Study of the Factors Affecting Joint Conditional Simulation of Groundwater Flow and Solute Transport in Heterogeneous Aquifers

Khaled Saeed Balkhair

Dept. of Hydrology and Water Resources,
Faculty Meteorology, Environment and Arid Land Agriculture,
King Abdulaziz University, Jeddah, Saudi Arabia

P.N. (MS – 5 – 26)

Aquifers are inherently heterogeneous at various observation scales. Characterizing the heterogeneity at a scale of our interest, generally requires information of hydrologic properties at every point in the aquifer. Such a detailed hydraulic property distribution in aquifers requires numerous measurements, considerable time, and great expense, and is generally considered impractical and infeasible. The alternative is to utilize a small number of samples to estimate the variability of parameters in a statistical framework. That is, the spatial variation of a hydraulic property is characterized by its probability distribution estimated from samples.

Recent analyses of heterogeneity showed that, although the hydraulic conductivity values vary significantly in space, the variation is not entirely random, but correlated in space. Such a correlated nature implies that the parameter values are not statistically independent in space and they must be treated as a stochastic process, instead of a single random variable. Stochastic process is defined briefly as an infinite collection of random variables. Yeh (1992) provided an overview of several stochastic approaches developed in the last few years for modeling water flow and solute transport in heterogeneous aquifers, they classified them into two main categories: homogeneous or effective parameters and heterogeneous approaches. Most of these models are known to be valid only if the spatial heterogeneity of the soil is moderate and are limited to relatively simplified analytical models. The effective parameter approach assumes that the heterogeneous geologic formation can be homogenized to obtain effective parameters with which one can predict the ensemble behavior of the flow and transport processes. Examples of such studies include those by, Dagan (1982 a and b a985a).

The heterogeneous approach is designed to consider the nature of spatial variability of hydrologic properties of the aquifer with limited amount of data. Methods in this approach generally consist of geostatistics, Monte Carlo simulation, and conditional simulation. Geostatistics (kriging-cokriging) is a mathematical interpolation and extrapolation tool, which uses the spatial Statistics of the data set to estimate the property at unsampled locations. Although hydraulic head and transmissivity fields derived from cokriging have been found to be reasonable, there is no guarantee these estimates satisfy the principle of conservation of mass Harter and Yeh (1993); and Yeh et al. (1995a). Monte Carlo simulation is the most intuitive approach for dealing with spatial variability in a stochastic sense. Although it belongs to the heterogeneous approach since hydraulic property at every point in the aquifer is specified, it is, in principle, equivalent to the effective parameter approach. Both Monte Carlo simulation and the effective parameter approach derive the mean and variance of the hydraulic head, but Monte Carlo simulation requires fewer assumptions, and it can predict shape of frequency distribution of the output variables. Typical examples of studies using this approach can be found in Freeze (1975).

Conditional simulation is an approach that combines geostatistics and Monte Carlo simulation. Unlike Monte Carlo simulation, it provides only a subset of all possible realizations

of the hydrologic property, which consists of the values of the properties at sample locations and confirms with a predefined spatial statistics of the hydrologic property. In this context, realizations that do not agree with measured values at the sampled locations are discarded. Because the conditional simulation includes the data values at the sampled location and all possible values at the unsampled locations, the conditional simulation is considered the most rational approach for dealing with uncertainties in heterogeneous geologic formations, Yeh (1992). The complete theory of conditional simulation is given by Matheron (1973) and Journel and Huijbregts (1978).

The objective of this research is to characterize aquifer heterogeneity based on limited data sets of transmissivities and/or hydraulic head in such a way that the obtained fields honors the values of these properties at the pre-sampled locations (conditional simulation). There are several factors control the process of conditioning fields. In this study, the influence of degree of heterogeneity, correlation scale, sampling location, size of the data set and hydraulic gradient were investigated and interpreted as a travel time distribution of solute particle released at a pre-specified location.

