vertical dispersivities in 3D models (Gelhar 1992). As an alternative, the MOC method is often used as it produces the best results if Peclet number is greater than 10, thereby allowing coarser discretization of the model domain, both in horizontal and vertical direction. Usually this is the reason to switch to MOC method in contaminant transport simulations. However, precision of calculated concentration is still affected by grid resolution and a coarse grid can cause significant numerical error, especially if number of particles is low. In order to quantify the influence of numerical parameters on the solution (MOC method), a series of runs were performed.

Uvod

Problemi karakterizacije hidrogeološke sredine i određivanje parametara transporta zagađenja predstavljaju samo jednu vrstu problema koji se javljaju pri simulaciji transporta zagađenja. Druga vrsta problema je numeričke prirode. Teškoće nastaju usled same forme jednačine jer u jednoj istoj jednačini, advektivno – disperzionoj jednačini (Zheng 1999), koegzistiraju i prvi i drugi izvod što je uslovalo pojavu različitih metoda rešavanja.

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{i,j} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta v_i C) + q_s C_s + \sum R_n \dots\dots\dots(1)$$

gde je: θ - poroznost (-); C – koncentracija zagađivača rastvorenog u vodi, ML^{-3} ; t – vreme, T; x_{ij} - razdaljina duž kartezijanske koordinatne ose, L; D_{ij} – tenzor hidrodinamičke disperzije, L^2T^{-1} ; v_i – brzina podzemne vode, LT^{-1} ; q_s - zapreminski proticaj po jedinici zapremine izdani koji reprezentuje izvor (pozitivan) ili ponor (negativan), T^{-1} ; C_s - koncentracija zagađenja u izvoru ili ponoru, ML^{-3} ; $\sum R_n$ – suma hemijskih reakcija, $ML^{-3}T^{-1}$;

Kada prilikom simulacije dominira advekcija ($Pe^1 > 4$) dominira hiperbolični deo jednačine a kada je transport pod uticajem disperzije (male brzine kretanja podzemne vode, velike vrednosti koeficijent disperzije) jednačina po prirodi postaje parabolona. U poslednje četiri decenije razvijene su brojne numeričke metode za rešavanje advektivno–disperzione jednačine i one se mogu podeliti na Euler-ov, Lagrange-ov i mešoviti Euler – Lagrange-ov metod. U Euler-ovom metodu advektivno-disperzionu jednačina se rešava u fiksnoj mreži (konačne razlike ili konačni elementi) i metod efikasno rešava deo jednačine vezan za disperziju/hemijske reakcije ali je podložan greškama kada je advekcija dominantna tj. kada $Pe > 4$. Greške se mogu eliminisati gušćom diskretizacijom domena i manjim vremenskim koracima, ali po cenu vremenski dugih simulacija. Lagrange-ov metod rešava advektivno-disperzionu jednačinu u pokretnim koordinatama fiksne diskretizacije (random walk metod) i efikasan je za probleme gde dominira advekcija, ali je usled nedostatka fiksnog koordinatnog sistema podložan numeričkim greškama u uslovima heterogene sredine, velikog broja ponora/izvora kao i za složene granične uslove (Bennet, Zheng 1995). Mešoviti Euler-Lagrange-ov metod kombinuje prednosti prethodna dva metoda i to koristeći metod Lagrange-a za rešavanje advekcije (metoda praćenja čestice) a disperziju, izvore/ponore i hemijske reakcije rešava Euler-ovom metodom.

U programski paket koji je korišten u ovom radu, MODFLOW/MT3DMS, implementirani su Euler-ov i mešoviti Euler-Lagrange-ov metod koji omogućavaju rešavanje širokog spektra realnih problema. Za Euler-ov metod potrebno je ispunjenje uslova $Pe < 4$ i to zahteva gustu diskretizaciju, npr. Gelhar (1992) je pokazao da su vrednosti vertikalne dispersivnosti veoma male i to reda veličine 0.1 - 0.01m tako da je na debljinu izdani od 30 metara potrebno staviti 300 slojeva. Iz tog razloga u radu će biti ispitana MOC metoda ili metoda karakteristike koja spada u mešoviti Euler-Lagrange-ov metod i koja se koristi za $Pe > 10$. Metoda karakteristike prvi put je primenjena u porznoj sredini 1964. god. Gardner (Bear 1979) a programski paket koji podržava ovu metodu i koji je prvi put bio dostupan široj stručnoj javnosti napravljen je 1978. god. (Konikow i Bredehoeft 1978). Za rešavanje advektivnog dela u metodi MOC, implementiranoj u program MT3DMS, na početku simulacije u poljima se generišu čestice kojima se dodeljuju koordinate i koncentracije za dato polje. U toku vremenskog koraka čestice se pomeraju u skladu sa pravcem kretanja podzemne vode i prelaze u druga polja gde se na kraju vremenskog koraka njihova koncentracija osrednjava u zavisnosti od broja čestica u polju, koncentracija čestica kao i u odnosu na koncentracije sa početka vremenskog koraka. Ovako osrednjene koncentracije se pridružuju polju i koriste se za računanje promene koncentracije usled disperzije, izvora/ponora i hemijskih

¹ a) Peclet-ov broj: $Pe_i = \frac{|v_i|\Delta x_i}{D_{ii}}$ $i = x, y, z$; gde je v_i - veličina vektora brzine, Δx_i - veličina

polja modela i $D_{ii} = \alpha_i v_i$ - disperzija. Za jednodimenzionalni slučaj $Pe = \frac{v\Delta x}{D_{xx}} = \frac{\Delta x}{\alpha_l}$;

b) Courant-ov broj: $Cr = \frac{v_i\Delta t}{\Delta x_i}$; gde je v_i - veličina vektora brzine, Δt - vremenski korak, Δx_i - veličina polja modela

reakcija. Sabiranjem koncentracija dobijenih na osnovu advekcije i ostalih procesa dobija se konačna koncentracija u polju i time je završen jedan vremenski korak.

Osnovna karakteristika metode MOC je da praktično ne dolazi do pojave numeričke disperzije, dok se veštačke oscilacije kontrolišu Courant-ovim brojem. Glavni nedostaci metode su da je kompjuterski zahtevna i da može dovesti do grešaka u bilansu jer metoda nije bazirana na očuvanju mase u kontrolnoj zapremini i to važi naročito za nepravilnu geometriju izdani.

Numerički eksperiment

Kao osnova za numerički eksperiment poslužio je 3D model prve izdani u Vrbasu, prognozna varijanta, iz kojeg je izvučen lokalni model oko potencijalnog izvorišta (slika 1, slika 2 i slika 3). Diskretizacija lokalnog modela je izvršena sa 50x50 polja, a veličina polja je uniformna za ceo model i iznosi 76x92 m. Vertikalna diskretizacija je obuhvatila svih pet slojeva iz prethodnog modela, slika 3. Parametri izdani², granični uslovi i nivoi podzemne vode dobijeni hidrodinamičkom analizom su identični sa modelom prognoze na delu lokalnog modela (slika 1 i 2). Izvor zagađenja konstantne koncentracije $10000^3 \text{ mg l}^{-1}$ je lociran na oko 1000 metara od bunara na zapadnoj strani bunarskog polja duž reda 18 i to u prvom sloju, slika 2.

