



Scuola Superiore
Sant'Anna



FREEWAT
Free and Open Source Software Tools for Water Resource Management
EU HORIZON 2020 Project

Integrazione del codice MODFLOW (USGS) in QGIS: il modulo per la simulazione del flusso delle acque sotterranee nell'ambiente di simulazione FREEWAT

21 Aprile 2106

Scuola Superiore Sant'Anna - Pisa

Integrazione e applicazione dei codici per il trasporto di soluti in falda MT3DMS e SEAWAT nella piattaforma FREEWAT

Iacopo Borsi

TEA SISTEMI SPA

ict4water.eu



IAH
Associazione Internazionale
Idrogeologi
Gruppo Italiano

EIP Water Online Market Place
Matchmaking for water Innovation
MAR Solutions - Managed Aquifer
Recharge Strategies and Actions
(AG128)

Sommario

- Introduzione
- Il codice MT3DMS: caratteristiche ed utilizzo
- Il codice SEWAT: caratteristiche ed utilizzo
- La strategia di integrazione in FREEWAT e sviluppi in corso

INTRODUZIONE

- ✓ In alcune situazioni applicative è necessario indagare non solo l'assetto idrodinamico di un sito o di un acquifero, ma anche utilizzare i risultati dello stesso per studiare fenomeni di trasporto di inquinanti nel suolo e in falda.
- ✓ A questo tipo di scenari appartengono tutti gli studi inerenti la caratterizzazione di siti contaminati, opere di bonifica, ecc.
- ✓ Il flusso di acque sotterranee è simulato in FREEWAT attraverso MODFLOW e i vari pacchetti ad esso associati.
- ✓ Pertanto, per tutti i processi che coinvolgono il trasporto occorre selezionare dei codici che siano integrati con MODFLOW stesso.
- ✓ In particolare, al momento FREEWAT può essere utilizzato per processare dai input ed output dei codici: **MT3DMS e SEAWAT**

INTRODUZIONE

L'integrazione di MT3DMS e SEAWAT è stata sviluppata da *TEA SISTEMI* all'interno delle attività co-finanziate dal progetto **FP7 MARSOL**

Gli ulteriori sviluppi sono finanziati dal progetto **H2020 FREEWAT**

IL CODICE MT3DMS

Il codice *Modular 3-Dimensional Multi-Species Transport model*, è stato rilasciato nel 1999, come estensione di MT3D (*Modular 3-Dimensional Transport model*), sviluppato nel 1990.

Sviluppatori: *Chunmiao Zheng, P. Patrick Wang* (University of Alabama)

Attualmente la versione ufficiale più recente è la V.5.3 (2010).

In corso di rilascio una versione aggiornata (MT3DMS-USGS) [**vedi dopo**]

E' un codice libero e gratuito:

<http://hydro.geo.ua.edu/mt3d>

IL CODICE MT3DMS: caratteristiche principali

MT3DMS risolve l'equazione di **trasporto** associata al flusso di **acque sotterranee**, in ambiente **saturo** (*ADE - advection, dispersion equation*), per **una o più** specie di **soliti**, ovvero sostanze che si dissolvono nella fase acquosa.

Permette di simulare anche fenomeni aggiuntivi, quali:

- **assorbimento/desorbimento** (lineare e non-lineare, in condizioni di equilibrio o non-equilibrio)
- Termini di **decadimento** (del primo ordine o di ordine-0) per rappresentare decadimento naturale della componente e/o approssimare fenomeni di **biodegradazione** e i loro effetti.
- Domini a **doppia porosità** (*dual-domain mass transfer*)

E' possibile associare **termini di sorgente/pozzo**, sia di tipo puntuale che areale.

E' possibile simulare anche il **trasporto di calore** (modellando la temperatura come una specie, a patto di considerare opportuni accorgimenti). Tuttavia la temperatura non influisce sulla fluidodinamica del sistema (**vedi dopo!**)

IL CODICE MT3DMS: caratteristiche principali

$$\frac{\partial(\theta C^k)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij} \frac{\partial C^k}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta v_i C^k) + q_s C_s^k + \sum R_n$$

Dispersione idrodinamica
(diffusione molecolare +
dispersione meccanica)

Avvezione
(dipende solo dalla velocità)

Termini di sorgente/pozzo

Termini di reazione
(assorbimento o decadimento)

C^k : **Concentrazione** in acqua della **sostanza k-esima**

IL CODICE MT3DMS: caratteristiche principali

Importante!

MT3DMS risolve l'equazione assumendo **noto il campo di velocità**.

Ciò significa che nel dominio in esame è necessario prima risolvere il problema di flusso delle acque sotterranee

Accoppiamento tipico: **MODFLOW+MT3DMS**

- Esecuzione di MODFLOW per risolvere il problema di flusso
- Salvataggio della soluzione (carico idraulico) e conseguente calcolo del flusso (pacchetto LTM di MODFLOW)
- Salvataggio del flusso in un file binario
- Esecuzione di MT3DMS che legge l'input di flusso dal file salvato.