Two dimensional depth-averaged saturated steady groundwater flow equation was adopted in this study to illustrate the stochastic conditional simulation approach. Transmissivity is considered as spatially heterogeneous parameter that is unknown, except at data locations and is modeled statistically as a second order stationary random field. Uncertainty in the transmissivity then propagates through the model and results in uncertainty in the hydraulic head. Assuming head and log-transmissivity to be spatial stochastic processes, they further decompose as the sum of mean and perturbation parts about the mean. Randomness is introduced and the model is linearized by a first-order small perturbation expansion. Following up the mathematics results in a linearized governing perturbation flow equation.

The basic simulation process can be summarized in three main steps. First, use the perturbation equation and the associated linearized solution to obtain the spectral representation. Second, use the spectral representation to get covariances and cross-covariances functions of both transmissivity and hydraulic head. Third, generate multiple realizations and condition them to data. Conditioning on data was accomplished by the standard cokriging geostatistical procedure. In fact the implicit linearity in the perturbation solution works well with low variance values (less than one) of log-transmissivity. However for large variances, the conditioned log-transmissivity is substituted into the flow equation and the equation solved, many of the generated fields of this case violate continuity conditions. One option to avoid this problem is to use iterative conditioning approach.

In the iterative approach, the transmissivity field is conditioned on both head and transmissivity measurements. This transmissivity field was then used, along with the boundary conditions, to solve for a new head fields. The resulting fields satisfy the continuity conditions but the head do not agree with the measured head. Consequently the new head at the previous data locations is used to again condition the transmissivity field, and the process is repeated until the head fields are close to the measured values. Unfortunately the solution to the actual flow equation is very different from the linearized equation for high variances. Thus the iteration can only try to improve the head differences, but it can never completely remove them. This procedure significantly improves head difference after few iterations.

Since we are dealing with a large number of random fields (realizations), random numbe generator is utilized here as a tool to generate hundreds of realizations. There are several randon number generators capable of generating spatially correlated random fields. . In this study th spectral approach utilizing Fast Fourier Transform (FFT) random field generator (RFG) is use due primarily to its computational speed advantage and ease of incorporating an existin subroutine into the algorithm. Random fields of transmissivity values (realizations) are generate using spectral random field generator, [Gutjahr (1989)], assuming an exponential covarianc function of random variable.

The iterative conditional approach was applied to a hypothetical case to study five pre specified factors affecting the performance of the proposed approach. Each factor was studie separately. Before the beginning of any step, a standard reference case was decided upon. Thi case served as a reference for comparison with other developed cases or scenarios. Each facto studied was divided into scenarios. Eleven different scenarios based on each parameter valu variations were studied and results were obtained. Several small and big computer codes wer written to perform all runs of different scenarios. For each scenario, 100 different transmissivity fields were generated (realizations) from the same process.

The proposed iterative conditional simulation approach was implemented successfully i characterizing the heterogeneity of a medium using limited number of transmissivity and hea data. The proposed factors affecting the conditioning process were studied separately and th following specific conclusions were made:

1. The proposed approach worked well when the variance of generated transmissivities was less than one. When higher variances are used a problem of particle trap occurred.

2. At low Ln[T] variances, the flow paths of realizations appear converging to an ensemble mean surrounding the real path flow.

3. In general the travel time of released particle increases as the variance of Ln[T] increases.

4. Correlation scale proved to be an important factor. Small correlation scale value produced wider spectrum and longer travel time than large correlation scale value.

5 No significant impact in the flow paths occurred when mean flow gradient changed. However, the travel time distribution has changed dramatically.

6. An interesting result obtained when data size has changed. Few data points scenario produced wider spectrum of flow paths than when more data points are used.

7. The mean Ln[T] of the 100 conditioned fields of the standard case is overestimated slightly in some scenarios and underestimated in others.

References

Dagan, G., Stochastic modeling of groundwater flow by unconditional and conditional probabilities, 1. Conditional simulation and the direct problem, *Water Resour. Res., 18(4),* pp.813-833, 1982a.

Dagan, G., Stochastic modeling of groundwater flow by unconditional and conditional probabilities, 2. The solute transport, *Water Resour. Res., 18(4),* pp.835-848, 1982b.