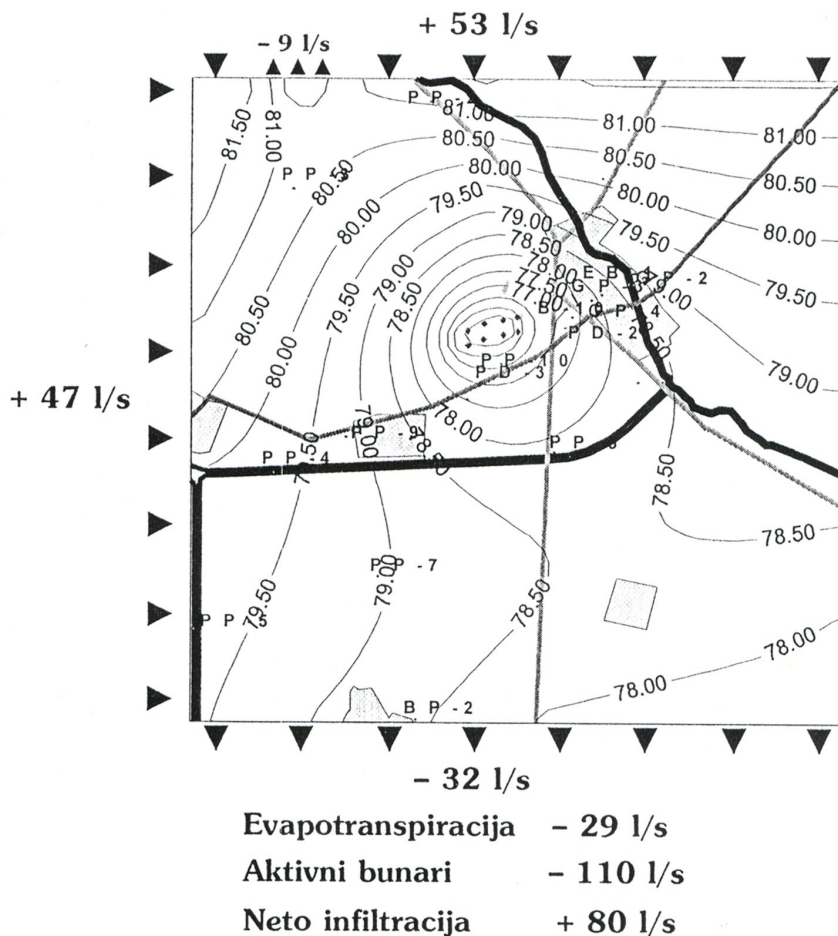
Ovakav položaj izvora zagađenja je izabran usled lakšeg prikazivanja rezultata i profil koji će biti prikazan praktično seče telo zagađenja na dve jednake polovine⁴. Usvojene vrednosti disperzivnosti su sledeće: $\alpha_l = 10 \text{ m}$, $\alpha_t = 1 \text{ m}$, $\alpha_v = 0.1 \text{ m}$ i generalno odgovaraju razmeri problema. Molekularna difuzija je $D_e = 1 \times 10^{-8} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$. Simuliran je konstantni izvor zagađenja u trajanju od 10000 dana (27.3 godine) a vrednosti Pe za sva tri pravca su sledeće: $Pe_x = 9.2$; $Pe_y = 76$; $Pe_z = 60 - 280$.

Tačnost simulacije metodom karakteristika zavisi u mnogome od broja čestica koje se inicijalno (i tokom simulacije) zadaju po poljima. Sa većim brojem čestica dobija se na preciznosti ali istovremeno dolazi i do znatnog produženja trajanja simulacije.

² Osnovni sloj ima koeficijent filtracije $1.8 \times 10^{-4} \text{ ms}^{-1}$ a međusloj $1 \times 10^{-7} \text{ ms}^{-1}$

³ Ova koncentracija je zadata da bi se izbegle greške zaokruživanja brojeva koje se mogu javiti ako su koncentracije male

⁴ Posmatrajući problem sa numeričke strane, implementacija hemijskih procesa ne predstavlja problem prilikom rešavanja advektivno - dispersione jednačine, tako da će za potrebe ovog eksperimenta biti tretirano konzervativno zagađenje koje podleže samo procesima advekcije i disperzije



Slika 1. Prognozni model na osnovu kojeg je urađen lokalni model

U programskom paketu MT3DMS primenjen je dinamički pristup generisanja čestica i u zavisnosti od relativnog gradijenta koncentracije, promenjiva $DCCELL^5$, i od korisnika zadatog parametra $DCEPS$, generišu se različite vrednosti broja čestica :

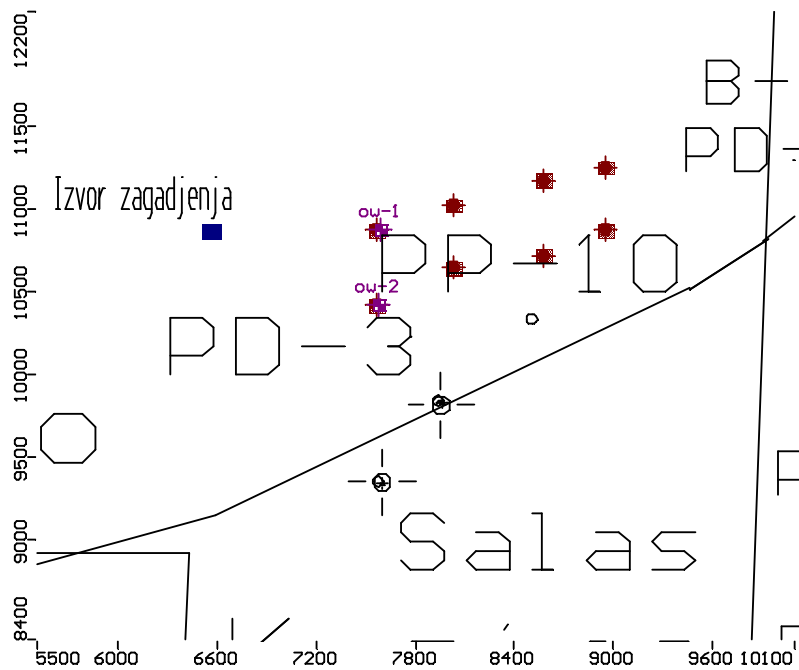
$$\begin{aligned}
 NP_{i,j,k} &= NPH && \text{ako je } DCCELL_{i,j,k} > DCEPS \\
 NP_{i,j,k} &= NPL && \text{ako je } DCCELL_{i,j,k} \leq DCEPS
 \end{aligned}$$

gde je :

