
Simuleren van 3D dichtheidsafhankelijke grondwaterstroming: MOCDENS3D

Gualbert Oude Essink

Samenvatting

In dit artikel wordt een computercode gepresenteerd waarmee het mogelijk is om niet-stationaire 3D dichtheidsafhankelijke grondwaterstroming in grootschalige geohydrologische systemen te simuleren. Het betreft de bestaande MOC3D-code (Konikow e.a., 1996) die is aangepast voor dichtheidsverschillen: MOCDENS3D. Er wordt aangetoond dat de aanpassing van de grondwaterstromingsvergelijking eenvoudig is. Tevens worden in het kort twee problemen behandeld, waarbij de aandacht met name is gericht op de verplaatsing van het dichtheidsveld. Met andere woorden: de beweging van zoet, zout en brak grondwater wordt gesimuleerd.

Inleiding

Modelleren van 3D dichtheidsafhankelijke grondwaterstroming is niet echt gemakkelijk. Desalniettemin gaan de ontwikkelingen op het gebied van computercodes voor het modelleren van 3D dichtheidsafhankelijke grondwaterstroming de laatste jaren snel. Mede hierdoor is het momenteel eigenlijk niet meer nodig om de grensvlakbenadering toe te passen bij modellering van de verdeling van zoet, brak en zout grondwater. Sommige 3D computercodes, zoals HST3D (Kipp, 1986), SWICHA (Huyakorn e.a., 1987), METROPOL (Sauter, 1987), SWIFT (Ward, 1991), kunnen reeds complexe geometrieën simuleren. Als deze geometrieën echter grootschalig zijn, bijvoorbeeld 20 × 20 km bij 150 m diep, eisen deze codes nog steeds erg veel van de computer hardware (bijvoorbeeld snelle UNIX-machines en vele tientallen Mb's EM RAM extern geheugen). Met andere woorden: het merendeel van de (toekomstige) gebruikers haakt af wegens hardware-beperkingen. Tevens kunnen zich numerieke problemen voordoen als de elementen groot zijn. Daar komt nog bij dat 3D modelleren om een behoorlijk ruimtelijk inzicht vraagt. Doordat gewerkt wordt met drukken of zogenaamde zoetwater-stijghoogten, is de interpretatie van het stijghoogtepatroon moeilijk. Bovendien vergen 3D-codes in het algemeen erg veel invoergegevens die meestal niet in voldoende mate aanwezig zijn.

dr.ir. Gualbert H.P. Oude Essink is werkzaam bij de Universiteit Utrecht, ICHU: Interfacultair Centrum voor Hydrologie Utrecht, Faculteit der Aardwetenschappen, Geofysica, Postbus 80021, 3508 TA Utrecht, e-mail: g.oude.essink@geof.ruu.nl, tel: 030-2535142, fax: 030-2535030.

Momenteel zijn meerdere ontwikkelingen gaande op het gebied van 3D dichtheidsafhankelijke grondwaterstroming, waarvan er hier twee worden genoemd: (a) MVAEM (Strack, 1993) en (b) MODFLOW aangepast voor dichtheidsverschillen (Schaars, 1996 en Olsthoorn, 1996a, 1996b) gebaseerd op het werk van Maas en Emke (1988). Beide codes zijn momenteel nog stationair wat stoftransport betreft. Eigenlijk kan een verandering in de verdeling van zoet, brak en zout grondwater niet worden nagebootst. Met MVAEM wordt echter wel 'quasi niet-stationair' gerekend door stationaire situaties aan elkaar te 'plakken'¹ (Minnema en Van der Meij, 1997). Dit betekent dat alleen advectioneel transport wordt meegenomen om de verplaatsing van het dichtheidsveld als een functie van de tijd te modelleren. Dispersief transport wordt volledig buiten beschouwing gelaten, hetgeen niet verantwoord is als over lange perioden wordt gesimuleerd of als sterke grondwateronttrekkingen plaatsvinden (waardoor brede brakke zones kunnen ontstaan). KIWA (Schaars en Van Gerwen, 1996) is bezig om in MODFLOW, dat is aangepast voor dichtheidsverschillen, het dichtheidsveld te verplaatsen met behulp van de 3D stoftransport-computercode MT3D (Zheng, 1990).

Met de in dit artikel beschreven code MOC3D, hierna MOCDEN3D genoemd, is het mogelijk door een relatief simpele aanpassing niet-stationaire 3D dichtheidsafhankelijke grondwaterstroming te modelleren. Hierbij kan ook het dispersieproces worden meegenomen. Niet alleen wordt de initiële snelheidsverdeling berekend, tevens wordt de verplaatsing van het dichtheidsveld gesimuleerd. Dit betekent dat de code niet-stationaire stroming van zoet, brak en zout grondwater in bijvoorbeeld het Nederlandse kustgebied kan doorrekenen. Een andere belangrijke eigenschap is dat deze code grootschalige geometrieën kan modelleren door grote elementen te gebruiken zonder dat ernstige numerieke problemen optreden.

In dit artikel worden kort de belangrijkste eigenschappen van MOCDEN3D behandeld. Vervolgens zal de basisvergelijking van de MODFLOW-module uitgeschreven worden, waarin dichtheidsverschillen worden verdisconteerd door zoetwater-stijghoogten aan te passen. Er hoeft dus niet met drukken te worden gewerkt. Twee problemen zullen worden behandeld, beide (voorlopig) nog in 2D. Probleem 1 betreft het bekende verticale scherpe zoet-zout grensvlak, nu echter niet alleen op $t = 0$ maar ook als een functie van de tijd. Probleem 2 betreft een zoutwaterlichaam in een zoetwateromgeving: door het dichtheidsverschil zakt het zoutwaterlichaam naar beneden en ontstaan zogenaamde 'vingers'.

¹ De manier waarop MVAEM het dichtheidsveld verplaatst is trouwens nog een onderwerp van discussie. Met name in de buurt van de punten waar de dichtheid wordt opgelegd kan de verticale snelheid onrealistisch zijn. Verplaatsing van deze zogenaamde dichtheidspunten geeft eigenlijk onrealistische resultaten, alhoewel bij kleine verplaatsingen op een kleine periode de fout acceptabel zou kunnen zijn.

Toepassingen

Het moge duidelijk zijn dat er legio praktische toepassingen van deze computercode zijn. Eén toepassing is het modelleren van het effect van menselijke ingrepen op de verdeling van zoet, brak en zout grondwater in kustgebieden waar een niet-uniforme dichtheidsverdeling heerst. Voorbeelden hiervan zijn: (a) de invloed van sterke grondwateronttrekkingen ten behoeve van de drinkwatervoorziening; (b) de invloed van een verlaging van polderpeilen als gevolg van bodemdalingen in west-Nederland; (c) de invloed van landaanwinning langs de Nederlandse kust (aanleg Nieuw-Holland ('Plan Waterman') of Tweede Maasvlakte (2^e nationale luchthaven)); en (d) de invloed van zeespiegelstijging op de kwel en het zoutbezwaar vanuit het diepe grondwater, waarbij nu niet alleen in 2D (Oude Essink, 1996) maar ook in 3D gerekend kan worden². Tevens kunnen met dit model ook 'gewone' berekeningen van stoftransport worden gedaan zonder dat gekeken wordt naar dichtheidsverschillen, zoals de verplaatsing van verontreinigingen in de bodem.