Dagan, G., Stochastic modeling of groundwater flow by unconditional and conditional probabilities: The inverse problem, *Water Resour. Res.,* 21(1), pp.65-72, 1985a.

Freeze, R. A., A stochastic-conceptual analysis of one-dimensional groundwater flow in non-uniform, homogeneous media, *Water Resour. Res., 11(9),* pp.725-741, 1975.

Gutjahr, AL., Fast Fourier transforms for random field generation, Project Report for Los Alamos Grant to New Mexico Tech, Contract number 4-R58-2690R, *Department of Mathematics, New Mexico Tech. Socorro, New Mexico,* 1989.

Journel, A. G.; and Ch. J. Hujibregts, Mining Geostatistic, 600 pp., *Academic Press. San Diego,* 1978.

Matheron, G., The intrinsic random functions and their applications, *Advan. Appl. Probab.,* 5, pp.438-468, 1973.

Yeh, T.-C. J.; L.W. Gelhar; and A. L. Gutjahr, Stochastic analysis of unsaturated flow in heterogeneous soils, 1: Statistically isotropic media, *Water Resour. Res., 21(4), pp.447-*456, 1985a.

Yeh, T-C. J., Stochastic modeling of groundwater flow and solute transport in aquifers, *Hydrol. Processes, 5,* pp.369-395, 1992.

دراسة العوامل المؤثرة على النمذجة الازدواجية المشترطة لحركة المياه الجوفية ومسار الملوثات في الخزانات الجوفية غير المتجانسة

خالد بن سعيد بالخير
قسم علوم وإدارة موارد المياه – كلية الأرصاد والبيئة وزراعة المناطق الجافة
جامعة الملك عبد العزيز – جـــدة ، المملكة العربية السعودية
بحث رقم : (م ص – ٥ – ٢٦)

المستخلص : عادة ما تكون الخزانات الجوفية غير متجانسة من حيث الخواص الهيدروجيولوجية على مختلف القياسات، ولتقييم عدم التجانس يتطلب معرفة قيمة الخاصية المراد قياسها عند كل نقطة في الخزان الجوفي، ولمعرفة هذه التفاصيل يتطلب إجراء تجارب كثيرة وأخذ قياسات أكثر وهذا بدوره مكلف ويحتاج إلى وقت ، وبالتالي يمكن اعتباره غير عملي. في مثل هذه الأحوال عادة ما تؤخذ عينات ممثلة لتقييم التغيرات المصاحبة لمتغير ما وتوضع في قالب إحصائي يمكن التعامل معه.

تؤكد الدراسات الحديثة عن عدم التجانس على أنه بالرغم من أن قيم التوصيل الهيدروليكي تتغير تغيراً جذرياً من مكان إلى آخر ، إلا أن هذا التغير ليس عشوائياً ولكن له علاقة بالمكان ، وتوحي طبيعة هذه العلاقة بأن قيم المتغيرات تربطها علاقة إحصائية وبالتالي لابد أن تعامل كعملية إحصائية بدلا من متغير عشوائي وحيد . أعطى بعض العلماء نبذة عن بعض الطرق الإحصائية المعمول بها في السنين القليلة الماضية لنمذجة حركة المياه الجوفية والملوثات في الوسط المسامي غير المتجانس، وقد صنفوا هذه الطرق إلى مجموعتين هما ، العناصر الفعالة وطرق عدم التجانس ، ومعظم هذه الطرق تصلح عندما تكون قيم عدم التجانس المكـــاني متوسطة ومحدودة وتخضع لنماذج تحليلية بسيطة ، فطريقة العناصر الفعالة ، تفترض أن الوسط غير المتجانس يمكن وصفه بالتجانس ، ومن ثم

الحصول على العناصر الفعالة التي تفيد في التنبؤ بالمتوسط العام وحركة المياه وانتقال الملوثات.