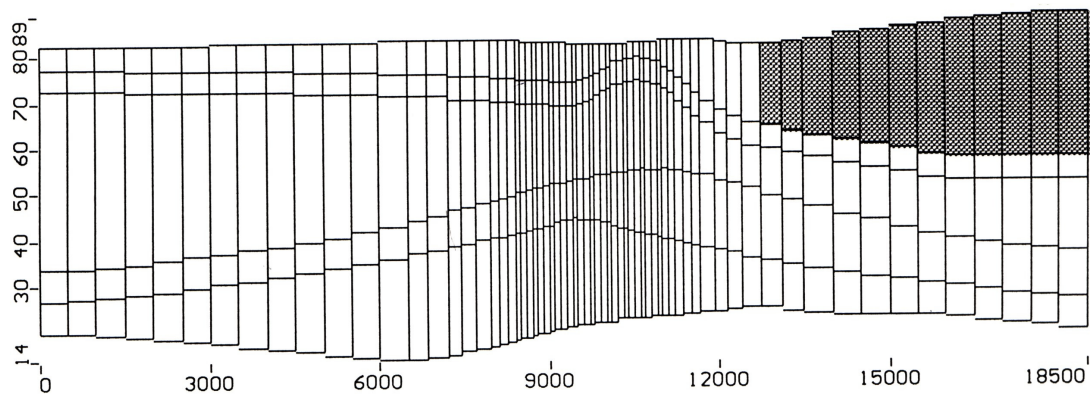
$NP_{i,j,k}$ - broj čestica u polju modela
 NPH i NPL - broj čestica koji se dodeljuje polju modela u zavisnosti od odnosa promenjive $DCCELL_{i,j,k}$ i $DCEPS$

⁵ $DCCELL_{i,j,k} = \frac{CMAX_{i,j,k} - CMIN_{i,j,k}}{CMAX - CMIN}$ gde su $CMAX_{i,j,k}$ i $CMIN_{i,j,k}$ maksimalne i minimalne koncentracije u polju i,j,k a $CMAX$ i $CMIN$ maksimalne i minimalne koncentracije u celom modelu

DCEPS - empirijski parametar



Slika 2. Površina koju obuhvata lokalni model



Slika 3. Poprečni presek lokalnog modela sa 5 slojeva (odnos horizontalne i vertikalne razmere je 1:80)

Za dati vremenski korak vrši se upoređenje vrednosti $DCCELL_{i,j,k}$ i $DCEPS$ za svako polje; ukoliko je $DCCELL_{i,j,k} > DCEPS$ u polje se ubacuje NPH dok se za suprotno ubacuje NPL čestica. Vrednost promenjive $DCEPS$ je empirijskog karaktera i preporuka je da se koriste vrednosti oko 10^{-5} (Zheng 1999).

Uprošćeno, ukoliko je relativni gradijent koncentracije blizak nuli i promena koncentracije usled advekcije je mala i u polje se ubacuje manji broj čestica, *NPL*, dok je u suprotnom broj čestica koje se ubacuju u polje veći, tj. *NPH*.

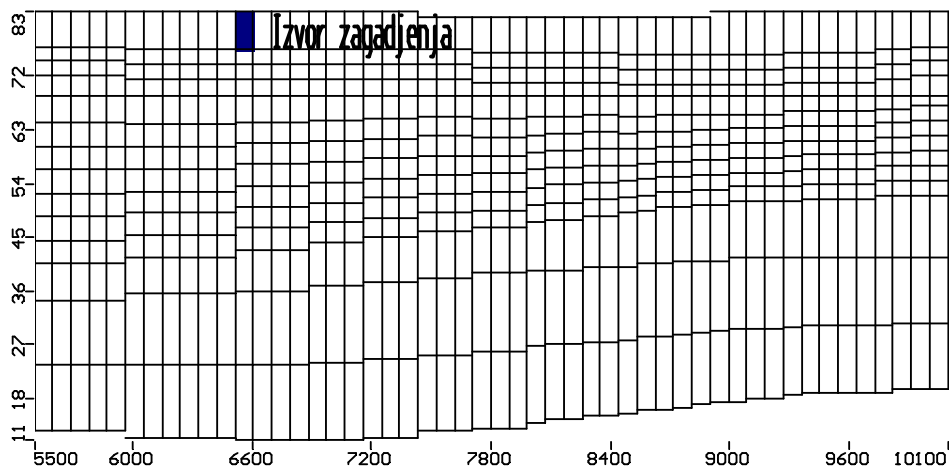
Takođe, prilikom eksperimenta menjane su vrednosti parametara *NPMIN* i *NPMAX* koji predstavljaju "okidače"; kada broj čestica u polju padne ispod broja kojim je definisana promenjiva *NPMIN* u zavisnosti od vrednosti *DCEPS* i *DCCELL* u polje se stavlja *NPL* ili *NPH* broj čestica a slično važi i za *NPMAX* parametar. U prvom krugu eksperimenta, drugi krug je rađen sa povećanom rezolucijom vertikalne diskretizacije, parametri su menjani na sledeći način:

Slučaj 1:	<i>NPL</i> = 0;	<i>NPH</i> = 16;	<i>NPMIN</i> = 2;	<i>NPMAX</i> = 30
Slučaj 2:	<i>NPL</i> = 0;	<i>NPH</i> = 32;	<i>NPMIN</i> = 4;	<i>NPMAX</i> = 50
Slučaj 3:	<i>NPL</i> = 4;	<i>NPH</i> = 64;	<i>NPMIN</i> = 8;	<i>NPMAX</i> = 90

Vreme trajanja simulacija su sledeća:

Slučaj 1 :	24 sekunde
Slučaj 2 :	28 sekundi
Slučaj 3 :	235 sekundi

Drugi krug simulacija rađen je sa povećanom vertikalnom diskretizacijom (umesto 5 slojeva dodato je još 9, ukupno 14 slojeva, slika 4) koja je u prethodnom modelu bila dosta gruba sa aspekta transporta simulacije.