Eigenschappen van MOCDENS3D

MOCDENS3D (in totaal zo'n 15000 FORTRAN-regels; inclusief commentaar) bestaat uit twee modules die volledig zijn geïntegreerd: (a) een stoftransportmodule, hier genaamd de MOC-module³ om de verplaatsing van het dichtheidsveld te verzorgen (oorspronkelijk om 'gewoon' stoftransport te simuleren); en (b) een grondwaterstromingsmodule, hier genaamd de MODFLOW-module⁴, aangepast voor dichtheidsverschillen. Dit is mogelijk door het aanbrengen van een zogenaamde opdrijfsterm in de basisvergelijking van de MODFLOW-module, een relatief simpele aanpassing zoals te zien zal zijn⁵. Uit het berekende zoetwaterstijghoogte-patroon wordt de snelheidsverdeling gehaald, die vervolgens wordt gebruikt in de MOC-module om de verandering in de dichtheid te simuleren: met andere woorden de twee modules zijn aan elkaar 'gekoppeld'. Enkele eigenschappen van MOCDENS3D zijn:

- de code is gebaseerd op de twee beproefde, robuuste en mondiaal gezien veel gebruikte numerieke codes MOC (Konikow en Bredehoeft, 1978), maar dan in 3D, en MODFLOW;
- er zijn geen hulpprogramma's nodig zoals MATLAB omdat MOCDENS3D één computercode is die zowel de grondwaterstromings- als de stoftransportvergelijking oplost;

² Bij de voorspellingen voor de vierde Nota waterhuishouding (Werkgroep klimaatverandering en bodemdaling-NW4, 1997) is ook gekeken naar de effecten van zeespiegelstijging en bodemdaling op de kwel en het zoutbezwaar. Hierbij is geen rekening gehouden met de verandering in de verdeling van zoet, brak en zout grondwater tengevolge van advectie en hydrodynamische dispersie. Uit modelberekeningen is echter gebleken (Oude Essink, 1996) dat over een periode van 50 jaar in veel gebieden langs de Nederlandse kust de zoutconcentratie in het grondwater significant toeneemt, waardoor een significante vergroting van het zoutbezwaar optreedt.

³ MOC3D (Konikow, Goode en Hornberger, 1996), versie 1.1 van mei 1997, is de 3D opvolger van MOC (Konikow en Bredehoeft, 1978).

⁴ De MODFLOW-module is gewoon MODFLOW-96 (McDonald en Harbaugh, 1988; Harbaugh en McDonald, 1996), versie 3.0 van december 1996, maar dan volledig geïntegreerd in MOC3D.

⁵ Net als door Olsthoorn (1996a, 1996b) is in dit artikel gebruik gemaakt van zoetwater-stijghoogten, terwijl door Schaars (1996) gerekend wordt met drukken.

- de code kan rekening houden met moleculaire diffusie, hydrodynamische dispersie en chemische reacties zoals adsorptie (door middel van een retardatiefactor), biologische afbraak en radio-actief verval;
- stoftransport wordt gemodelleerd door de zogenaamde advection-dispersie-vergelijking op te splitsen in twee delen: (a) een advection-term die wordt opgelost met een deeltjesverplaatsingstechniek (methode der karakteristieken: 'Method Of Characteristics'), en (b) een dispersie-term opgelost met een eindige-differentie-methode. Door deze opsplitsing kan numerieke dispersie binnen de perken worden gehouden, ook als grote elementen en kleine longitudinale dispersiviteiten worden gebruikt (Oude Essink en Boekelman, 1996). Zo kan een element met een longitudinale dispersiviteit van $\alpha_L = 1$ m gemakkelijk $100 \times 100 \times 10$ m groot zijn zonder dat grote numerieke problemen optreden. Met name in deze eigenschap verschilt MOCDENS3D van de codes die gebruik maken van de standaard eindige-elementen- en differentie-methoden, waarbij het niet-voldoen aan de eis van ruimtelijke discretisatie, gekarakteriseerd door het zogenaamde numerieke Pecletgetal⁶, kan leiden tot grote numerieke problemen (Frind en Pinder, 1983; Daus e.a., 1985; Kinzelbach, 1987);
- de variatie van het poriënvolume van de elementen in de MOC-module dient klein te zijn, omdat anders de eis van behoud van massa wat het stoftransport betreft teveel geweld wordt aangedaan. Dit heeft te maken met de gebruikte deeltjesverplaatsingstechniek; zo heeft de 3D stoftransportcode MT3D (Zheng, 1990) net als MOCDENS3D met hetzelfde probleem te kampen. In de in dit artikel beschreven versie van MOCDENS3D is een uniform⁷ grid verondersteld;
- alhoewel numerieke dispersie beperkt blijft bij de deeltjesverplaatsingstechniek, ontstaan afwijkingen in de massa-balans wat stoftransport betreft. Er kan een verschil optreden tussen de initiële massa (in de vorm van de concentratie-verdeling) en de massa na verloop van een groot aantal deeltjesverplaatsingen, met name indien erg grote elementen (grove discretisatie) en/of grote tijdstappen voor de berekening van de grondwaterstroming worden gebruikt, zie bijvoorbeeld probleem 2.

Aanpassing van de MODFLOW-module voor dichtheidsverschillen

In MODFLOW geldt voor een uniform grid de gediscretiseerde continuïteitsvergelijking:

$$\sum Q_i = S_s \frac{\Delta h}{\Delta t} \Delta V \quad (1)$$

⁶ Het numerieke Pecletgetal Pe_{num} wordt gedefinieerd als $v \Delta x / D_h$, waar v = de effectieve snelheid [$L T^{-1}$], Δx = de karakteristieke lengtemaat van het element [L] en D_h = de hydrodynamische dispersie [$L^2 T^{-1}$]. Bij grote numerieke Pecletgetallen, bijvoorbeeld $Pe_{num} > 10$ (in theorie > 2), hetgeen voorkomt bij grove discretisatie van grootschalige geohydrologische systemen te zamen met kleine longitudinale dispersiviteiten, is het mogelijk dat bij standaard eindige elementen en differentie methoden de oplossing van de grondwaterstromingsvergelijking niet convergeert, onaanvaardbare numerieke dispersie optreedt en/of over- en ondershooting van de resp. maximale en minimale waarde van de in te voeren stofconcentratie wordt veroorzaakt.

⁷ De lengte van een element in kolom-richting hoeft niet gelijk te zijn aan de lengte van een element in de rij-richting.

Uitschrijven van deze vergelijking in MODFLOW-termen, gebruikmakend van de zes volumestromen Q_i , geeft (zie McDonald en Harbaugh, 1988):

$$\begin{aligned}
 & CV_{i,j,k-1/2} h_{i,j,k-1}^m + CC_{i-1/2,j,k} h_{i-1,j,k}^m + CR_{i,j-1/2,k} h_{i,j-1,k}^m + (-CV_{i,j,k-1/2} \\
 & -CC_{i-1/2,j,k} - CR_{i,j-1/2,k} - CR_{i,j+1/2,k} - CC_{i+1/2,j,k} - CV_{i,j,k+1/2} + HCOF_{i,j,k}) h_{i,j,k}^m \\
 & + CR_{i,j+1/2,k} h_{i,j+1,k}^m + CC_{i+1/2,j,k} h_{i+1,j,k}^m + CV_{i,j,k+1/2} h_{i,j,k+1}^m = RHS_{i,j,k}
 \end{aligned} \tag{2}$$

Omdat in de MOC-module de elementen uniform worden verondersteld, is de aanpassing van dichtheidsverschillen in horizontale richting, zoals Olsthoorn (1996b) heeft gedaan, onnodig en dus niet van toepassing. De aandacht wordt nu gericht op de verticale volumestroom in een element i,j,k , zie figuur 1. Allereerst wordt de algemene verticale Darcy-snelheid opgeschreven (let op: de z-as wijst omlaag, zoals ook in MODFLOW wordt gebruikt):

$$q_z = -\frac{\kappa_z}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial z} - \rho g \right) \tag{3}$$

Normaal gesproken wordt in MODFLOW gewerkt met stijghoogten. Omdat nu dichtheidsverschillen zijn meegenomen in de vergelijking, wordt alles geschreven in zogenaamde 'zoetwater-stijghoogten'⁸. Introductie van deze zoetwater-stijghoogte h_f geeft het volgende (z-as wijst omlaag):

$$h_f = \frac{p}{\rho_f g} - z \tag{4}$$

Invullen van (4) in (3) geeft:

