
Berekening van door dichtheidsstroming beïnvloed stof- en/of warmtetransport met HST2D en HST3D

Guido Bakema, Igor Jellema en Guus Willemsen

Het onderwerp dichtheidsstroming is reeds in een aantal artikelen in STROMINGEN aan de orde gekomen. Zo doet professor De Vries in de eerste uitgave van STROMINGEN op boeiende wijze verslag van de ontwikkeling van de theorie met betrekking tot de zoet-zout-problematiek en de grondwaterstroming met variabele dichtheid.

Verder illustreert Olsthoorn in STROMINGEN 2 (1996), nummer 2 hoe een probleem met grondwaterstroming met variabele dichtheid kan worden vertaald in een probleem zonder dichtheidsverschillen door middel van stijghoogte- en randvoorwaarde-correcties op de grensulakken. Deze creatieve methode maakt het mogelijk om dichtheidsstroming met een conventioneel grondwatermodel te berekenen.

Een methode om zowel dichtheidsstroming als het daardoor veroorzaakte stof- en/of warmtetransport te berekenen is een modellering met HST2D en HST3D. Dit artikel geeft een introductie van de achtergronden en toepassingsmogelijkheden van deze modellen.

1 Inleiding

In het kader van opslag van nucleair afval en diep-infiltratie van vloeibare afvalstoffen zijn in de zeventiger en tachtiger jaren grote sommen geld besteed aan de ontwikkeling en verbetering van geavanceerde gekoppelde stromingsmodellen, waarmee naast de waterstroming (of de stroming van een andere vloeistof) ook het warmte- en opgeloste stoftransport kan worden berekend.

Deze modellen, met namen als SWIP (Survey Waste Injection Program) en HST3D (Heat and Solute Transport in 3D), zijn echter in de grondwaterwereld vrijwel onbekend. Daarnaast werken deze modellen met de grootte 'druk' in plaats van de door hydrologen beminde grootte 'stijghoogte'. De komst van snelle PC's en de ontwikkeling van in- en uitvoermodules heeft deze modellen zodanig toegankelijk gemaakt dat ze ook binnen de hydrologie zouden kunnen worden gebruikt. Naast een korte historische en theoretische achtergrond van één van deze modellen (HST2D/3D) worden twee cases gepresenteerd. Deze cases betreffen het thermisch gedrag van een lage-temperatuur-warmteopslag en het ontstaan en de ontwikkeling van een zoetwaterbel onder de duinen.

De auteurs zijn werkzaam bij IF Technology, Postbus 605, 6800 AP Arnhem; e-mail: office@if-tech.nl.

2 De ontwikkeling tot HST3D-PC

HST3D is in begin jaren tachtig ontwikkeld door de U.S. Geological Survey als uitbreiding op en verbetering van de SWIP software (Kipp 1986). Deze mainframe-versie van HST3D is door zijn vele bugs, de trage numerieke oplossingsmethode en het ontbreken van in- en uitvoerprocessoren moeilijk bruikbaar. Interesse van de ontwerpers van warmteopslagsystemen leidt er toe dat in 1989 het bedrijf Hagoort en Associates uit Delft, samen met de oorspronkelijke maker van HST3D, een sterk verbeterde 2-dimensionale PC-versie van het model ontwikkelt (Hagoort, 1989). Deze eerste versie kan maximaal 500 knopen hanteren en wordt tot 1994 veelvuldig gebruikt voor het berekenen van de thermische rendementen van koude- en warmteopslagprojecten. In 1994 wordt door IF Technology een nieuwe 2500-knopen-versie ontwikkeld die gebruikt maakt van extended memory tot 4 MB.

Uiteindelijk wordt in 1997 door Verbeek Consultant in samenwerking met IF Technology een 20.000 knopen versie van HST2D-PC ontwikkeld, waardoor naast locale situaties ook meer regionaal gerichte problemen kunnen worden gemodelleerd. Daarnaast zijn in deze nieuwe versie opties toegevoegd zoals: grafische uitvoer op het scherm tijdens de simulatie (zodat de simulatie 'live' kan worden meegemaakt), een stabielere oplossingsmethode, een niet-lineaire warmte-dichtheid-relatie en de mogelijkheid om complexe niet stationaire pompregimes te modelleren. Recentelijk is ook een drie-dimensionale PC-versie (HST3D-PC) ontwikkeld (Bakema en Jellema, 1997).