Slika 4. Presek modela sa 14 slojeva duž reda u kojem je lociran izvor zagađenja

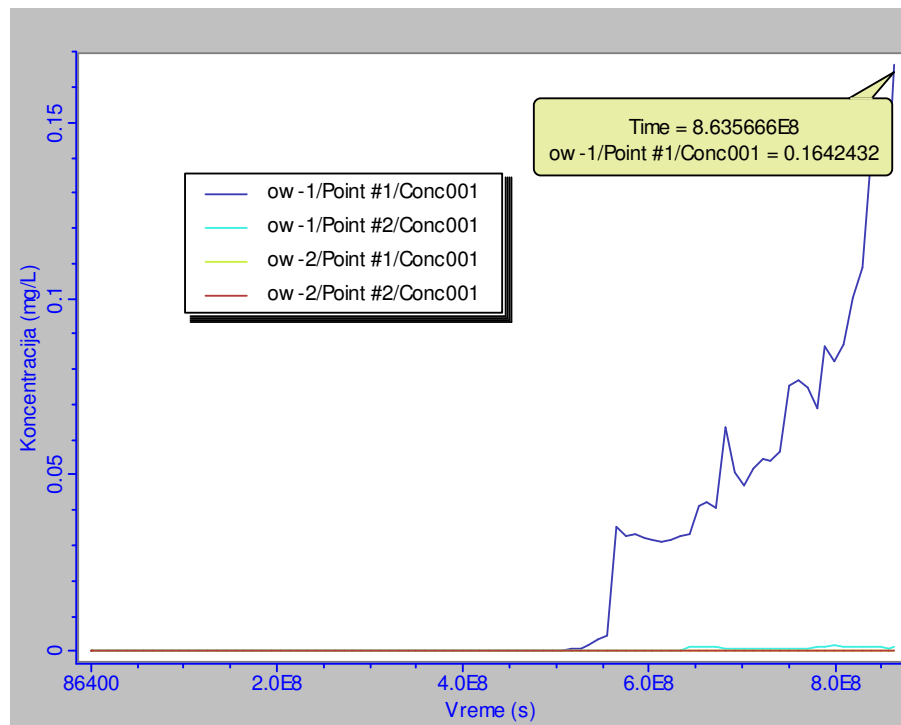
Rezolucija vertikalne diskretizacije takođe može znatno da utiče na tačnost rezultata jer je za pravilno definisanje putanje čestice koje "nose" koncentraciju gušća diskretizacija neophodna. Vrednosti Pe_z su smanjene na $Pe_z = 30-60$ što predstavlja oblast u kojem MOC metoda generalno postiže zadovoljavajuće rezultate (Zheng 1999). Takođe, menjan je broj čestica u poljima modela :

Slučaj 4: $NPL = 0$; $NPH = 32$; $NPMIN = 4$; $NPMAX = 50$
Slučaj 5: $NPL = 4$; $NPH = 64$; $NPMIN = 8$; $NPMAX = 90$

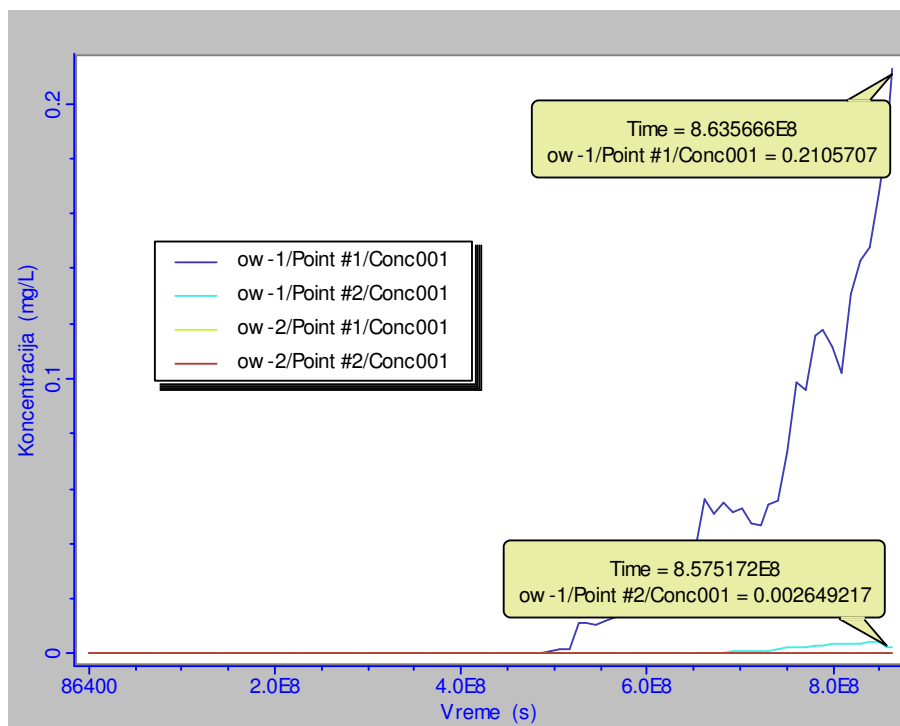
Vreme trajanja simulacija su sledeća :

Slučaj 4 : 280 sekundi
Slučaj 5 : 2700 sekundi

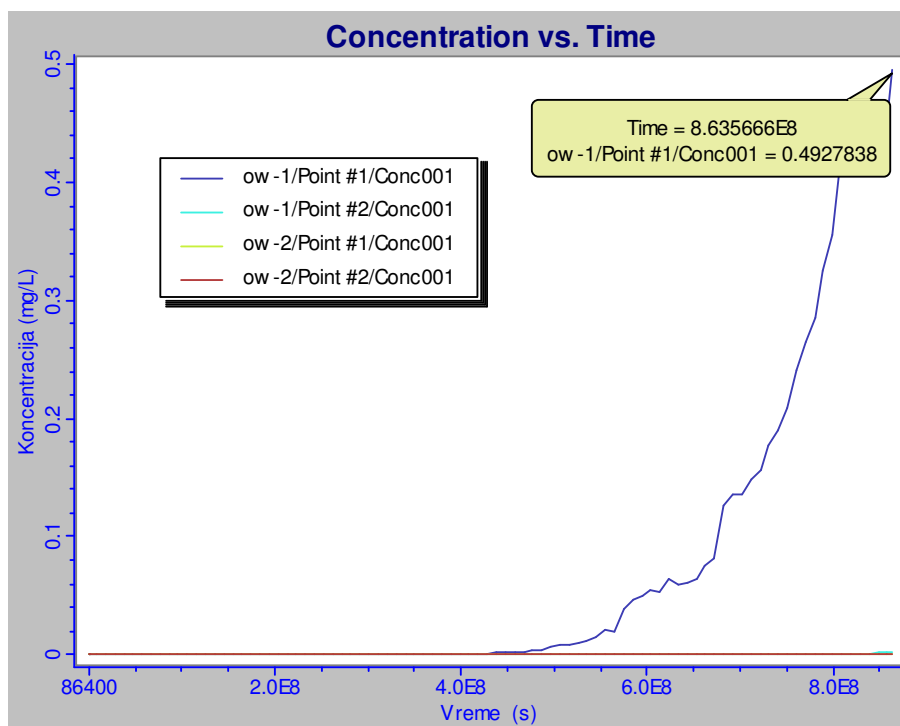
Promena koncentracija po vremenu date su na slikama 5 – 9 :