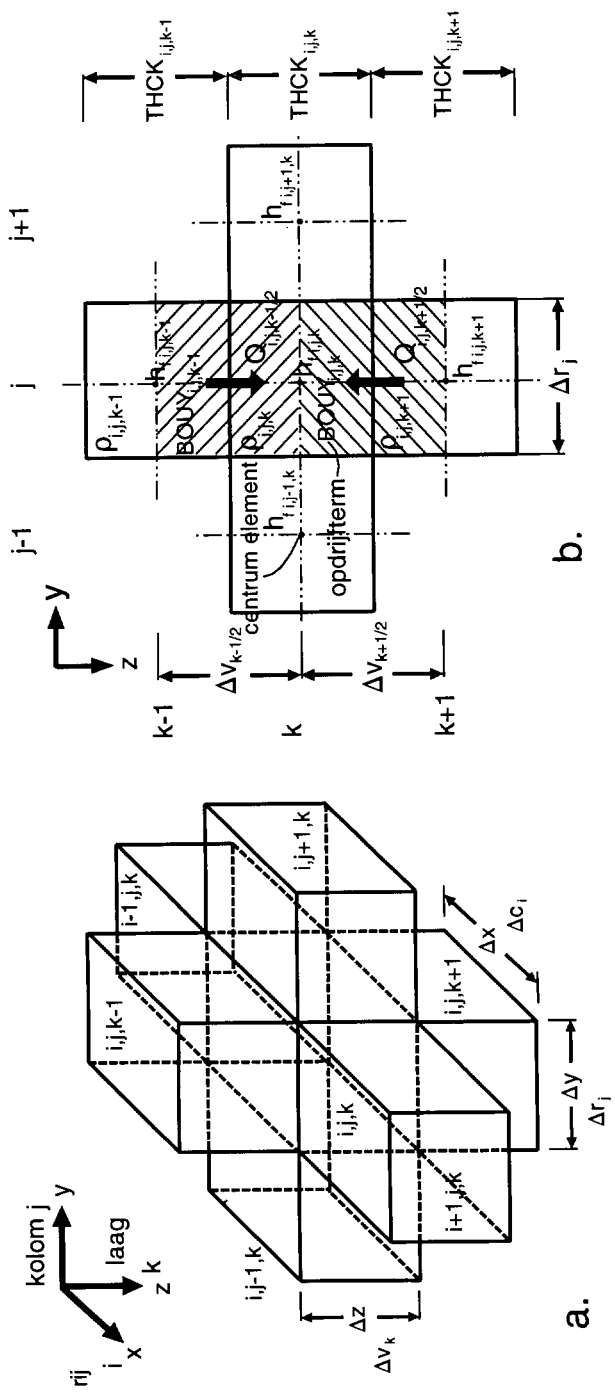
$$q_z = -\frac{\kappa_z \rho_f g}{\mu} \left(\frac{\partial h_f}{\partial z} - \frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \right) \tag{5}$$

Kleine viscositeitsverschillen kunnen worden verwaarloosd als dichtheidsverschillen worden meegenomen in grondwaterstromingsproblemen in verticale profielen (Verruijt, 1980; Bear en Verruijt, 1987). Vergelijking (5) kan dan geschreven worden als⁹:

$$q_z = -\kappa_z \left(\frac{\partial h_f}{\partial z} - \frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \right) \tag{6}$$

⁸ Definitie: stijghoogte zoals die zou worden gemeten indien de peilbuis gevuld zou zijn met zoet water in plaats van zout of brak.

⁹ In bepaalde gevallen met hoge dichtheden van het grondwater, zoals het modelleren van brijn grondwater in zoutkoepels met een ρ_s van bijvoorbeeld 1200 kg/m^3 , dient in MOCDENS3D gerekend te worden met vergelijking (5) (dynamische viscositeit μ en intrinsieke permeabiliteit κ) in plaats van vergelijking (6) (doorlatenheid k) of moeten geavanceerde codes zoals METROPOL worden gebruikt.



Figuur 1: MODFLOW-elementen met bijbehorende dichtheidstermen.

waar $k_z = \kappa_z \rho_f g / \mu$ de doorlatendheid voor zoet water is en $(\rho - \rho_f) / \rho_f$ de zogenaamde oprijf-term. Discretisatie van deze oprijfsterm, die nodig is in de MODFLOW-module, geeft (zie figuur 1b):

$$\text{BOUY}_{i,j,k} = \left(\frac{(\rho_{i,j,k} + \rho_{i,j,k+1}) / 2 - \rho_f}{\rho_f} \right) \quad (7)$$

De MOC-module, die zoet, brak en zout grondwater verplaatst met behulp van de methode der karakteristieken, levert de dichtheid voor elk element via:

$$\rho_{i,j,k} = \rho_f \left(1 + \frac{\rho_s - \rho_f}{\rho_f} \frac{C_{i,j,k}}{C_s} \right) \quad (8)$$

waar $C_{i,j,k}$ de stofconcentratie in grondwater in element i,j,k is en C_s de referentie-stofconcentratie in zout grondwater. Herschrijven van vergelijking (6) in gediscrètiseerde termen van de MODFLOW-module en gebruikmakend van vergelijking (7) geeft voor de stroming aan de bovenkant van element i,j,k :

$$q_{i,j,k-1/2} = -KV_{i,j,k-1/2} \left(\frac{h_{f,i,j,k} - h_{f,i,j,k-1} - \text{BOUY}_{i,j,k-1}}{\Delta v_{k-1/2}} \right) \quad (9)$$

en voor de stroming aan de onderkant van element i,j,k :

$$q_{i,j,k+1/2} = +KV_{i,j,k+1/2} \left(\frac{h_{f,i,j,k+1} - h_{f,i,j,k} - \text{BOUY}_{i,j,k}}{\Delta v_{k+1/2}} \right) \quad (10)$$

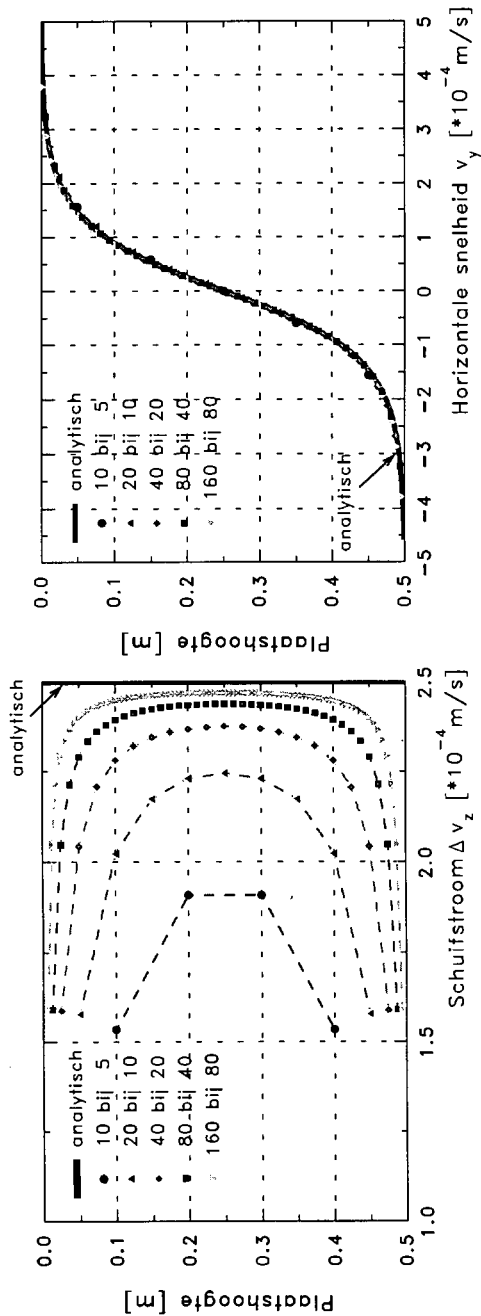
Om van de verticale snelheid q te komen tot de volumestroom Q , wordt vermenigvuldigd met het oppervlak $\Delta r_j \Delta c_i$. Vergelijking (9) wordt met behulp van het zogenaamde geleidingsvermogen in verticale richting, $CV_{i,j,k-1/2} = KV_{i,j,k-1/2} \Delta r_j \Delta c_i / \Delta v_{k-1/2}$ (McDonald en Harbaugh, 1988):

$$Q_{i,j,k-1/2} = +CV_{i,j,k-1/2} (h_{f,i,j,k-1} - h_{f,i,j,k} + \text{BOUY}_{i,j,k-1} \Delta v_{k-1/2}) \quad (11)$$

en hetzelfde geldt voor vergelijking (10):

$$Q_{i,j,k+1/2} = +CV_{i,j,k+1/2} (h_{f,i,j,k+1} - h_{f,i,j,k} - \text{BOUY}_{i,j,k} \Delta v_{k+1/2}) \quad (12)$$

Zoals te zien is in $Q_{i,j,k-1/2}$ is de bijdrage van de dichtheid positief ($+CV_{i,j,k-1/2} \text{BOUY}_{i,j,k-1} \Delta v_{k-1/2}$) en in $Q_{i,j,k+1/2}$ negatief ($-CV_{i,j,k+1/2} \text{BOUY}_{i,j,k} \Delta v_{k+1/2}$). Dit komt doordat de stromingsrichting in element i,j,k aan de onderkant $Q_{i,j,k+1/2}$ tegengesteld is aan de richting van de z -as en de zwaartekracht. In de MOC-module is de dikte $\text{THCK}_{i,j,k}$ van alle elementen in het grid bekend: hierdoor kunnen $\Delta v_{k-1/2}$ en $\Delta v_{k+1/2}$ herschreven worden als respectievelijk $(\text{THCK}_{i,j,k-1} + \text{THCK}_{i,j,k})/2$ en $(\text{THCK}_{i,j,k} + \text{THCK}_{i,j,k+1})/2$ (figuur 1b).