3 Theoretische achtergronden van HST2D/3D

De berekening van de grondwaterstroming vindt plaats op basis van:

$$\frac{\delta(\varepsilon\rho)}{\delta t} = \nabla \cdot \rho \frac{\kappa}{\mu} (\nabla p + \rho g) + q \rho^*$$

Het linkerlid beschrijft de totale massaverandering in de vloeistof, de eerste term van het rechterlid de netto instroming door drukverschillen en de tweede term van het rechterlid de instroming via een bron. De viscositeit μ is afhankelijk van temperatuur en hoeveelheid opgeloste stof. De dichtheid ρ is een functie van temperatuur, hoeveelheid opgeloste stof en druk. Zowel vloeistof als korrel skelet zijn samendrukbaar.

De berekening van het stoftransport vindt plaats op basis van een analoge formule:

$$\frac{\delta(\varepsilon\rho w)}{\delta t} = \nabla \cdot \varepsilon\rho D_s \nabla w + \nabla \cdot \varepsilon\rho D_m \nabla w - \nabla \cdot \varepsilon\rho v w - \lambda \varepsilon\rho v w - \rho_b R_{fs} + q \rho^* w^*$$

Het linkerlid beschrijft de totale massaverandering van de hoeveelheid opgeloste stof, het rechterlid respectievelijk de netto instroming ten gevolge van dispersie, diffusie, advectie, lineaire afbraak, retardatie en een bronterm.

De berekening van het warmtetransport is eveneens analoog; echter hier is nog het warmtetransport door geleiding toegevoegd:

$$\frac{\delta(\varepsilon\rho c_f + (1-\varepsilon)\rho_s c_s)T}{\delta t} = \nabla \cdot (\varepsilon K_f + (1-\varepsilon)K_s) \nabla T + \nabla \cdot \varepsilon D_h \nabla T - \nabla \cdot \varepsilon\rho c_f v T + q_h + q \rho^* c_f T$$

Het linkerlid beschrijft de totale verandering van de warmte-inhoud (enthalpie) voor de vloeibare en de vaste fase, het rechterlid respectievelijk de netto warmte-instroming ten gevolge van geleiding, dispersie, advection en twee typen brontermen.

De drie differentiaalvergelijkingen worden door middel van de eindige-differentie-discretisatie parallel opgelost. In de tijd kan de discretisatie worden ingesteld tussen 'central in time' (CT) en 'backward in time' (BT) en in de ruimte tussen 'central in space' (CS) en 'backward in space' (BS). Daar naast kan gekozen worden uit een directe en een iteratieve oplossings-methode.

Bij de keuze van de discretisatie-methode moet rekening gehouden worden met stabiliteitsproblemen en afbreekfouten. De deels expliciete methoden (CS en CT) stellen vanwege stabiliteitsproblemen strenge eisen aan de te kiezen tijd- en ruimtestap. Dit leidt veelal tot dusdanig kleine stappen dat bij het oplossen van problemen op regionale schaal de reken-tijd onaanvaardbaar vergroot wordt. De deels expliciete methoden hebben wel het voordeel van een kleine afbreekfout, waardoor numerieke dispersie wordt voorkomen. Numerieke dispersie treedt op bij de impliciete rekenschema's (BS en BT). Zolang de numerieke dispersie de fysieke dispersie niet overschrijdt, hebben de impliciete rekenschema's, vanwege de grotere stabiliteit, veelal de voorkeur.

HST3D is in de ontwikkelingsperiode geverifieerd middels analytische oplossingen en middels numerieke oplossingen van andere geverifieerde programma's. De testproblemen zijn onder meer: putstroming in een gespannen en een ongespannen pakket, ééndimensionale stroming (gespannen en ongespannen met en zonder neerslag), één-dimensionale warmtegeleiding en warmtetransport door advection en twee-dimensionale radiaal-symmetrische warmte-injectie in een bron (Kipp, 1987).