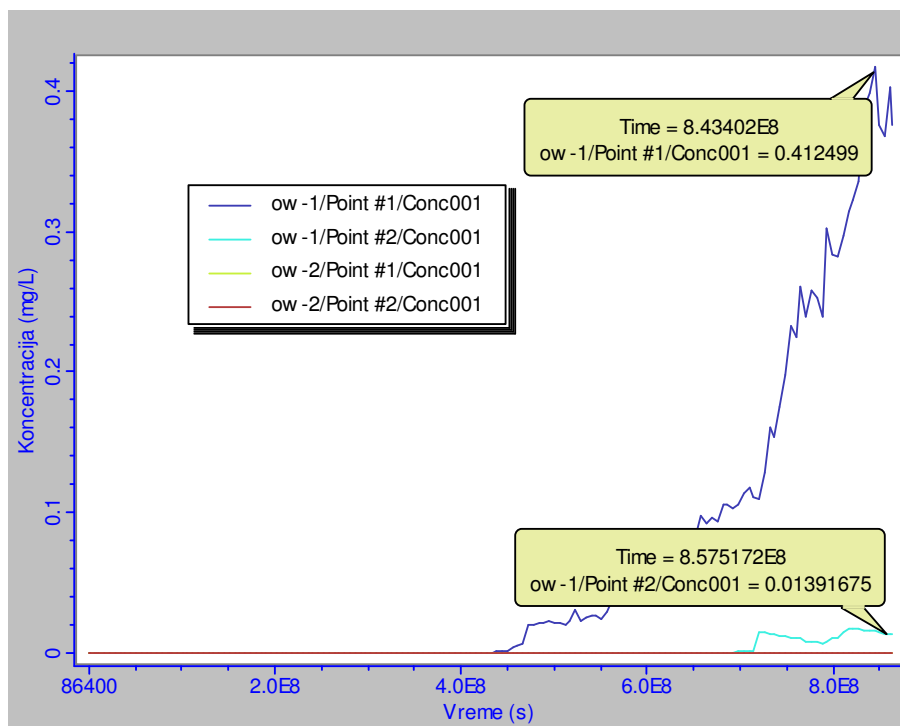
Slika 5. Prikaz promene koncentracije na osmatračkim objektima – slučaj 1



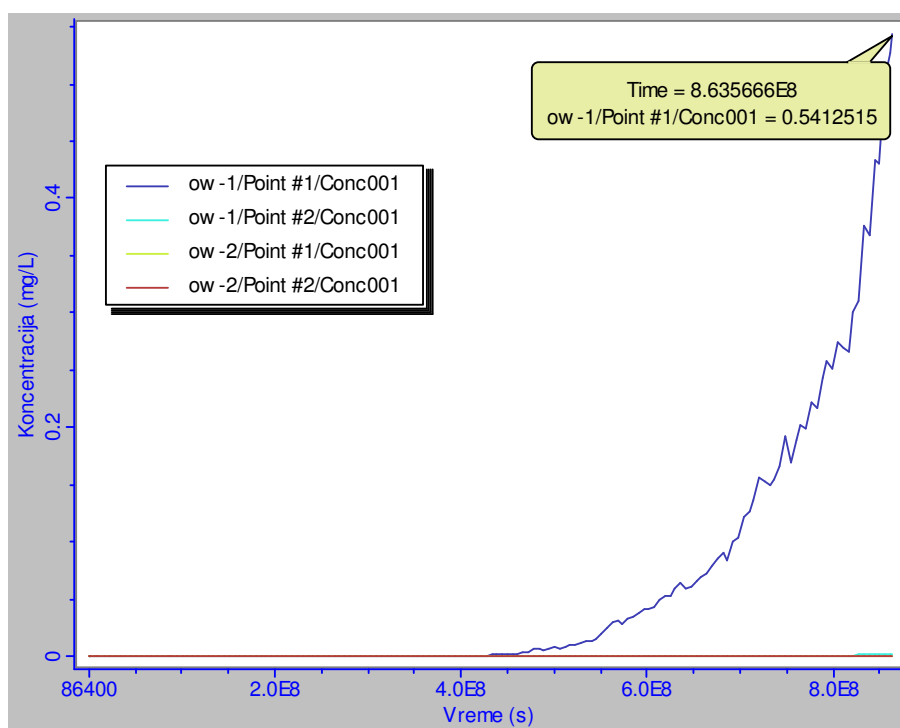
Slika 6. Prikaz promene koncentracije na osmatračkim objektima – slučaj 2