Figuur 2: (a) Schuifstroom Δv_z op het grensvlak, zowel analytisch als numeriek; (b) horizontale snelheid v_y op het grensvlak, zowel analytisch als numeriek. Het verschil tussen de afwijking van de numerieke Δv_z en v_y van de analytische oplossing komt doordat Δv_z is opgebouwd uit verticale snelheden op een afstand van het grensvlak (van een halve lengte van een element), terwijl v_y op het grensvlak ligt.

Resumerend: er zijn drie aanpassingen:

- a aftrekken van de twee opdrijfstermen uit de vergelijkingen (11) en (12) van de restterm $RHS_{i,j,k}$ in vergelijking (2) van de MODFLOW-module;
 - b optellen van de twee opdrijfstermen uit de vergelijkingen (11) en (12) bij respectievelijk de volumestromen $Q_{i,j,k - 1/2}$ en $Q_{i,j,k + 1/2}$, die gebruikt worden in de MOC-module om stoftransport te modelleren;
 - c er wordt gerekend met de zoetwater-stijghoogte h_f in plaats van met de stijghoogte h .
- Het enige wat moet gebeuren om grondwaterstroming dichtheidsafhankelijk te maken is elke keer voordat de grondwaterstromingsvergelijking wordt opgelost bij de restterm $RHS_{i,j,k}$ in de MODFLOW-module voor elk element de opdrijfstermen toe te voegen. Voor de berekening van de dichtheidsverdeling dient de volumestroom Q te worden aangepast met de opdrijfsterm. Deze aanpassing is in feite al door Lebbe in 1983 uitgevoerd voor het 2D stoftransport model MOC (Konikow en Bredehoeft, 1978). N.B.: h_f is een fictieve zoetwater-stijghoogte geworden: met andere woorden de dichtheid is hierin meegenomen. Zo staan stroomlijnen (snelheidsvectoren) niet loodrecht op de zoetwater-stijghoogte-isohypsen als grondwater een dichtheid heeft die niet gelijk is aan zoetwater ($\rho_f = 1000 \text{ kg/m}^3$). In zoet grondwater zal echter niets veranderen ten opzichte van de oorspronkelijke MODFLOW-berekeningen zonder dichtheidsverschil.

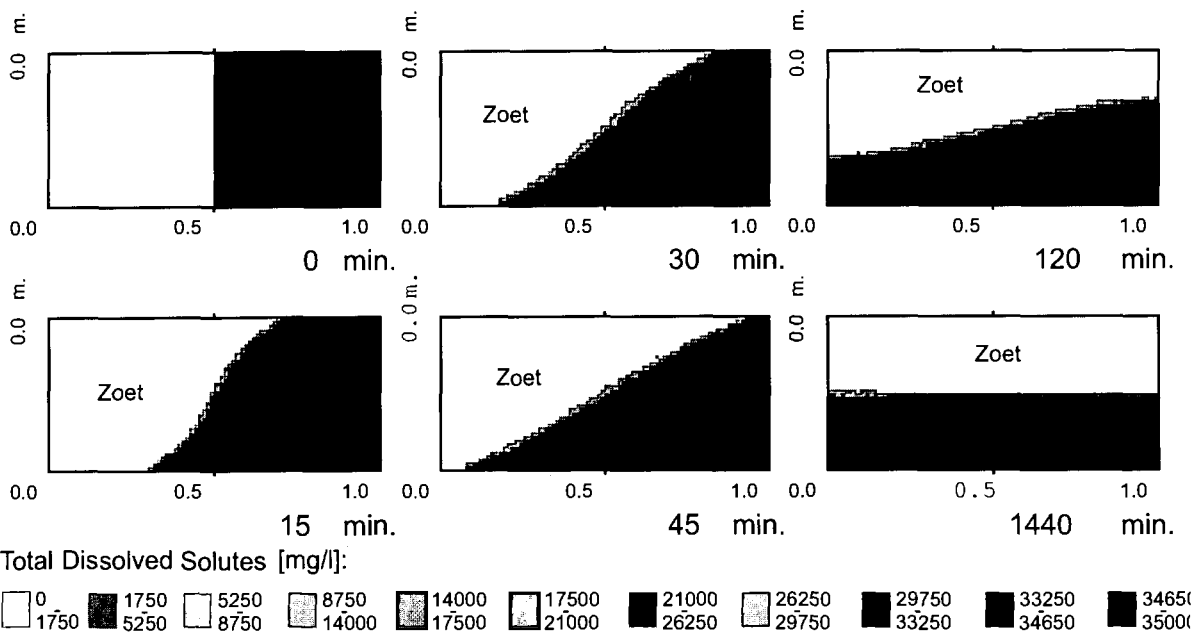
Grootte van de tijdstap Δt

Bij grondwaterstroming met een variabele dichtheid is de snelheidsverdeling afhankelijk van de dichtheidsverdeling (via het zoetwater-stijghoogtepatroon). Door verplaatsing van zoet, brak en zout grondwater verandert de dichtheidsverdeling. Het zoetwater-stijghoogtepatroon moet opnieuw berekend worden, omdat anders de snelheidsverdeling niet meer in overeenstemming is met de dichtheidsverdeling. De grootte van de tijdstap Δt is belangrijk, want de tijdstap bepaalt wanneer en hoe vaak de snelheidsverdeling opnieuw berekend moet worden. Een te grote tijdstap veroorzaakt een onrealistische oplossing. Het is dus van belang te weten welke tijdstap Δt nog acceptabel is. Dit hangt af van de snelheid van het te beschrijven proces. Zo kan deze Δt in grootschalige geohydrologische systemen in duingebieden in de orde van (enkele) jaren zijn (Lebbe, 1983; Oude Essink, 1996), tenzij bijvoorbeeld sterke grondwateronttrekkingen de dichtheidsverdeling zodanig snel doen veranderen dat een kleinere tijdstap moet worden gekozen (in de orde van maanden). De grootte van de tijdstap wordt bepaald op basis van ervaring en/of via trial-and-error (bijvoorbeeld met behulp van enkele testberekeningen: als het dichtheidsveld snel verandert, zijn kleinere tijdstappen gewenst).