طريقة عدم التجانس مصممة لتأخذ في الاعتبار طبيعة التغير المكاني للخواص الهيدرولوجية عندما تكون المعلومات محدودة، وتندرج تحت هذه المجموعة الطرق الجيولوجية الإحصائية و المحاكاة بطريقة مونت كارلو والنمذجة المشترطة، وعلى الرغم من أن قيم ناقلية الخزان الجوفي والارتفاع الهيدروليكي المحسوبة بالطرق الجيولوجية الإحصائية معقولة إلا أنه لا يوجد ضمان بأن هذه التقديرات تتوافق مع مبدأ حفظ الكتلة للمياة الجوفية . المحاكاة بطريقة مونت كارلو تعتبر بديهية للتعامل مع المتغيرات المكانية في الإطار الإحصائي، وعلى الرغم من أنها تنتمي إلى طريقة عدم التجانس إلا أنها تشبه طريقة العناصر الفعالة وكلتا الطريقتين تحسب المتوسط والتفاوت للمتغير إلا أن طريقة مونت كارلو تتطلب بعض الفرضيات وتعطي في مخرجاتها شكل التوزيع التكراري للمتغير.

طريقة النمذجة المشترطة تجمع بين الطرق الجيولوجية الإحصائية و المحاكاة بطريقة مونت كارلو، وتختلف هذه الطريقة عن مونت كارلو بأنها تعطي مجموعة جزئية للخاصية الهيدرولوجية من كل المخرجات الممكنة ، مع الحفاظ على الخواص الإحصائية للخاصية الهيدرولوجية قيد الدراسة ، وعلى هذا الضوء فإن جميع النتائج المخرجة والتي لا تتفق مع القيم المقاسة تهمل، ولأن نتائج النمذجة المشترطة تشمل الحفاظ على قيم المعطيات عند مواقع أخذ العينات وكذلك كل القيم الممكنة في المواقع غير المدروسة فإن هذه النمذجة تعتبر منطقية للتعامل مع عدم التحديد المتأصل في عدم التجانس للمتكونات الجيولوجية .

الهدف من هذه الدراسة هو إيجاد قيم عدم التجانس في الخزانات الجوفية بمعرفة بعض المعلومات عن الناقلية و الارتفاع الهيدروليكي عند نقاط محدودة ومن ثم الحفاظ على هذه القيم وضمانها في المخرجات ، والهدف الآخر هو دراسة العوامل المؤثرة على النمذجة

وهي درجة عدم التجانس و مقياس العلاقة و مواقع أخذ العينات و حجم المعلومات والميل الهيدروليكي .

في هذه الدراسة تم تحليل معادلة سريان المياه الجوفية في بعدين لتطبيق طريقة النمذجة الإحصائية المشترطة ، وبإعتبار أن الوسط المسامي غير متجانس فإن الناقلية تتغير من مكان إلى آخر ماعدا أماكن اخذ العينات فإنها معلومة ولا تتغير، هذا التغير في الناقلية يؤدي الى مثله في قيم الارتفاع الهيدروليكي، وبإعتبار هذين المتغيرين متغيرين عشوائيين أمكن إيجاد معادلات خطية بإستخدام مبدأ التذبذب الطفيف للمتغير، ومن هنا أمكن فصل قيم الناقلية إلى متوسط ثابت ومتوسط متذبذب صغير ، وبالمثل تم التعامل مع الارتفاع الهيدروليكي.

تم تطبيق طريقة النمذجة الإحصائية المشترطة على خزان جوفي افتراضي ودرس كل عامل من العوامل المؤثرة على حده ، من نتائج هذه الدراسة وجد أن: الطريقة تعمل بكفاءة عندما تكون قيمة التفاوت (Variance) في الناقلية أقل من الوحدة وأن مسار المياه لعدة حقائق احتمالية تتقارب وتتجمع حول المسار الحقيقي، وتوضح النتائج أيضاً أنه كلما زاد التفاوت كلما ازداد زمن انتقال المياه، وكذلك تأثير مقياس العلاقة على مدى مسار المياه في اتجاه السريان ، وطول فترة انتقال المياه، وهناك أيضاً عدة نتائج أخرى تتعلق بهذه العوامل.