4 Case 1: Lage-temperatuur-warmteopslag

Algemeen

Energieopslag in watervoerende lagen is een sinds 1985 veelvuldig toegepaste techniek om gebouwen en/of processen op een duurzame manier van koeling en/of verwarming te voorzien. Het meest gebruikte concept is koudeopslag. Het principe van deze techniek is dat in de zomer wordt gekoeld met winterkoude. In Nederland zijn reeds circa 50 kantoren, ziekenhuizen e.d. uitgerust met dit koelsysteem. Gezien het feit dat de temperatuur waarbij het grondwater wordt opgeslagen slechts enkele graden boven of onder de natuurlijke grondwatertemperatuur ligt, speelt dichtheidstroming bij koudeopslag een ondergeschikte rol. Een hydrothermische modellering in het horizontale vlak voldoet in deze situatie. Duidelijk anders is dit wanneer warmte ($> 30\text{ }^{\circ}\text{C}$) in watervoerende lagen wordt opgeslagen. Het opgeslagen warme grondwater is lichter dan het omringende water en heeft de neiging omhoog te stromen. Indien de weerstand tegen deze verticale stroming gering is, kan dit er toe leiden dat een groot deel van de opgeslagen warmte niet meer kan worden teruggewonnen. Bij het ontwerp van een warmteopslag is derhalve inzicht in de dichtheidsstroming zeer belangrijk. Om zowel de invloed van de natuurlijke grondwaterstroming als ook de dichtheidsstroming te modelleren zal veelal in drie dimensies moeten worden gerekend. Een van de projecten waarvoor een warmteopslag is ontworpen en uiteindelijk ook is gerealiseerd, is het Dolfinarium in Harderwijk.

Uitgangspunten van de berekening

Het Dolfinarium te Harderwijk is eind 1996 uitgerust met een warmte-krachtkoppeling (WKK) gecombineerd met een warmteopslag. Het warmteoverschot van de WKK wordt in de zomer opgeslagen in de ondergrond, teneinde in de winter te worden gebruikt voor bas-sinverwarming. Deze warmteopslag vindt plaats met behulp van twee bronnen. In de zomer wordt grondwater uit de 'koude' bron opgepompt en middels een warmtewisselaar opgewarmd tot circa 40 °C, waarna het in de 'warme' bron wordt geïnfiltrerd. In de winter stroomt het water de andere kant op, en wordt er warmte uit de bodem onttrokken. Een belangrijk ontwerpcriterium bij een warmteopslag is de onttrekkingstemperatuur in de winter. Daalt deze te snel onder het niveau waarbij deze nog bruikbaar is in het verwarmingsproces, dan is het rendement van de opslag laag.

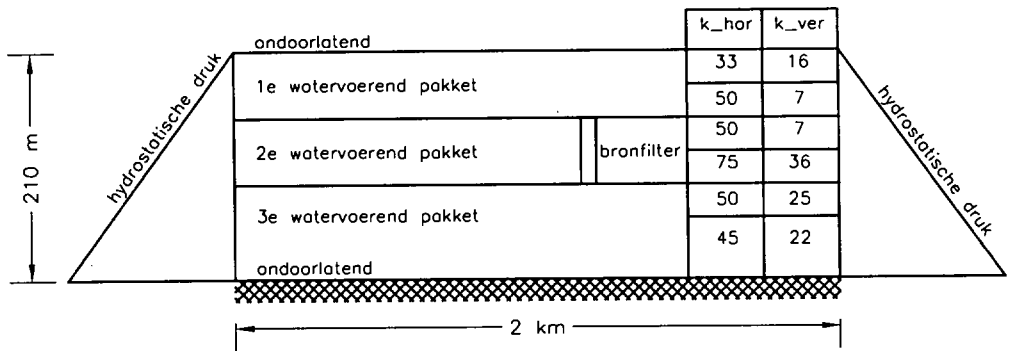
De opslag is gerealiseerd in de zanden van de formatie van Harderwijk op een diepte tussen de 60 en 100 m –mv. Deze formatie, bestaande uit matig fijn tot zeer grof zand, is in zowel de horizontale als in de verticale richting goed doorlatend. Dit betekent in feite dat dit pakket minder geschikt is voor warmteopslag. Dit wordt bevestigd door de eerste thermische berekeningen. Een andere watervoerende laag is in dit gebied niet voorhanden of economisch niet aantrekkelijk. Om het rendement te verbeteren zijn o.a. de volgende wijzigingen overwogen:

- Het verlagen van de natuurlijke grondwaterstroming door het maken van een by-pass;
- het onttrekken van een deel van de warmte middels een extra stroomafwaarts en hoger geplaatste bron;
- het onttrekken van meer water uit de warme bron dan er gedurende de zomer periode in is geïnfiltrerd.

Teneinde de effecten van de diverse varianten goed in beeld te krijgen is de opslag in HST3D gemodelleerd. De schematisatie van het model staat afgebeeld in figuur 1.

Resultaten en conclusies

Ter vergelijking van de diverse varianten zijn in figuur 2 enkele warmteverspreidingsbeelden na 5 jaar opslag weergegeven. Figuur 2a maakt duidelijk dat zonder het treffen van aanvullende maatregelen een groot gedeelte van de bruikbare warmte bovenin het watervoerende pakket gaat zitten. Het aanvullend partieel en stroomafwaarts onttrekken van het warme grondwater maakt dat de geïsoleerde bruikbare warmte weer aan de bodem kan worden onttrokken (figuur 2b). Economische en topografische belemmeringen zijn er – ondanks de goede thermische eigenschappen, de oorzaak van dat niet voor deze variant is gekozen. In de uiteindelijk toegepaste variant wordt gedurende een langere tijd aan de warme bron onttrokken (figuur 2c). Gevolg hiervan is dat een belangrijk deel van de opgeslagen warmte wordt teruggewonnen, maar dat dit gebeurt bij een te lage temperatuur. Door een wijziging van de integratie van het opslagsysteem in het gehele verwarmingssysteem blijkt grondwater met een dergelijke temperatuur nog bruikbaar. Ter illustratie is in figuur 2d de situatie uit figuur 2a weergegeven van een modellering waarbij het fenomeen dichtheidsstroming is genegeerd. Gevolg is een schijnbaar hoog thermisch rendement.



Figuur 1: Modelschematisatie case 1: lage temperatuur warmteopslag.