Testberekeningen met MOCDENS3D

1 Scherp verticaal zoet-zout grensvlak

Het hypothetische probleem met het verticale zoet-zout grensvlak in een homogeen watervoerend pakket (hier horizontaal $L = 1,0 \text{ m}$ bij verticaal $D = 0,5 \text{ m}$) is een bekend geval. Omdat een scherp grensvlak-benadering wordt nagebootst gelden de volgende parameters:



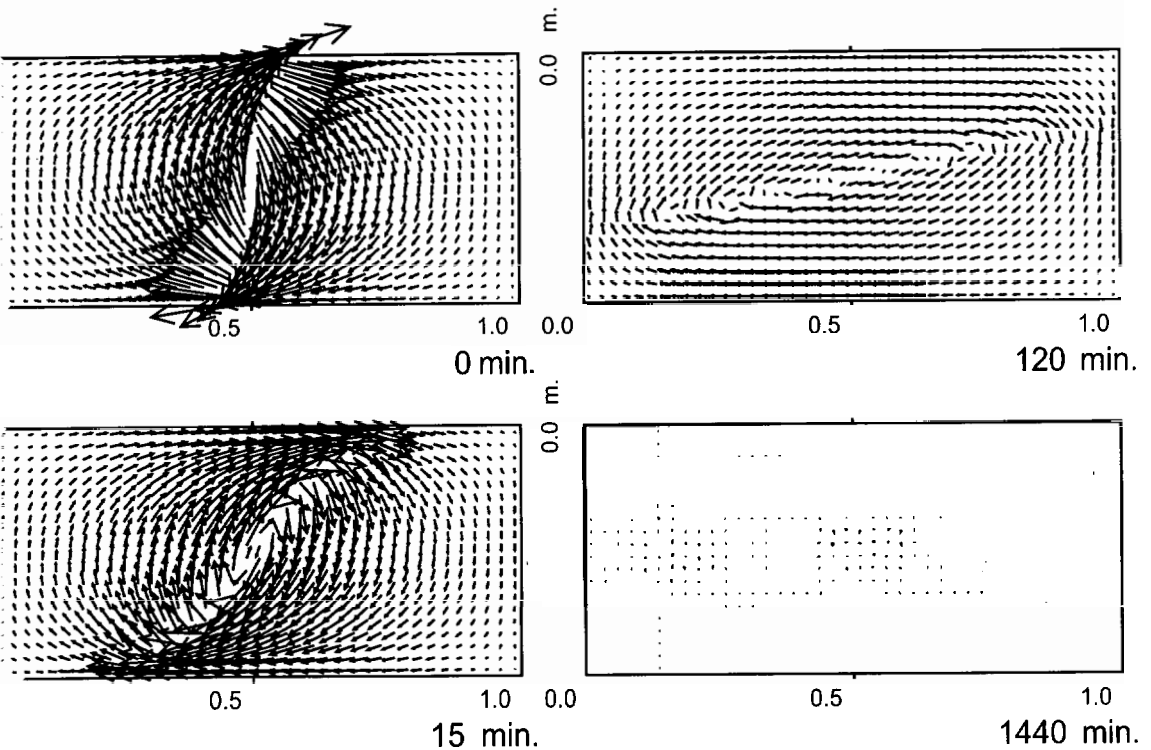
Figuur 3: Ontwikkeling van het grensvlak op zes momenten in de tijd: 80 bij 40 elementen.

$D_{\text{mol}} = 0 \text{ m}^2/\text{s}$, $\alpha_L = \alpha_{\text{TH}} = \alpha_{\text{TV}} = 0 \text{ m}$ en $R_f = 1$ (dus geen retardatie). Overige bodemparameters zijn doorlatendheid $k = 10^{-3} \text{ m/s}$ en porositeit $n = 0,1$. Er zijn vijf gevallen van discretisatie bekeken: zowel de lengte als de dikte van een element zijn (a) 0,1 m (10 bij 5 elementen); (b) 0,05 m (20 bij 10 elementen); (c) 0,025 m (40 bij 20 elementen); (d) 0,0125 m (80 bij 40 elementen); (e) 0,00625 m (160 bij 80 elementen). Per element zijn initieel 16 deeltjes geplaatst (dit is veel: het effect van het aantal deeltjes per element op de nauwkeurigheid van de oplossing van de stoftransportvergelijking is groot (Oude Essink, 1996)). Er is een vaste stijghoogte gelijk aan nul aangebracht voor alle vijf gevallen aan de linkerkant van het pakket in het centrum van het ene element net onder het midden. De totale simulatie-tijd is 1440 min (1 dag): 2880 tijdstappen Δt van 30 s.

Schaars (1996) en Olsthoorn (1996a) hebben de initiële situatie van het grensvlak al berekend. De analytische oplossing voor het initiële absolute snelheidsverschil links en rechts van het grensvlak tussen zoet ($\rho_f = 1000 \text{ kg/m}^3$) en zout ($\rho_f = 1025 \text{ kg/m}^3$) grondwater is als volgt (De Josselin de Jong, 1977): $\Delta v_z = (k/n)[(\rho_s - \rho_f)/\rho_f] = 2,5 \times 10^{-4} \text{ m/s}$, de zogenaamde schuifstroom. Tevens is de initiële horizontale snelheid v_y bekend op het scherpe grensvlak (Verruijt, 1980): $v_y = (k/n)[(\rho_s - \rho_f)/\rho_f][(1/\pi)\ln \tan(\pi z/2D)]$. Figuur 2a toont de schuifstroom Δv_z op het grensvlak. Sommatie van de absolute waarden van v_z in de elementen aan weerszijden van het grensvlak levert de waarden van de schuifstroom op. Zoals te zien is: bij een finer grid zullen de numerieke waarden de analytische oplossing benaderen. Aan de randen echter is door de discretisatie nog een behoorlijk verschil tussen de analytische en numerieke oplossing. Dat komt doordat de opdrijfsterm niet is meegenomen in het bovenste en onderste deel van de resp. bovenste en onderste laag elementen. Tevens wordt in het numerieke geval een ondoorlatende rand verondersteld. Figuur 2b laat zien dat de

numerieke oplossing voor de horizontale snelheid v_x , die ligt óp het grensvlak, wél uitstekend correspondeert met de analytische oplossing.

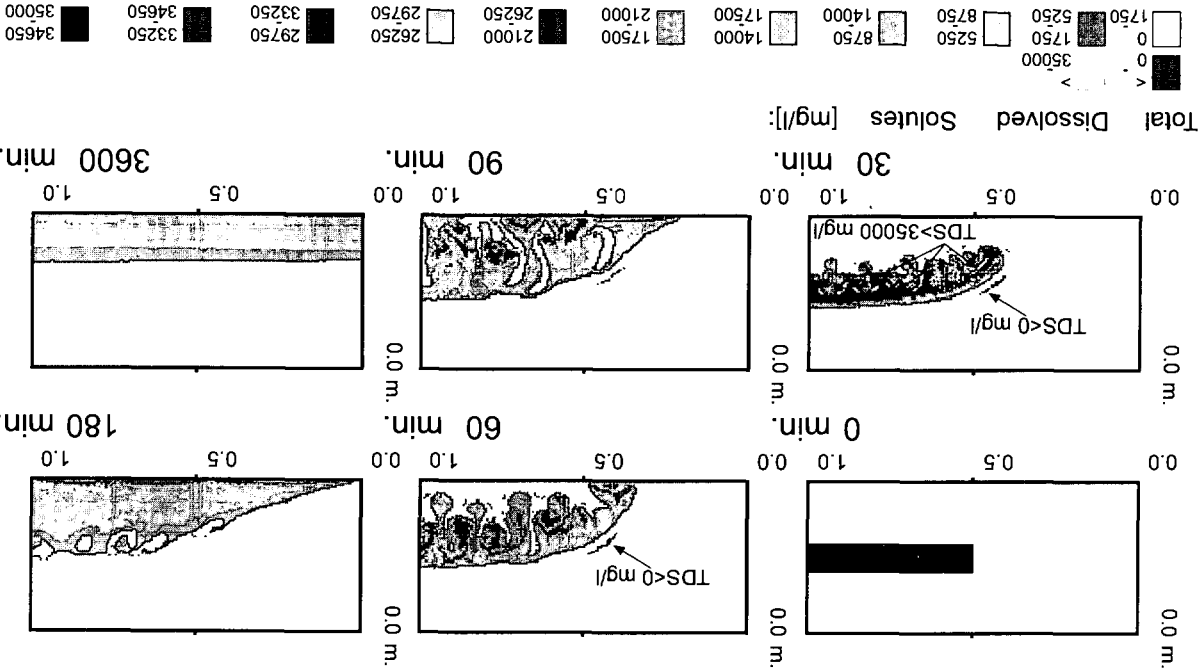
Figuur 3 toont de ontwikkeling van het grensvlak op zes momenten in de tijd voor geval d: 80 bij 40 elementen. Een diskette met diverse animaties van de verplaatsing van het grensvlak is te verkrijgen (zie onderaan artikel). In het begin is de stromingssnelheid groot (figuur 4) en zal het grensvlak zich snel verplaatsen. Na enige tijd neemt de snelheid af en het duurt een aantal uren voordat de evenwichtssituatie is bereikt. Door numerieke dispersie komen elementen voor met een concentratie (en dus dichtheid) die niet gelijk is aan zoet (conc. = 0 mg TDS/l en $\rho_f = 1000 \text{ kg/m}^3$) of zout (conc. = 35000 mg TDS/l en $\rho_s = 1025 \text{ kg/m}^3$) grondwater. Dit wordt veroorzaakt door de oplossingstechniek voor stoftransport (deeltjesverplaatsingsmethode en eindige-differentie-methode). Na verloop van tijd neemt het aantal elementen met numerieke dispersie af: sommige zogenaamde numerieke dispersiedeeltjes 'vallen' weer op hun plaats door het geringe dichtheidsverschil met het omliggende zoete en zoute grondwater.