Slika 7. Prikaz promene koncentracije na osmatračkim objektima – slučaj 3



Slika 8. Prikaz promene koncentracije na osmatračkim objektima – slučaj 4

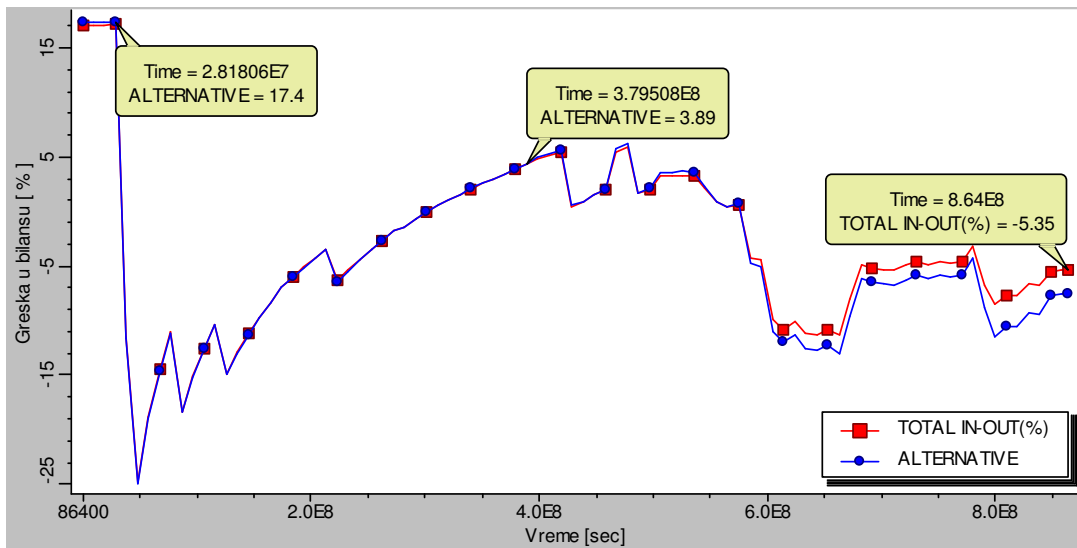


Slika 9. Prikaz promene koncentracije na osmatračkim objektima – slučaj 5

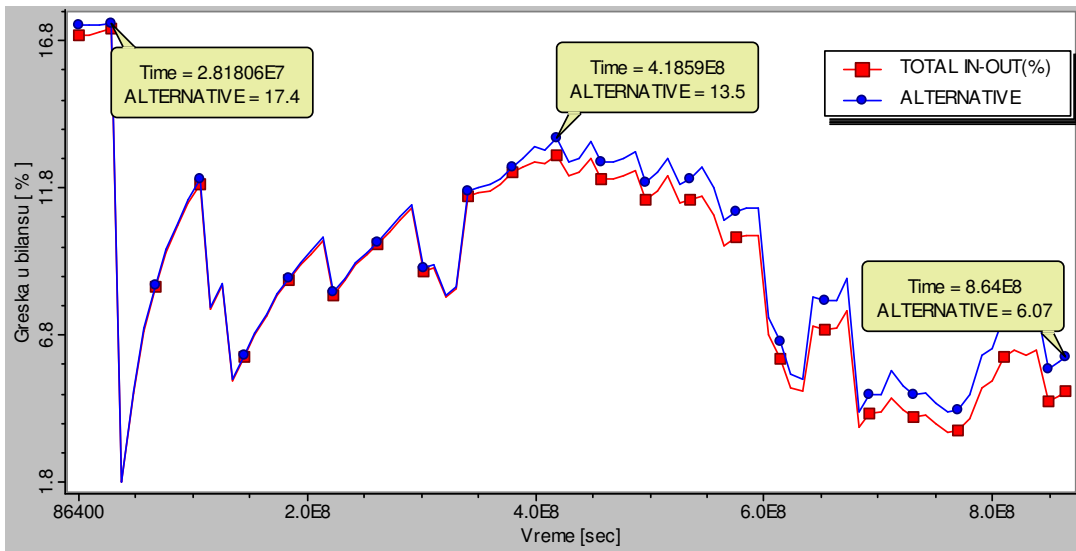
Mora se napomenuti da su na svakom osmatračkom objektu (ow-1 i ow-2, slika 2) postojale dve tačke na kojima se prati nailazak zagađenja, npr. ow-1/Point #1/Conc001 i ow-1/Point #2/Conc001, od kojih je prva locirana u trećem sloju a druga u petom sloju, tj. locirane su na sredini slojeva duž koga bunari crpe vodu. Vrednosti greške u bilansu mase za slučajeve 1 – 5 date su na slikama 10 – 14. Praćena su oba načina izračunavanja greške u bilansu tj. ALTERNATIVE i TOTAL IN – OUT.

Analiza rezultata numeričkog eksperimenta

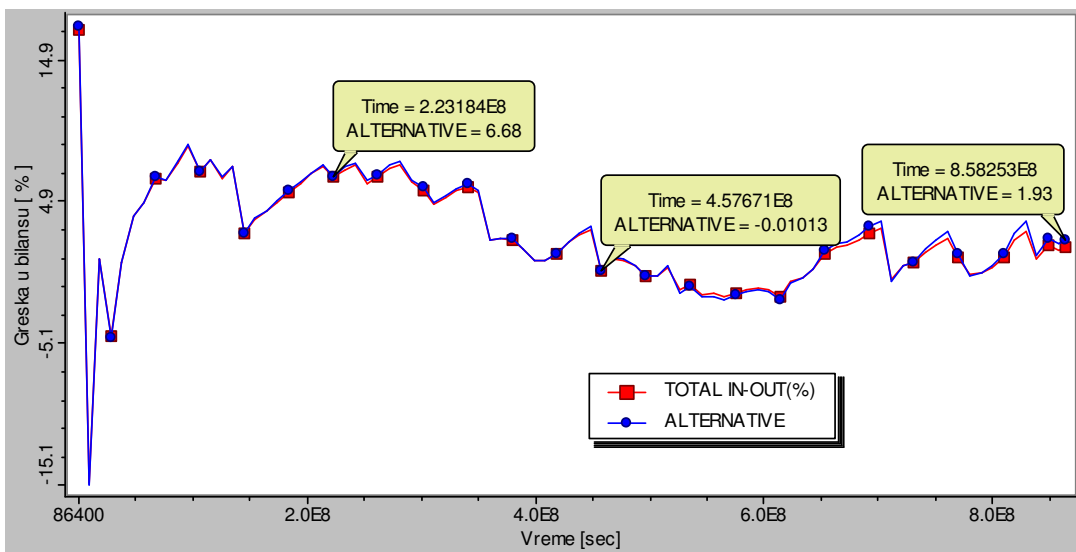
Za prva dva slučaja, vreme trajanja simulacije je kratko, oko 30 sekundi. Povećavanjem vrednosti parametrima $NPL = 4$ i $NPH = 64$ vreme trajanja simulacije se znatno povećava, za oko 10 puta, na oko 235 sekundi. Naknadnim simulacijama došlo se do zaključka da parametar NPL najviše doprinosi povećanju dužine simulacije. Parametar NPL određuje ponašanje modela u zoni gde su relativni gradijenti koncentracije mali a parametar NPH u zonama gde su relativni gradijenti koncentracije veći. Izjednačavanjem ova dva parametra dobilo bi se uniformno raspoređivanje čestica po poljima u modelu što doprinosi tačnosti simulacije, pogotovu u zonama sa nižim koncentracijama, ali po cenu znatno dužeg trajanja simulacije.



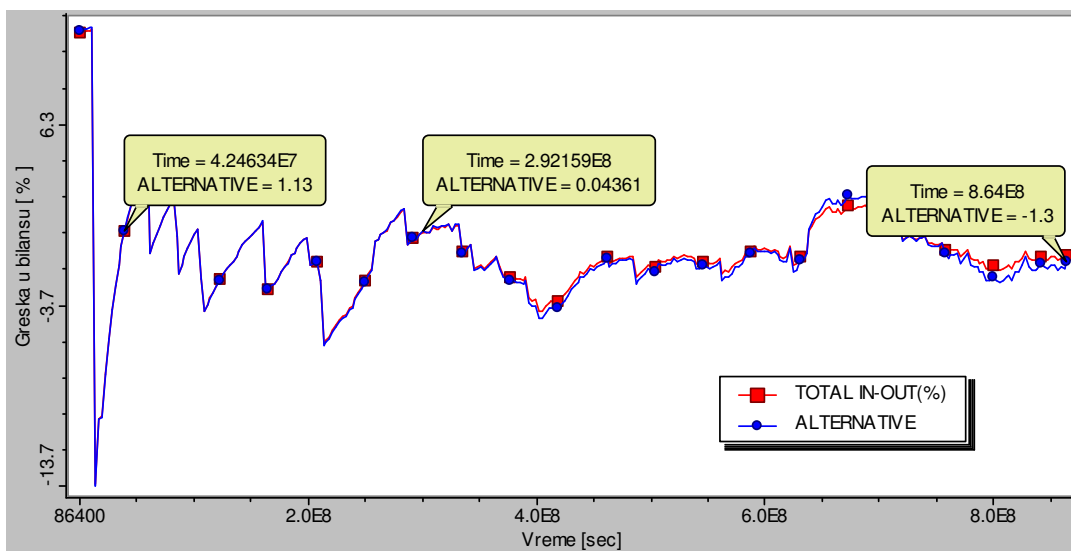
Slika 10. Prikaz promene greške u bilansu modela – slučaj 1