IL CODICE MT3DMS: caratteristiche principali

MT3DMS risolve l'equazione utilizzando uno schema alle **differenze finite**.

Sono disponibili ben **5 diversi solutori** numerici (la soluzione può variare anche in modo sostanziale, in certe circostanze)

La scelta del solutore dipende, principalmente, dal "tipo" di problema, e generalmente viene effettuata tramite una stima del *numero di Peclet (Pe)*, che esprime il **rappporto fra termine advettivo e quello dispersivo**

Questo perché le equazioni in cui prevale l'advezione sono "più difficili" da risolvere (infatti l'advezione pura corrisponde a un'equazione di tipo iperbolico.... Molto instabili!!)

Tutti i solutori raffinano la **discretizzazione del tempo** ereditata da MODFLOW... generalmente l'utente non deve occuparsi di questo passaggio: in caso, è possibile aggiustare i parametri input dei solutori stessi.

IL CODICE MT3DMS: cosa può fare?

MT3DMS, essendo un “cugino” di MODFLOW, viene ormai utilizzato da diversi anni da una vasta comunità internazionale, sia per scopi accademici che commerciali.

Le applicazioni più frequenti sono:

- ✓ Caratterizzazioni di siti inquinati
- ✓ Valutazioni di vulnerabilità di un acquifero
- ✓ Valutazioni di impatto di sorgenti inquinanti (**presunte** o già **presenti**), rispetto ad alcuni *target*, come pozzi o fiumi.
- ✓ Progettazione di interventi di bonifica (barriere idrauliche, pump-and-treat, ecc.), anche per effetto di *bio-remediation*
- ✓ Stima “inversa” per determinare la sorgente di un inquinamento noto in una certa zona (possibile ma “difficile” da eseguire!)

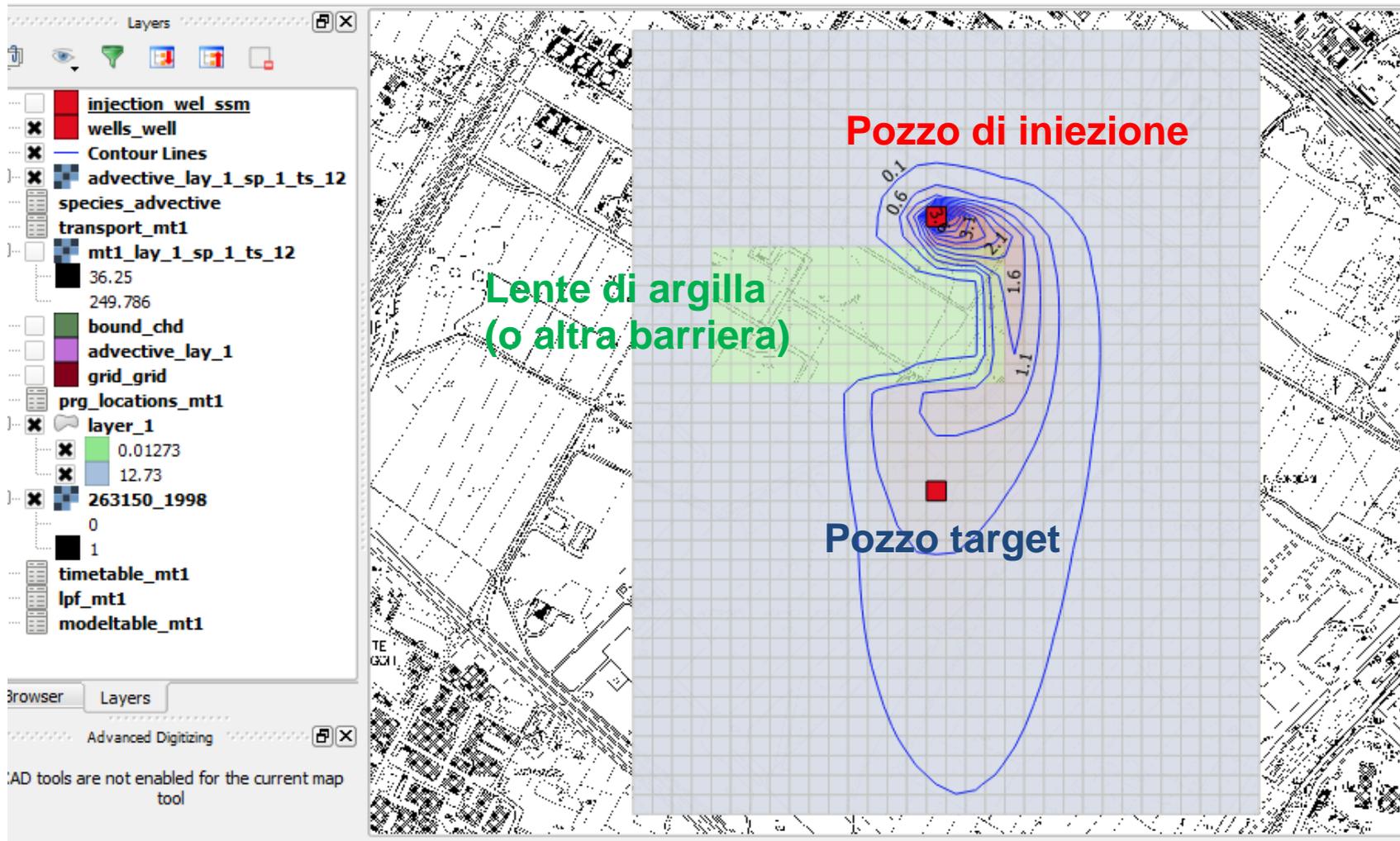
IL CODICE MT3DMS: cosa non può fare!