Figuur 4: Ontwikkeling van de snelheidsverdeling op vier momenten in de tijd: 40 bij 20 elementen. De lengte van de snelheidspijltjes komt overeen met de verplaatsing van grondwater gedurende een periode van 864 s (is 0,01 dag).

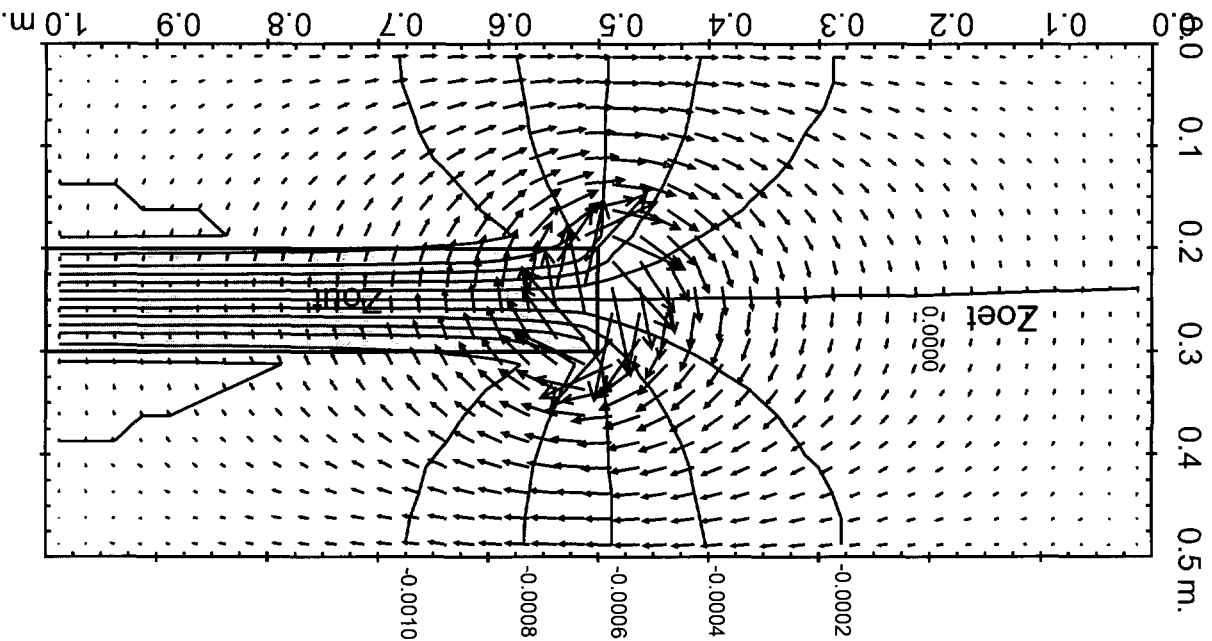
elementen.

Figuur 6: Ontwikkeling van de verplaatsing van het zoutwaterlichaam op zes momenten in de tijd: 160 bij 80



van 864 s (is 0,01 dag).

Figuur 5: Initiele snelheidsverdeling en zoetwater-stijghoogtepatroon voor 40 bij 20 elementen. De lengte van de snelheidspijltjes komt overeen met de verplaatsing van grondwater gedurende een tijdsperiode

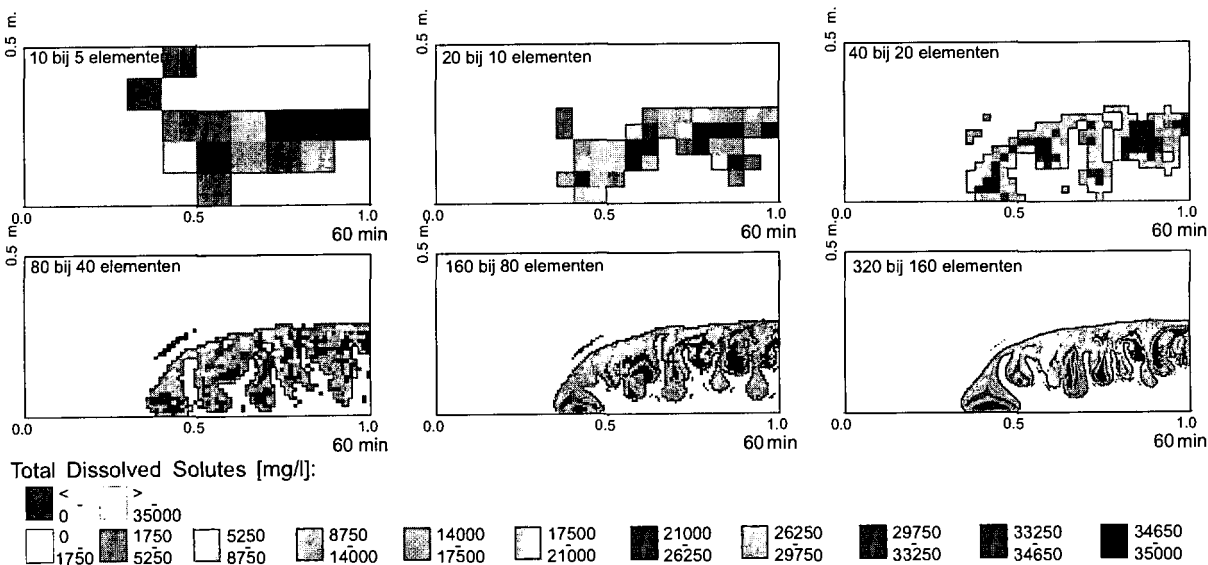


In dit probleem wordt een zoutwaterlichaam in zoet grondwater behandeld dat onder invloed van de zwaartekracht naar beneden zakt. De verplaatsing van het lichaam als een functie van de tijd is geanalyseerd bij verschillende elementgrootten. De volgende parameters gelden voor een 'watervoerend pakket' van horizontaal $L = 1,0$ m bij verticaal $D = 0,5$ m: $D_{\text{mol}} = 10^{-9}$ m²/s, $\alpha_L = 1$ mm (is een acceptabele waarde (Bertsch, 1978) voor een systeem op laboratorium-schaal), $\alpha_{\text{TH}} = \alpha_{\text{TV}} = 0,1$ mm en $R_r = 1$ (dus geen retardatie). Overige bodemparameters zijn: $k = 0,001$ m/s en porositeit $n = 0,1$. De discretisatie is gelijk aan de vijf gevallen van het eerste probleem, alsmede een zesde geval (f) $0,003125$ m (320 bij 160 elementen)¹⁰. Per element zijn initieel 16 deeltjes geplaatst. Er is een vaste stijghoogte aangebracht voor alle vijf gevallen op dezelfde plaatsen als in probleem 1, alsmede voor het zesde geval in het centrum van één element op $[y = 0,0015625, z = 0,2515625]$. De totale simulatietijd is 3600 min (2,5 dag): 1200 tijdstappen Δt van 180 s.

In figuur 5 is de initiële snelheidsverdeling en de zoetwater-stijghoogteverdeling van dit specifieke geval te zien voor 40 bij 20 elementen. Bij nadere bestudering is te zien dat het stijghoogtepatroon geen exact symmetrische vorm heeft. Dit komt doordat de vaste randvoorwaarde voor zoetwater-stijghoogte op $[y = 0,0125, z = 0,2625]$ niet op de symmetrie-as $z = 0,25$ m ligt. Figuur 6 toont de verplaatsing van het zoutwaterlichaam op zes momenten in de tijd voor 160 bij 80 elementen. Door hydrodynamische dispersie ontstaat een dispersieve zone. Na een korte tijd ontstaan 'vingers' aan de onderkant van het zoutwaterlichaam. Figuur 7 laat zien dat de grootte van een element een behoorlijke invloed heeft op de ontwikkeling van het zoutwaterlichaam: hoe kleiner de elementen, hoe nauwkeuriger de 'vingering' wordt gesimuleerd. Het blijkt dat het aantal 'vingers' bij een toenemend aantal elementen (testberekeningen met 640 bij 320 en 1280 bij 640 elementen) nog steeds niet constant is.