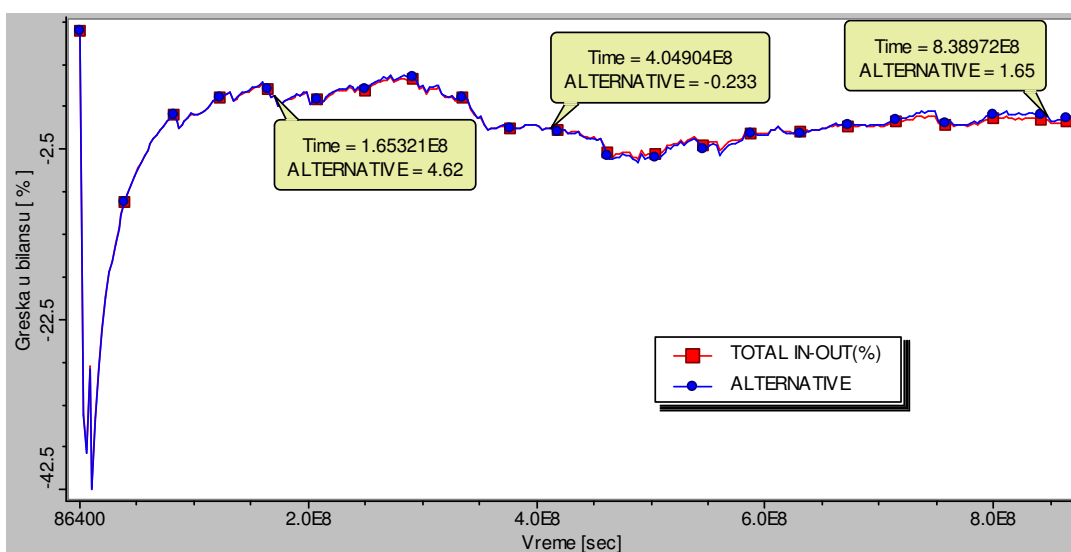
Slika 11. Prikaz promene greške u bilansu modela – slučaj 2



Slika 12. Prikaz promene greške u bilansu modela – slučaj 3



Slika 13. Prikaz promene greške u bilansu modela – slučaj 4



Slika 14. Prikaz promene greške u bilansu modela – slučaj 5

Upravo ova činjenica je uslovala dinamički pristup generisanju čestica po poljima modela. Sa povećanjem vrednosti *NPL* na 4 čestice praktično se u svakom polju minimalno generišu 4 čestice za razliku od prethodna dva slučaja kada se u poljima sa malim relativnim gradijentom koncentracije *DCCELL* nisu generisale čestice, *NPL* = 0. Takođe, povećanje vrednosti « okidača », *NPMIN* i *NPMAX*, utiče na vreme trajanja simulacije; model reaguje tek kada broj čestica u polju pređe 90 tj. kada broj čestica padne ispod 8 – slučaj 3 i tada postavlja *NPL* ili *NPH* čestica u polje.

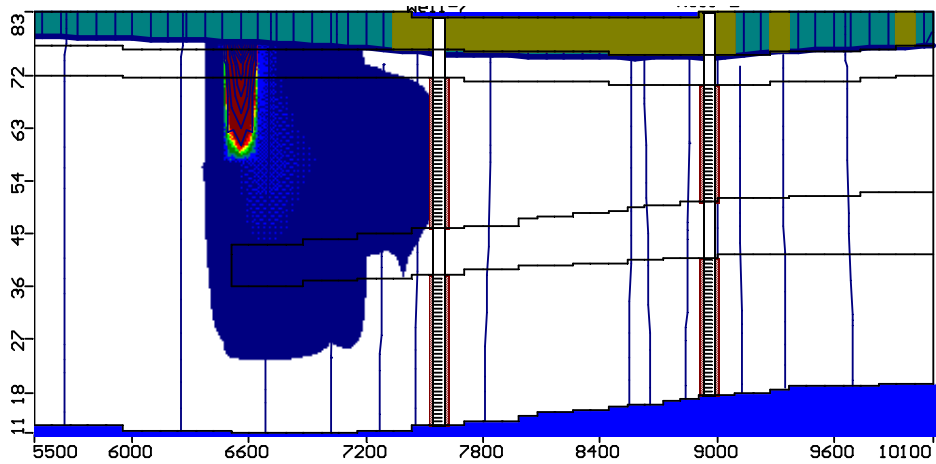
Za vreme eksperimenta praćena je vrednost greške u bilansu koji za MOC metodu može biti problematićan. Metod konaćnih razlika (ili elemenata) rešava jednaćinu koja je bazirana na oćuvanju mase zagaćdenja u polju modela i greška u bilansu je direktni pokazatelj greške u numerićkim operacijama (ako je bilans dobar ipak ne znaći da je rešenje taćno). Ove metode podrazumevaju da je greška u bilansu mala (manja od 1%). U MOC metodi svakoj ćestici se dodeljuje koncentracija i njihovim kretanjem se simulira advektivni proces. Te koncentracije se na kraju svakog vremenskog koraka osrednjavaju za dato polje i izraćunate vrednosti se dodeljuju nodu polja na osnovu ćega se raćuna bilans mase. Drugim rećima, MOC metoda po svojoj prirodi nije zasnovana na oćuvanju mase i greška u bilansu je generalno znatno veća nego kod metode konaćnih razlika. Mećutim, ova greška nije kumulativna i najveća je na poćetku simulacije u prvih nekoliko vremenskih koraka. Kao generalno pravilo može se uzeti da se u proraćunu javlja greška ukoliko greška u bilansu konstantno prelazi vrednost 10 – 15 % ili ako se greška u bilansu konstantno povećava (Zheng 1999).

Greška u bilansu za prva tri slućaja je generalno ispod 10 % mada i dalje pokazuje oscilacije. Sa povećavanjem ćestica oscilacije se nisu prigušile niti se greška bitnije smanjila. Tek sa povećanjem broja slojeva na 14, slućaj 4 i 5, oscilacije u bilansu postaju male i greška se stabilizuje na oko ± 2 %. Za ovaj slućaj eksperiment je jasno pokazao da nije dovoljno povećati broj ćestica u polju već i da diskretizacija igra znaćajnu ulogu u procentu greške bilansa mase. Sa povećavanjem broja slojeva distribucija ćestica po slojevima je postala znatno ujednaćenija što je i prouzrokovalo znatno manje greške i oscilacije u bilansu.