Limiti di utilizzo, ovvero fenomeni **non** indagabili con MT3DMS

- ✓ Flussi multifase (e.g. acqua + olio, acqua + vapore, ecc.)
- ✓ Flusso dipendente da densità, temperatura, viscosità (**vedi dopo!**)
- ✓ Trasporto in insaturo (**vedi dopo!**)
- ✓ Simulazione di vere e proprie reazioni geochimiche (per questo si consiglia l'utilizzo di **PHT3 (MT3DMS/PHREEQC-based reactive multicomponent transport model)**)

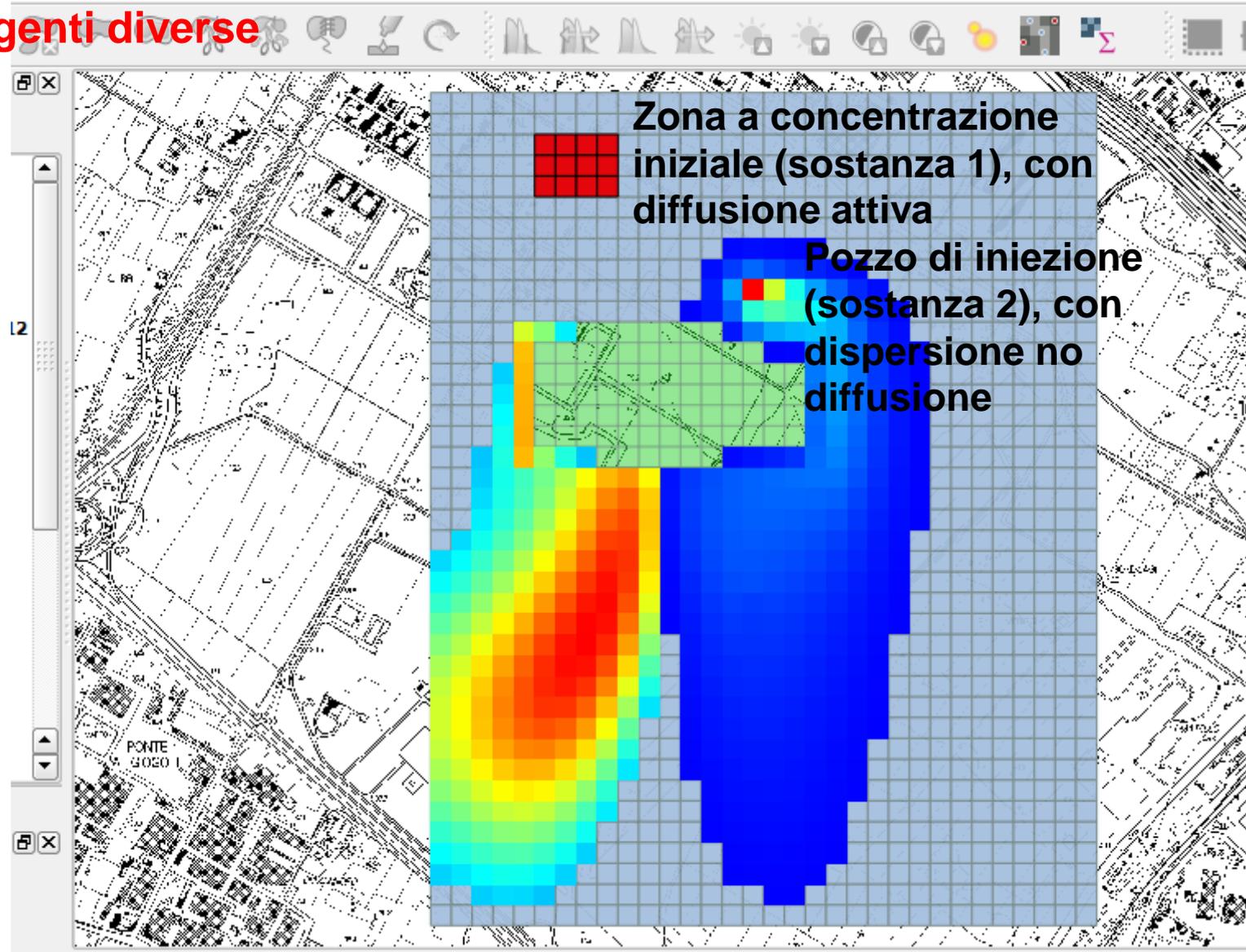
IL CODICE MT3DMS: esempi (con FREEWAT)