De initiële snelheidsverdeling (figuur 5) laat zien dat aan de linkerkant van het lichaam een sterke roterende grondwaterstroming (vortex) is ontstaan. Hierdoor zakt ter plaatse het zoute grondwater sneller naar beneden dan aan de rechterkant. Als de linkerkant van het lichaam de bodem bereikt (zie figuur 6: $t = 60$ min), is het zoete grondwater onder het lichaam ingesloten. Toch zal door verschillen in dichtheid het zoute grondwater geheel over de bodem verspreiden. Met andere woorden: gedurende met name de eerste tientallen minuten van de simulatie zal het zoete grondwater zich door het zoutwaterlichaam heen moeten wringen ('zoetwater-vingers'). Ter plaatse bevinden zich veel gebieden waar scherpe dichtheidscontrasten tussen zoet en zout grondwater optreden, met als gevolg numerieke dispersie. Door de bijzondere geometrie van dit probleem zal een relatief grote fout ontstaan in de massa-balans van het stoftransport. De fout in de massa-balans van het stoftransport is afhankelijk van het aantal elementen, de grootte van de tijdstap en het aantal deeltjes per element. Eén duidelijke oorzaak is niet aan te geven: daarvoor hebben teveel (numerieke) processen invloed op de fout in de massa-balans. In elk geval is het zo dat hoe meer elementen worden genomen, hoe minder de fout fluctueert (zie figuur 8a). In grote lijnen komt het hier op neer: bij weinig elementen (≤ 40 bij 20), bij weinig deeltjes per ele-

¹⁰ Een systeem van 320 bij 160 elementen en 16 deeltjes per element neemt 26 Mbyte EM RAM in beslag. Bij de disciplinegroep Geofysica van de UU is een SUN-Sparc Unix machine aanwezig met 1500 Mbyte EM RAM extern geheugen.



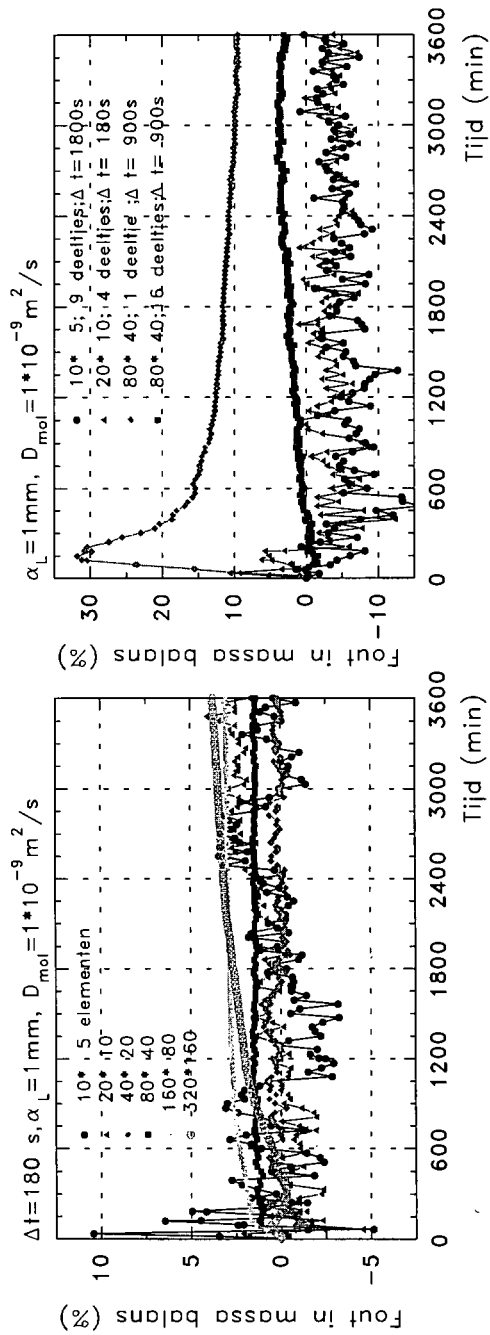
Figuur 7: Positie van het zoutwaterlichaam op $t = 60$ min voor alle zes discretisatie-gevallen.

ment (≤ 4) en een grote tijdstap (dat wil zeggen meerdere verplaatsingen van deeltjes per tijdstap, $\Delta t \geq 900$ s) kan de fout in massa-balans wel 30% bedragen (figuur 8b: uiteindelijk neemt de fout in de massa-balans in dit geval af tot 10%). Bij veel elementen, veel deeltjes per element (≥ 9) en maximaal één deeltjesverplaatsing per tijdstap¹¹ is de fout in de orde van 2 à 3%. Een en ander zal nader worden behandeld in een volgend artikel.

Conclusies

Met MOCDENS3D kan niet-stationaire 3D dichtheidsafhankelijke grondwaterstroming worden gesimuleerd. De aanpassing is relatief simpel. Met de juiste keuze van de element-grootte, de tijdstap en het aantal initiële deeltjes per element blijft de fout in de massa-balans, veroorzaakt door numerieke dispersie, beperkt.

¹¹ Het aantal deeltjesverplaatsingen per tijdstap Δt is onder andere gerelateerd aan het zogenaamde Courant-getal en hangt af van de grootte van het element: hoe kleiner het element, hoe kleiner de tijdstap Δt moet zijn om één verplaatsing per tijdstap Δt te krijgen. Bijvoorbeeld voor $\Delta t = 180$ s, de gevallen (a) en (b) (grote elementen) beginnen met 1 deeltjesverplaatsing per tijdstap; geval (c) met 2 verplaatsingen, geval (d) met 4 verplaatsingen; geval (e) met 9 verplaatsingen en geval (f) met 20 verplaatsingen.



Figuur 8: Fout in de massa-balans van het stoftransport als een functie van de tijd: (a) het effect van een aantal elementen op de fout; de zes referentie-gevallen met $\Delta t = 180 \text{ s}$, $D_{\text{mol}} = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ en $\alpha_L = 1 \text{ mm}$; (b) het effect van het aantal deeltjes per element en de grootte van de tijdstap op de fout in de massa-balans.

Toekomstperspectief

De ontwikkeling van de grondwaterstromingsmodule van MOCDENS3D, te weten MODFLOW, gaat steeds sneller. Zo zijn al een flink aantal ondersteunende grafische modules beschikbaar (bijvoorbeeld Visual MODFLOW, PMWIN, Argus ONE, GMS en Groundwater Vistas). Tevens zijn, behalve MOCDENS3D en MT3D, een groot aantal pakketten en modules in omloop die compatibel zijn met MODFLOW en die aan grondwater gerelateerde processen kunnen modelleren, zoals MODFLOWT (stoftransport), RT3D en BIOMOD 3D (multi-componenten transport), COMPACTION/MODFLOW (compactie van sedimentaire lagen) en MODUFLOW (koppeling MODFLOW en DUFLOW). Combinaties van MOCDENS3D en deze pakketten en modules zullen in de toekomst in staat zijn complexe problemen te modelleren.

Dankbetuiging

De auteur wil Reinder Boekelman van de Technische Universiteit Delft bedanken voor zijn waardevolle commentaar en suggesties voor dit artikel.

Computeranimaties van de twee problemen

De diverse animaties van de verplaatsing van het scherpe grensvlak en het zoutwaterlichaam als een functie van de tijd zijn te verkrijgen door een aanvraag te 'mailen' naar g.oude.essink@geof.ruu.nl (vermeldt uw postadres!), of door de desbetreffende bestanden te downloaden van de Internet-site van de NHV: <http://waterland.net/nhv> of via de ftp-site van het ICHU: <ftp://ftp.geof.ruu.nl/pub/people/goe>.