5 Case 2 : Het ontstaan van een zoetwaterbel onder de duinen

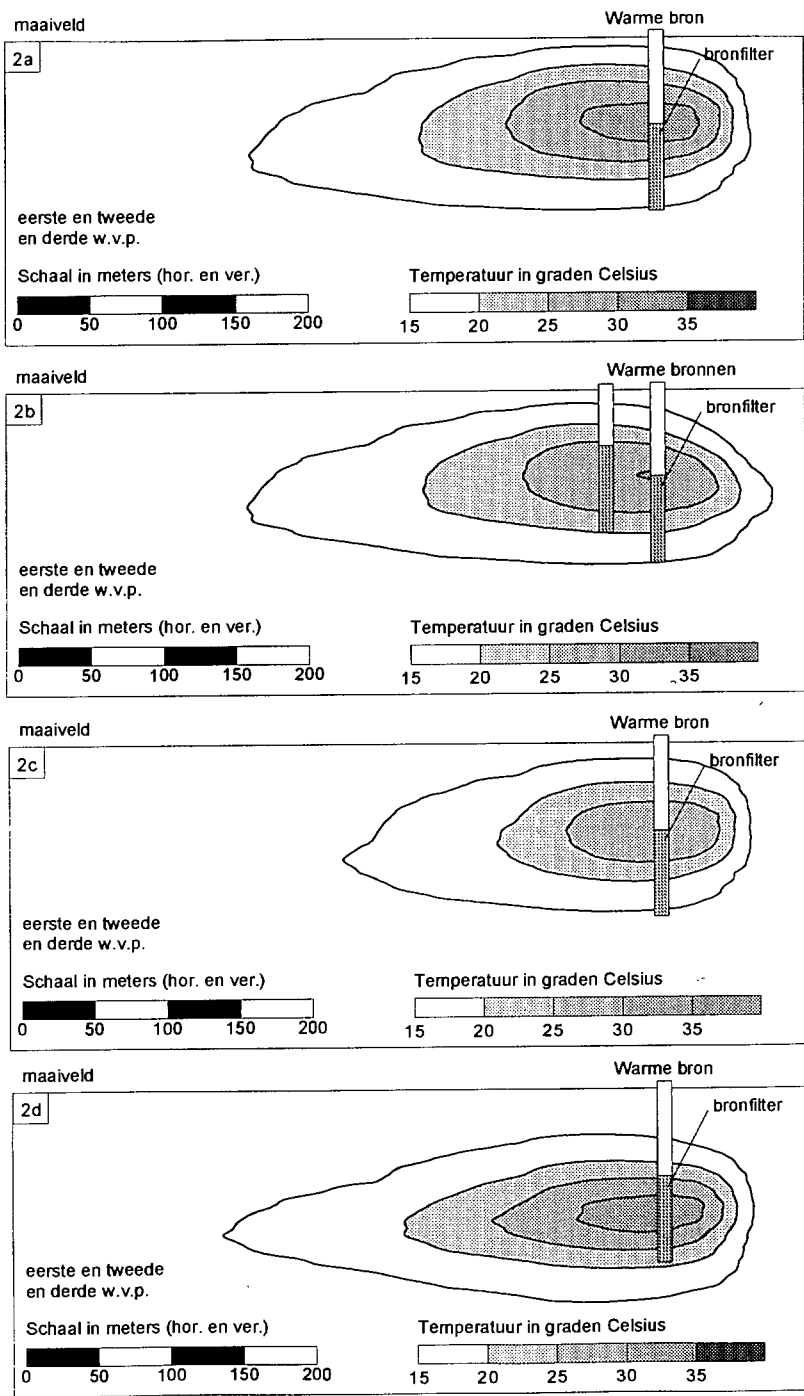
De vorige case heeft duidelijk gemaakt dat HST3D bruikbaar gereedschap is om lokale driedimensionale dichtheidsafhankelijke stromingsproblemen te analyseren. Of dit ook geldt voor regionale problemen is in case 2 getoetst. Een van de belangrijkste regionale hydrologische situaties waarbij dichtheidsstroming een rol speelt, is het gedrag van zoet grondwater in een overigens zoute aquifer of visa versa. Te denken valt hierbij aan de wegzijging van oppervlaktewater met een hoog zoutgehalte, een verhoging van de zeespiegel, het oppompen van grondwater boven een zoet/zout grensvlak of aan het infiltreren van voorgezuiverd oppervlaktewater in een zoute aquifer.

In deze case is getracht het ontstaan van de zoetwaterbel onder de Amsterdamse duinen te simuleren. Het is niet de opzet geweest om een zo exact mogelijke benadering van de werkelijkheid te simuleren. Getracht is om via een eenvoudige schematisatie het model te testen. Het idee voor deze simulatie is ontstaan naar aanleiding van eerdere pogingen om dit probleem in HST3D te modelleren (Ossenkoppe,1993).

Uitgangspunten van de berekening

Uitgegaan is van de situatie dat er geen zoetwaterbel was. De Haarlemmermeer was nog niet ingepolderd en het grondwater was overal even zout. Het waterpeil in de Haarlemmermeer is gelijk gesteld aan het gemiddeld zeewaterpeil. Het duingebied wordt gevoed met zoet regenwater; in de polder wordt de neerslag afgevangen en wordt een constant peil gehandhaafd. De modelschematisatie is af te leiden uit figuur 3. Het initiële zoutgehalte bedraagt 30 gram zout per liter. Het modelgebied beslaat een strook van 20 km lang bij 160 m diep. De knooppuntsafstand bedraagt 10 meter in de verticaal en 50 meter in de horizontaal.