Valutazione dell'effetto (**positivo!**) di eterogeneità dell'acquifero rispetto alla diffusione di un inquinante



IL CODICE MT3DMS: esempi (con FREEWAT)

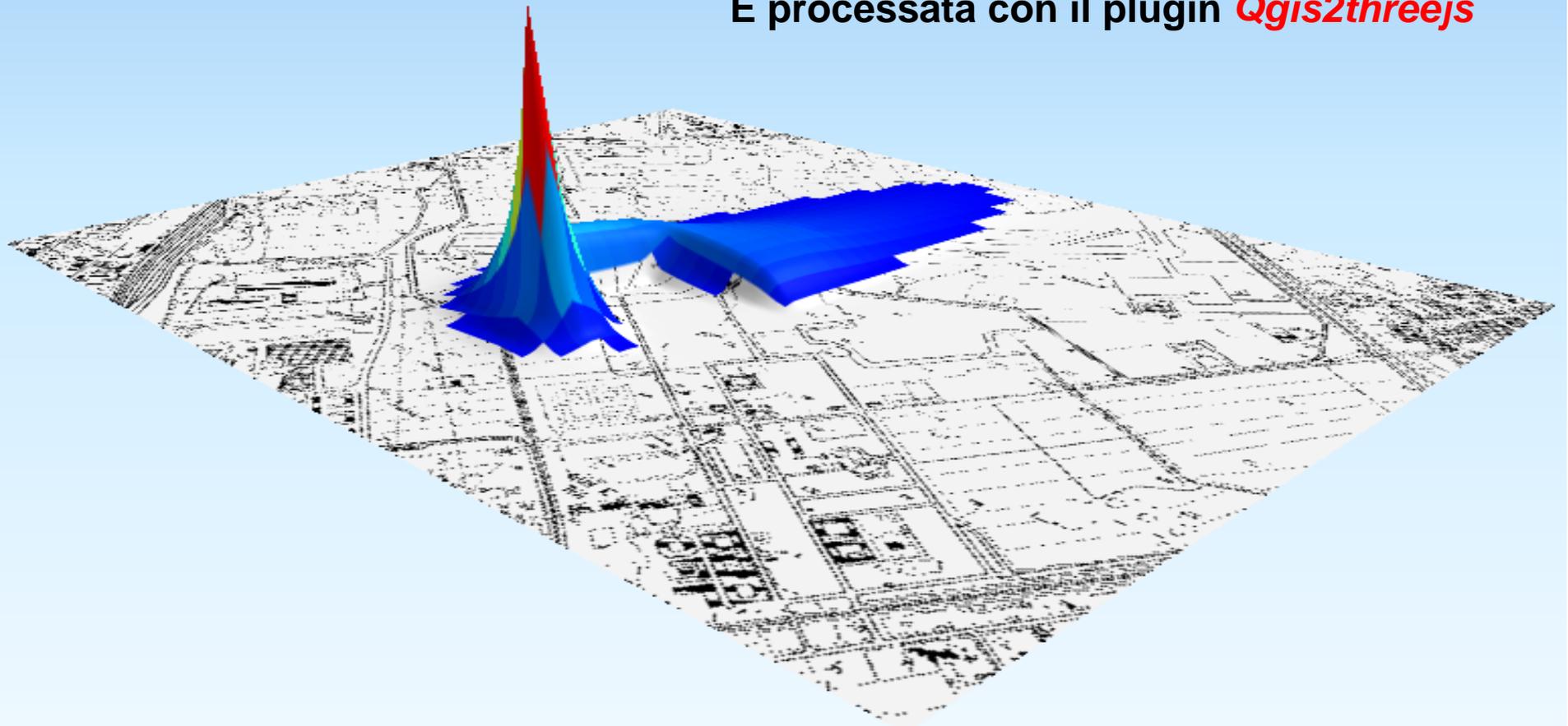
Stesso esempio con **due** diverse **sostanze** (e caratteristiche differenti) provenienti da **sorgenti diverse**



IL CODICE MT3DMS: esempi (con FREEWAT)