Lijst van symbolen

$C_{i,j,k}$	=	stofconcentratie in grondwater in element i,j,k in mg/l [$M L^{-3}$]
C_s	=	referentie stofconcentratie in zout grondwater: bijvoorbeeld 35000 mg TDS/l [$M L^{-3}$]
$CV_{i,j,k-1/2}$	=	MODFLOW-term: geleidingsvermogen tussen de elementen $i,j,k-1$ en i,j,k [$L^2 T^{-1}$]
D_{mol}	=	moleculaire diffusie [$L^2 T^{-1}$]
g	=	zwaartekracht [$L T^{-2}$]
h_f	=	zoetwater-stijghoogte [L]
$KV_{i,j,k-1/2}$	=	MODFLOW-term: verticale doorlatendheid tussen de elementen $i,j,k-1$ en i,j,k [$L T^{-1}$]
k_z	=	doorlatendheid in verticale richting [$L T^{-1}$]
n	=	porositeit [-]
p	=	druk [$M L^{-1} T^{-2}$]
$RHS_{i,j,k}$	=	term in de basisvergelijking van MODFLOW voor element i,j,k , bestaande uit termen onafhankelijk van de zoetwater-stijghoogte h_f , zoals bronnen en

putten. Bij dichtheidsberekeningen worden de opdrijfstermen hieraan toegevoegd. (Schaars (1996) noemt deze toevoeging de extra bronterm) [$L^3 T^{-1}$]

R_f	=	retardatiefactor [-]
q_z	=	verticale Darcy-snelheid [$L T^{-1}$]
v	=	effectieve snelheid [$L T^{-1}$]
TDS	=	total dissolved solutes: concentratie van opgeloste stoffen in grondwater in mg/l [$M L^{-3}$]
$BOUY_{i,j,k}$	=	opdrijfsterm, het relatieve dichtheidsverschil tussen de elementen i,j,k en $i,j,k+1$ [-]
z	=	plaatshoogte (z -as wijst in tegengestelde richting van de zwaartekracht) [L]
α_L	=	longitudinale dispersiviteit [L]
α_{TH}, α_{TV}	=	transversale dispersiviteit, respectievelijk horizontaal en verticaal [L]
Δc_i	=	lengte van element i,j,k in kolom-richting [L]
Δr_j	=	breedte van element i,j,k in rij-richting [L]
$\Delta v_{k-1/2}$	=	dikte van element i,j,k in laag-richting [L]
κ_z	=	intrinsieke permeabiliteit in verticale richting [L^2]
μ	=	dynamische viscositeit [$M L^{-1} T^{-1}$]
$\rho_{i,j,k}$	=	dichtheid van grondwater in element i,j,k [$M L^{-3}$]
ρ_f	=	dichtheid van zoet grondwater: 1000 kg/m^3
ρ_s	=	dichtheid van zout grondwater: 1025 kg/m^3

Literatuur

- Bear, J. en A. Verruijt (1987)** Modeling groundwater flow and pollution; D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, 414 pag.
- Bertsch, W. (1978)** Coefficients of longitudinal and transversal hydrodynamic dispersion, a literature review; (in Duits), Sonderdruck aus *Deutsche Gewässerkundliche Mitteilungen*, jrg 22, nr 2, pag. 37–46.
- Daus, A.D., E.O. Frind en E.A. Sudicky (1985)** Comparative error analysis in finite element formulations of the advection-dispersion equation; in: *Advances in Water Resources*, nr 8, pag 86–95.
- De Josseling de Jong (1977)** Review of vortex theory for multiple fluid flow; in: *Delft Progr. Rep.*, 2, pag 225–236.
- Frind, E.O. en G.F. Pinder (1983)** The principle direction technique for solution of the advection-dispersion equation; in: *Proc. 10th IMACS World Congress on Systems Simulation and Scientific Computation*; Concordia University, Montreal, Canada, Aug. 1982, pag 305–313.
- Harbaugh, A.W. en M.G. McDonald (1996)** User's documentation for the U.S. Geological Survey modular finite-difference ground-water flow model; U.S.G.S. Open-File Report 96–485, 56 pag.
- Huyakorn, P.S., P.F. Andersen, J.W. Mercer en H.O. White, Jr. (1987)** Saltwater intrusion in aquifers: development and testing of a three-dimensional finite element model; in: *Water Resources Research*, jrg 23, nr 2, pag 293–312.

- Kinzelbach, W.K.H (1987)** Methods for the simulation of pollutant transport in ground water, A model comparison; in: *Proc. solving ground water problems with models*; Conference and Exposition, volume 1, Denver Colorado, U.S.A., Feb. 1987, pag 656–675.
- Kipp, K.L, Jr. (1986)** HST3D: A computer code for simulation of heat and solute transport in three-dimensional groundwater flow systems; IGWMC, International Ground Water Modeling Center, U.S.G.S. Water-Resources Investigations Report 86–4095.
- Konikow, L.F., D.J. Goode en G.Z. Hornberger (1996)** A three-dimensional method-of-characteristics solute-transport model (MOC3D); U.S.G.S. Water-Resources Investigations Report 96–4267, 87 pag.
- Konikow, L.F. en J.D. Bredehoeft (1978)** Computer model of two-dimensional solute transport and dispersion in ground water; U.S.G.S. Techniques of Water-Resources Investigations, Book 7, Chapter C2, 90 pag.
- Lebbe, L.C. (1983)** Mathematical model of the evolution of the fresh-water lens under the dunes and beach with semi-diurnal tides; in: *Proc. of the 8th Salt Water Intrusion Meeting*, Bari, Italië, Mei 1983, *Geologia Applicata e Idrogeologia*, Vol. XVIII, Parte II: pag. 211–226.
- Maas, C. en M.J. Emke (1988)** Solving varying density groundwater problems with a single density program; in: *Proc. of the 10th Salt Water Intrusion Meeting*, Gent, België, Mei 1988, pag. 143–154.
- McDonald, M.G. en A.W. Harbaugh (1988)** A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model; U.S.G.S. Techniques of Water-Resources Investigations, Book 6, Chapter A1, 586 pag.
- Minnema, B. en J.L. van der Meij (1997)** Three-dimensional density-dependent groundwater flow; techniques and simulation effects of sea level rise in coastal areas with MVAEM; in: *Analytic-based modelling of groundwater flow*, April 1997, Nunspeet, pag 131–141.
- Olsthoorn, T.N. (1996a)** Dichtheidsberekeningen met een standaard grondwatermodel; in: *STROMINGEN*, jrg 2, nr 2, pag 31–38.
- Olsthoorn, T.N. (1996b)** Variable density groundwater modelling with MODFLOW; in: *Proc. of the 14th Salt Water Intrusion Meeting*, Malmö, Zweden, Juni 1996, pag 51–60.
- Oude Essink, G.H.P. (1996)** Impact of sea level rise on groundwater flow regimes. A sensitivity analysis for the Netherlands; Proefschrift Technische Universiteit Delft, 411 pag, Delft Universitaire Pers, ISBN 90-407-1330-8.
- Oude Essink, G.H.P. en R.H. Boekelman (1996)** Problems with large-scale modelling of salt water intrusion in 3D; in: *Proc. of the 14th Salt Water Intrusion Meeting*, Malmö, Zweden, Juni 1996, pag 16–31.
- Sauter, F.J. (1987)** User's manual METROPOL; mathematical description; Iterim report no. 728514.002, RIVM, Bilthoven.
- Schaars, F.W. (1996)** Implementatie van een methode voor het ruimtelijk modelleren van de simultane stroming van zoet, zout en brak grondwater in de Amsterdamse Waterleidingduinen; Afstudeerrapport Technische Universiteit Delft, 102 pag.
- Strack, O.D.L. (1993)** MVAEM: program for Multilayer Variable density Analytic Element Modeling; Strack Consulting Inc., North Oaks MN, USA.
- Werkgroep klimaatverandering en bodemdaling-NW4 (1997)** Klimaatverandering en bodemdaling: gevolgen voor de waterhuishouding van Nederland; Resultaten van een onderzoek in het kader van de voorbereidingen van de vierde Nota waterhuishouding, Rijkswaterstaat, RIKZ, 71 pag.

- Verruijt, A. (1980)** The rotation of a vertical interface in a porous medium; in: *Water Resources Research*, jrg 16, nr 1, pag 239–240.
- Ward, D.S. (1991)** Data input for SWIFT/386, version 2.50; Geotrans Technical Report, Sterling, Va.
- Zheng, C. (1990)** MT3D: A modular three-dimensional transport model; S.S. Papadopoulos and Associates, Bethesda, Maryland, USA.