De doorlatendheden van de watervoerende pakketten en scheidende lagen zijn gebaseerd op de eerder genoemde studie en zijn oorspronkelijk gebaseerd op de ijkresultaten van het OHO-model (Oeco-Hydrologisch Onderzoeksmodel). Het model heeft gerekend met tijdstap



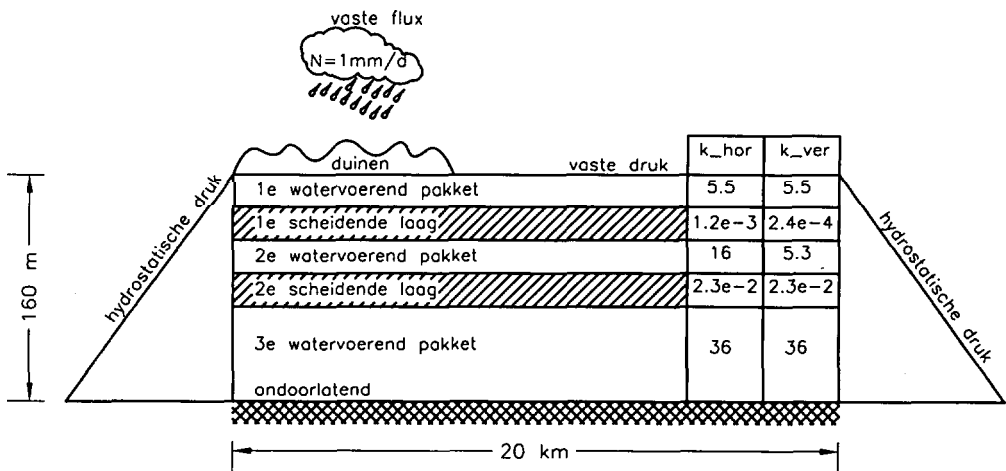
Figuur 2: Warmteverspreiding in een verticale dwarsdoorsnede na 10 jaar warmteopslag; a: warmteopslag zonder aanvullende maatregelen, b: aanvullende partiële onttrekking c: extra warmte onttrekking, d: modellering zonder dichtheidsstroming.

pen van maximaal 0,1 jaar. Het model is eerst 1000 jaar doorgerekend . Na 1000 jaar is de Haarlemmermeer ingepolderd (1852 AD) waarbij een peilverlaging is doorgevoerd van 5 meter. Na deze peilverlaging is het model nog eens 145 jaren doorgerekend (1997 AD).