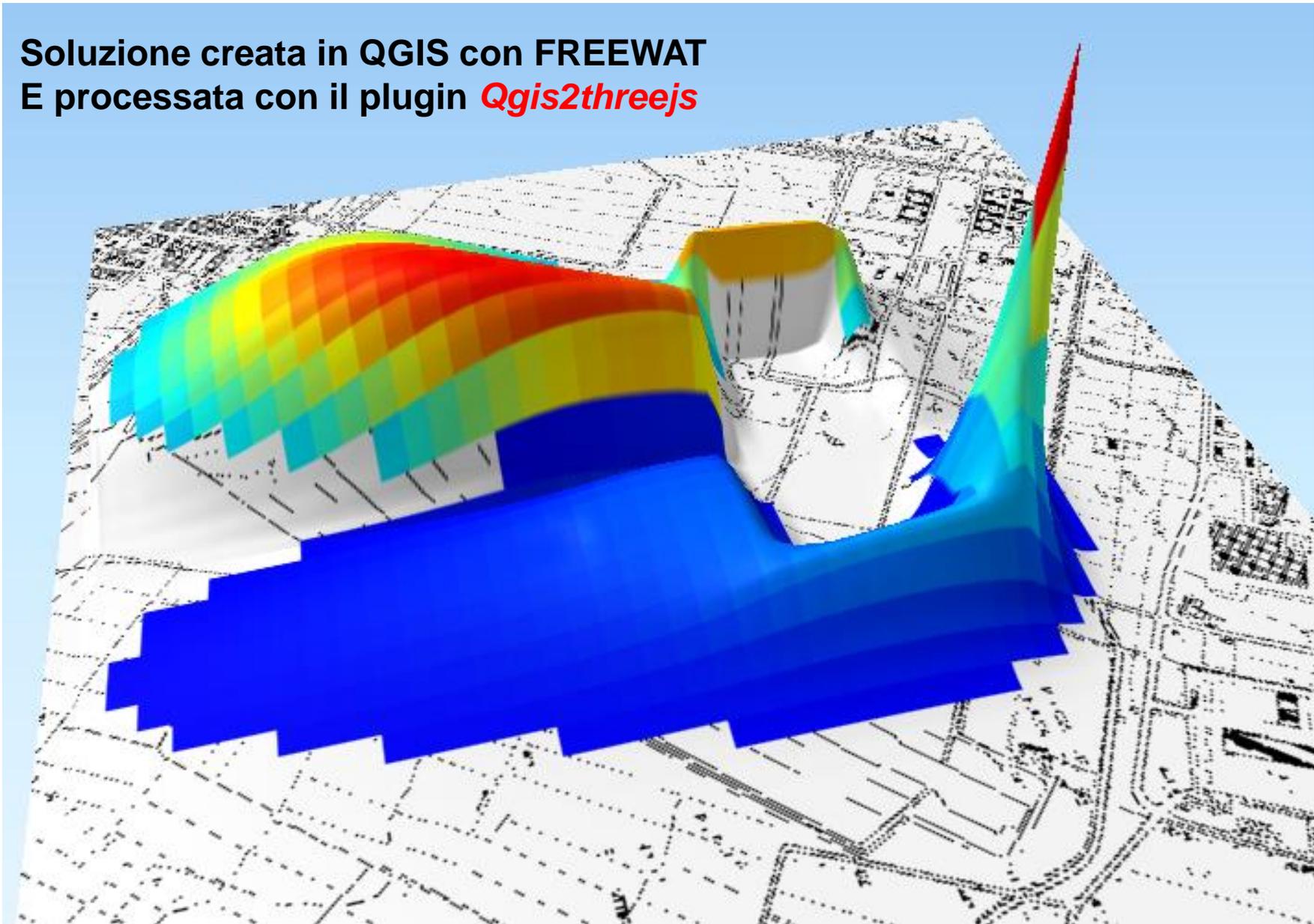
Talvolta è utile mostrare immagini “appealing” per una valutazione qualitativa del fenomeno

Soluzione creata in QGIS con FREEWAT
E processata con il plugin *Qgis2threejs*



IL CODICE MT3DMS: esempi (con FREEWAT)

Soluzione creata in QGIS con FREEWAT
E processata con il plugin *Qgis2threejs*



IL CODICE SEAWAT

Il codice *SEAWAT: A Computer Program for Simulation of Multi-Species Solute and Heat Transport*, è stato rilasciato nel 2003.

Attualmente la versione ufficiale più recente è la V.4 (2012).

Sviluppatori: *Langevin, C.D., Thorne, D.T., Jr., Dausman, A.M., Sukop, M.C., and Guo, Weixing* (USGS)

E' un codice libero e gratuito:

<http://water.usgs.gov/ogw/seawat/>

IL CODICE SEAWAT: caratteristiche principali

SEAWAT è un accoppiamento dei codici MODFLOW e MT3DMS progettato per simulare in 3D il flusso di acque sotterranee, la cui densità e/o viscosità siano variabili.