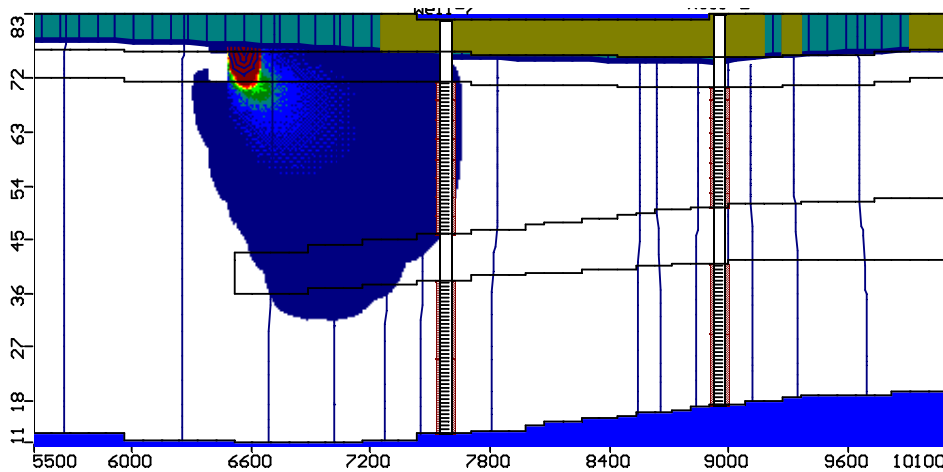
Oscilacije u koncentraciji na osmatraćkim objektima su takoćde posledica aproksimacije metode. U zavisnosti od velićine polja ćestice moraju da preću odrećeni put pre nego preću u susedno polje. Ukoliko je diskretizacija gruba, tj. velićina polja velika promena u koncentraciji u susednom polju usled advekcije je u trenutku dok ćestice ne izaću iz polja podcenjena a kada jedna ili više ćestica preću u susedno polje uticaj advekcije je precenjen. Sa povećanjem broja ćestica (u prva tri slućaja) i povećanjem broja slojeva primetno je peglanje krive koncentracije i oscilacije koncentracije su znatno manje.

Koncentracije fiktivnog zagaćdenja u vremenu praćena su na osmatraćkim objektima ow-1 i ow-2 (slika 2) koji su locirani na nodovima koji predstavljaju crpne bunare. Primetno je povećanje koncentracije na kraju perioda simulacije sa povećanjem broja ćestica i sa gušćom vertikalnom diskretizacijom. Mora se napomenuti da je za sve slućajeve korišćena Runge-Kutt-a metoda za pomeranje ćestica koja je preciznija u odnosu na drugu metodu koja je implementirana u program MT3DMS (Euler-ov alogritam prvog reda). Sa povećanjem broja ćestica simulacija postaje preciznija jer više ćestica definiše transport zagaćdenja dok se sa povećanjem vertikalne diskretizacije smanjuje numerićka disperzija usled grube šematizacije i telo zagaćdenja ne tone duboko kao u slućaju sa grubom šematizacijom. Masa zagaćdenja se koncentriše na manjoj zapremini (slika 15 i 16) što prouzrokuje povećanje koncentracije na osmatraćkim objektima (bunarima). Kao što se može videti sa slika 5 – 9 razlika u krajnjim koncentracijama na osmatraćkim objektima je i do 3 puta izmeću slućaja 1 i 5. Slićni rezultati bi se dobili i sa smanjivanjem disperzivnosti. Telo zagaćdenja na

slikama 15 i 16 predstavljeno je vrednostima koncentracija od maksimalne vrednosti 10000 mg l^{-1} (bordo boja) do vrednosti 0.1 mg l^{-1} (tamno plava boja). Ono što je zanimljivo je da se prilikom promene vertikalne diskretizacije nisu promenili nivoi podzemnih voda već samo koncentracije zagađenja na osmatračkim objektima.



Slika 14 Prikaz tela zagađenja, presek duž reda 18 – slučaj 1



Slika 15 Prikaz tela zagađenja, presek duž reda 18 – slučaj 5

Zaključak

Postavlja se pitanje koja je od svih ovih simulacija najpreciznija? Naravno, pretpostavlja se da slučaj 5 predstavlja reprezentativan slučaj⁶ ali se onda samo

⁶ Za ovakav slučaj ne postoji analitičko rešenje

po sebi postavlja pitanje i dokle treba ići sa pugušćavanjem diskretizacije i povećavanjem broja čestica. MOC metoda postiže najbolje rezultate za $Pe > 10$, međutim gruba diskretizacija utiče na pojavu numeričke disperzije tako da se i to mora imati u vidu prilikom simulacije transporta zagađenja. Takođe, sa povećanjem diskretizacije i broja čestica dolazi do naglog povećanja dužine trajanja simulacije transporta zagađenja tako da simulacija može postati predugačka tj. nepraktična za izvođenje (npr. razlika u trajanju simulacije za slučaj 1 i slučaj 5 je 100 puta). Kao preporuka može se usvojiti zaključak da je prilikom svake simulacije transporta zagađenja, bilo da se ona radi u cilju procene ugroženosti objekta od potencijalnih zagađenja ili za tariranje na osnovu terenskih podataka, neophodno izvršiti numerički eksperiment u cilju određivanja optimalnih vrednosti numeričkih parametara. U ovom radu vršena je analiza samo MOC metode, ali isto generalno važi i za druge numeričke metode. Tek nakon izvršenja ovog koraka treba pristupiti analizi hidrogeološkog sistema sa aspekta simulacije kretanja zagađenja u podzemnoj vodi. Prilikom izvođenja numeričkog eksperimenta menjane su vrednosti samo onih numeričkih parametara koji najviše utiču na rešenje advektivno – disperzione jednačine. Za realnu simulaciju, koja se se bazira na terenskim podacima (merena koncentracija u osmatračkim objektima) potrebno je menjati i druge vrednosti u modelu, npr. disperzivnost, koeficijent retardacije pa čak i revidovati model kretanja podzemne vode ali samo nakon urađenog numeričkog eksperimenta kroz koji je smanjena neodređenost modela zbog numeričkih parametara.

LITERATURA:

- 1) Konikow, L.F., and Bredehoeft, J.D., 1978, *Computer model of two-dimensional solute transport and dispersion in ground water*. U.S. Geological Survey Techniques of Water-Resources Investigations, book 7, chap. C2, 90 p.
- 2) Bear, J., 1979., *Hydraulics of Groundwater*. McGraw-Hill, New York.
- 3) Gelhar, L. W., C. Welty, and K. R. Rehfeldt, 1992. *A Critical Review of Data on Field-Scale Dispersion in Aquifers*. Water Resources Research, Vol. 28, No. 7, pp. 1955-1974, July.
- 4) Kolektiv autora, 1997., *Glavni projekat vodozahvata i PPV "Vrbas" knjiga VIII – Hidrogeološki deo*, Energoprojekt, Beograd,
- 5) Zheng, C., and P. P. Wang, 1999. *MT3DMS, A Modular Three-Dimensional Multispecies Transport Model*. Documentation and User's Guide, Contract Report No. SERDP-99 prepared by The Hydrogeology Group, University of Alabama for USACE, Washington, D.C., 20314.
- 6) Kaluđerović D., 2000., *Primena savremenih matematičkih modela za simulaciju kretanja podzemnih voda i transporta zagađenja na primeru izvorišta Vrbas*, Magistarski rad, Rudarsko-geološki fakultet
- 7) Visual MODFLOW v.3.0 2001., *User's Manual*, Waterloo Hydrogeologic Inc.