In particolare:

- ✓ Sia densità che viscosità possono dipendere da una o più specie (soluti) e/o dalla temperatura.
- ✓ La densità può anche dipendere dalla pressione del fluido.
- ✓ Come MT3DMS, anche in SEAWAT è possibile simulare il **trasporto di calore**, trattando la temperatura come una particolare ‘specie’ che viene trasportata dal fluido

IL CODICE SEAWAT: caratteristiche principali

Equazione di flusso con densità e viscosità variabili

$$\nabla \cdot \left[\rho \frac{\mu_0}{\mu} \mathbf{K}_0 \left(\nabla h_0 + \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \nabla z \right) \right] = \rho S_{s,0} \frac{\partial h_0}{\partial t} + \theta \frac{\partial \rho}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t} - \rho_s q'_s,$$

Equazione di trasporto per la specie C^k

$$\left(1 + \frac{\rho_b K_d^k}{\theta} \right) \frac{\partial (\theta C^k)}{\partial t} = \nabla \cdot (\theta \mathbf{D} \cdot \nabla C^k) - \nabla \cdot (\mathbf{q} C^k) - q'_s C_s^k,$$

Equazione per la densità

$$\rho = \rho_0 + \sum_{k=1}^{NS} \frac{\partial \rho}{\partial C^k} (C^k - C_0^k) + \frac{\partial \rho}{\partial T} (T - T_0) + \frac{\partial \rho}{\partial l} (l - l_0),$$

Equazione per la viscosità

$$\mu = \mu_0 + \sum_{k=1}^{NS} \frac{\partial \mu}{\partial C^k} (C^k - C_0^k) + \frac{\partial \mu}{\partial T} (T - T_0).$$

IL CODICE SEAWAT: cosa può fare?

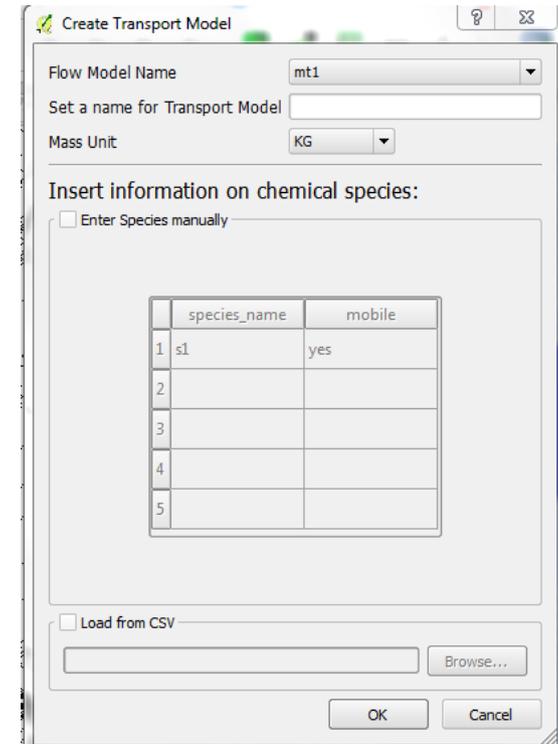
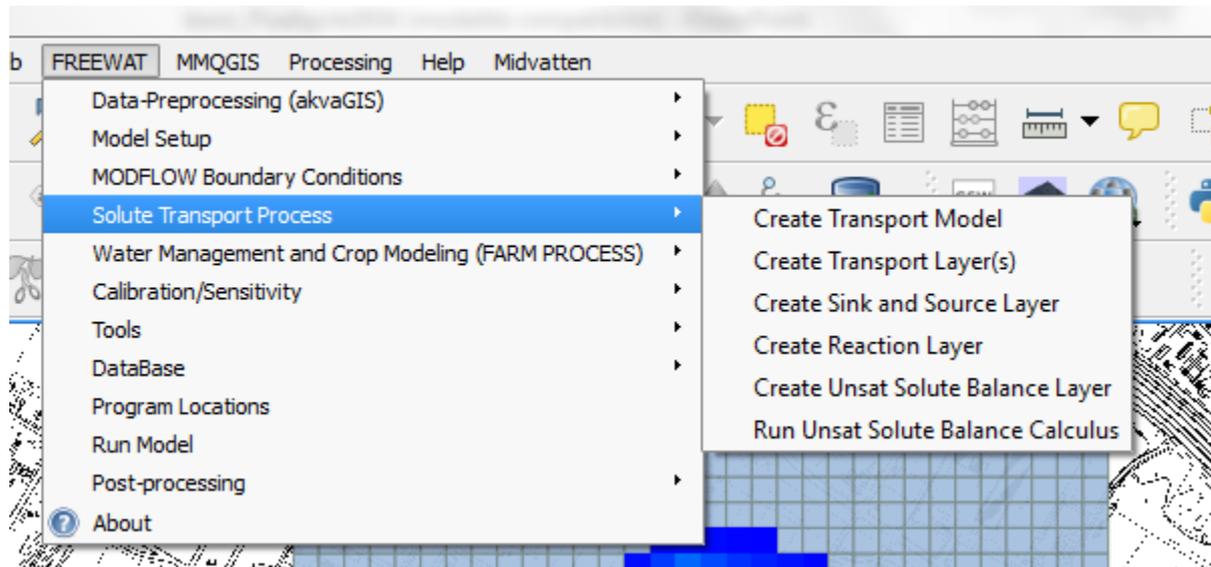
SEAWAT può essere utilizzato per quei problemi in cui la variazione della densità o della viscosità del fluido (in funzione di una concentrazione o di temperatura o di pressione) non siano trascurabili.

Le applicazioni più frequenti sono:

- ✓ Caratterizzazioni di acquiferi costieri per simulare processi di intrusione salina
- ✓ Sistemi geotermici a bassa o bassissima entalpia
- ✓ Simulazione del trasporto di mix di soluti in cui il flusso sia guidato da differenze di densità

La strategia di integrazione in FREEWAT

Ad ogni modello di flusso (MODFLOW) si possono collegare N-modelli di trasporto.



Questo permette di associare ad uno stesso modello idrogeologico due o più scenari differenti, che possono diversificarsi per numero di specie simulate, differenti condizioni al contorno, ecc.

La strategia di integrazione in FREEWAT

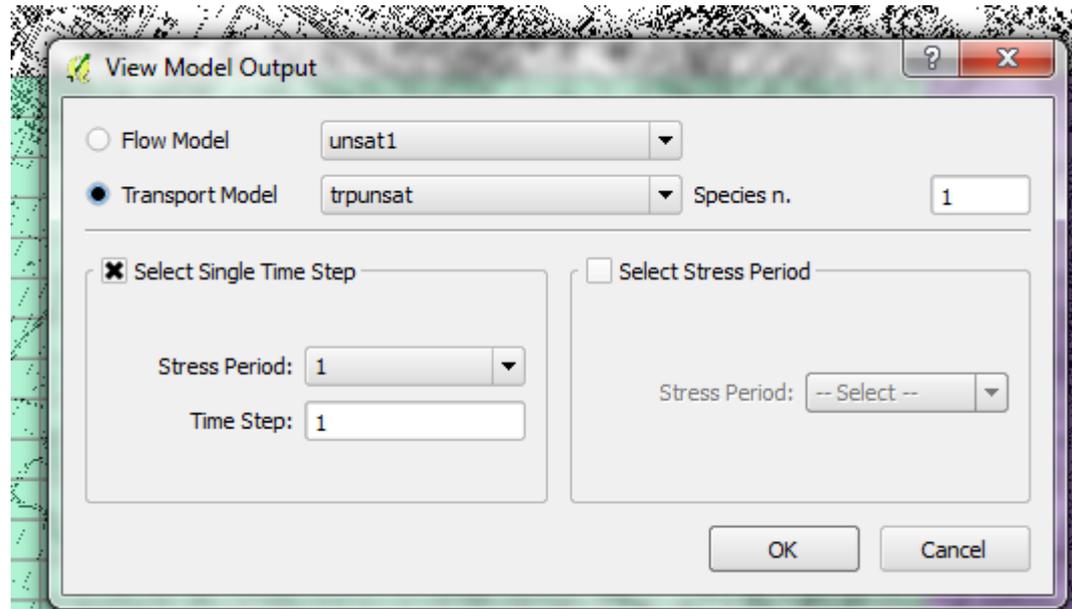
Dal pannello di *Run Model* si può accedere alla parte relativa al trasporto
Da dove vengono inseriti i dati richiesti e selezionate le opzioni

The screenshot shows the 'Run Model' dialog box with the following configuration:

- Model Name: mt1
- Transport Model: advective
- ADVECTION Package**
 - Solution Option (MIXELM): Standard Finite-Difference
 - Courant number (PERCEL): 0.75
 - Particle Tracking Algorithm: First-order Eulerian
 - MXPART: 800000
 - Dispersion is Active
- Reaction Layer**
 - Type of Sorption: No sorption
 - Type of Kinetic Rate Reaction: No kinetic rate reaction
- SINK and SOURCE Package**
 - CHD: bound_chd
 - WEL: injection_wel_ssm
 - RIV: [empty]
 - GHB: [empty]
 - Distributed Sink/Source (RCH or EVT): hhhh_const_ssm
 - Mass Loading: hhhh_const_ssm
 - Constant Conc.: hhhh_const_ssm
- Density Dependent Flow**
 - Method for Mass Conservation (MFNADVFD): Central-in-space
 - Reference Density: 1000
 - Slope coefficient for EoS: 0.7
- Viscosity Dependent Flow**
 - Simulate effect of Temperature
 - Species representing Temperature: [empty]
 - Reference Viscosity: 0.00089
 - Slope Coefficient (DMUDC): 0.00000192
- GCG SolverParameters**
 - Outer Iteration (MXITER): 1
 - Inner Iteration (ITER1): 50
 - Preconditioner (ISOLVE): Jacobi
 - Dispersion Tensor Term (NCRS): Lumped
 - Relaxation Factor (ACCL): 1.0
 - CCLOSE: 0.0001
 - IPRGCG: 0
- Only Write Input Files
- Buttons: Run, Open Report, Cancel

La strategia di integrazione in FREEWAT

Come per la parte di flusso, i risultati delle simulazioni possono essere salvati come file raster.



FREEWAT : sviluppi in corso

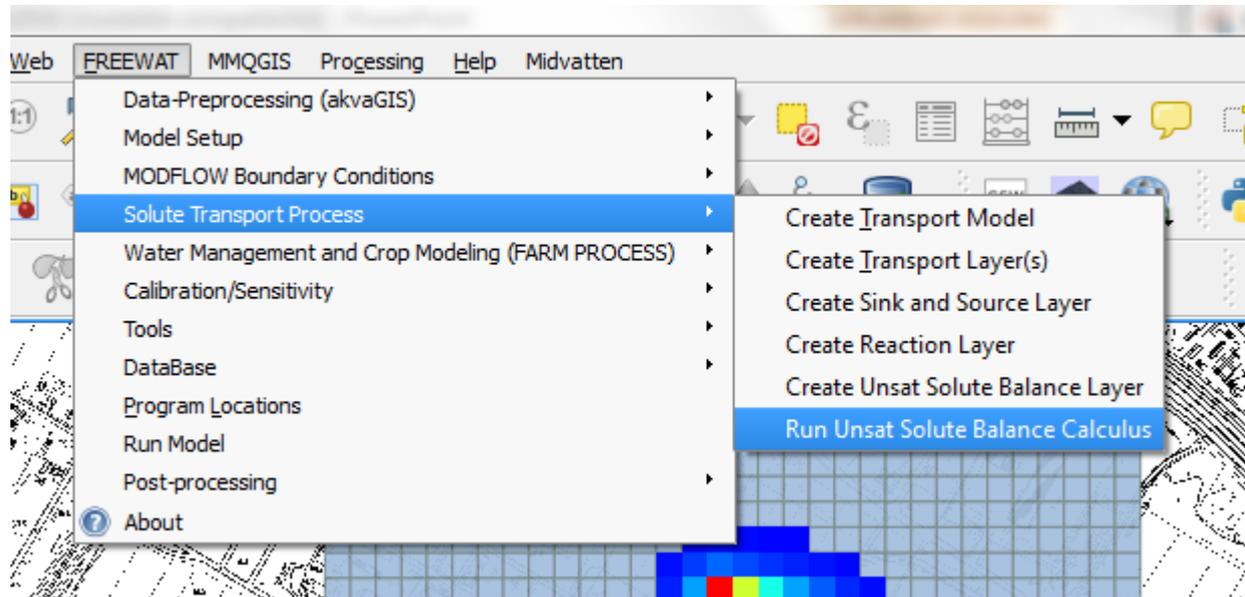
E' in corso di integrazione la nuova versione di MT3DMS (denominata **MT3DMS-USGS**) con la quale è possibile simulare anche il trasporto multi-specie nella zona insatura.

- ✓ Il codice MT3DMS viene accoppiato al flusso calcolato dal pacchetto UZF di MODFLOW (simulazione 1D della zona insatura, utilizzando l'approccio *kinematic-wave approximation*)
- ✓ **Tutto pronto in FREEWAT**: stiamo solo aspettando il rilascio ufficiale del codice da parte di USGS !!
- ✓ E' in programma l'integrazione anche di altri pacchetti nuovi di MT3DMS-USGS, fra cui, il più interessante è l'accoppiamento con il pacchetto MODFLOW SFR2, per simulare anche l'accoppiamento di trasporto fiume/falda (pacchetto *SFT - Stream Flow Transport*)

FREEWAT : sviluppi in corso

Nell'attesa dell'integrazione definitiva, è stato sviluppato un semplice *tool* per il calcolo di bilancio di massa nella zona insatura, utile per assegnare poi alla tavola d'acqua un valore di concentrazione imposta.

Strumento **USB** – **Unsaturated Solute Balance**



Sostanzialmente si utilizza l'output di UZF per calcolare un bilancio di massa (su ogni cella selezionata come sorgente), "risolvendo" l'equazione di trasporto come equazione alle differenze.