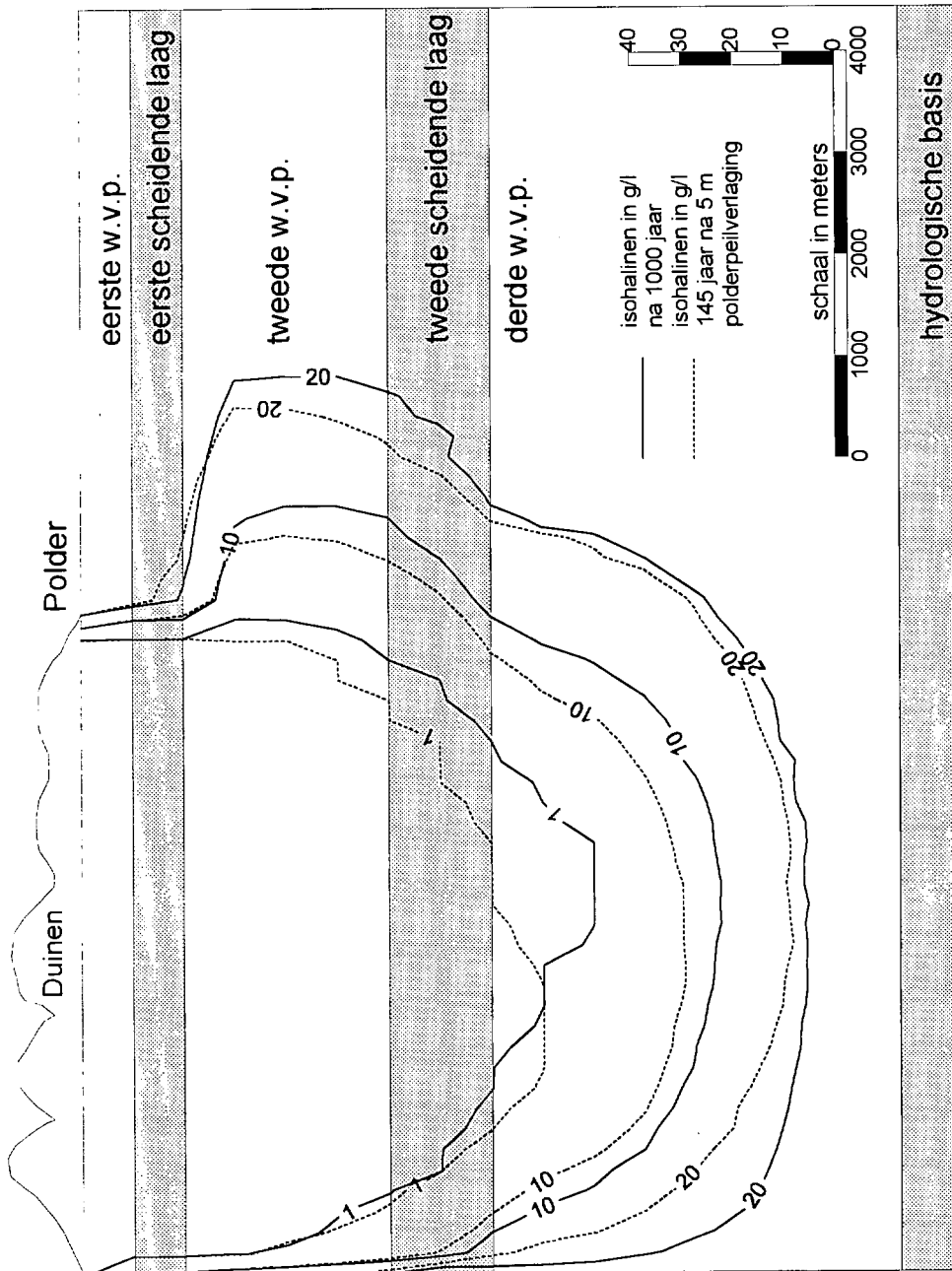
Resultaten en conclusies

In figuur 4 zijn de isohalinen (lijnen van gelijke zoutconcentratie) afgebeeld na 1000 en 1150 jaar. Na 1000 jaar bereikt de zoetwaterbel (< 500 mg/l chloride) een diepte van circa 90 meter waarbij het diepste punt midden tussen de duinen valt. De diepte en vorm van de zoetwaterbel na 1000 jaar lijken op de situatie omstreeks 1850 (zie Stuyfzand, 1993). 150 Jaar na de polderpeilverlaging is de bel circa 10 meter geslonken en is het diepste punt zeewaarts verschoven. Deze verschuiving kan worden verklaard doordat de peilverlaging een vermindering van de aan de diepere aquifers ten goede komende neerslag teweegbrengt. Hoe dichter de neerslag bij de polder valt, hoe minder de diepere pakketten worden gevoed.

Tijdens deze modellering is gebleken dat het HST2D-model in dit geval moeite heeft met het vinden van een stabiele oplossing. De oorzaak hiervan zou kunnen liggen bij het sterke verschil in zoutconcentraties over zeer geringe afstanden binnen het modelgebied. Ondanks deze problemen is het model in staat deze complexe case goed te simuleren. Meer eenvoudige zoet/zout-problemen, zoals het upconen van een zoutfront ten gevolge van een koudeopslag, blijken met HST2/3D probleemloos te kunnen worden doorgerekend (IF Technology, 1996).



Figuur 3: Modelschematisatie case 2: Het ontstaan van een zoetwaterbel onder de duinen.



Figuur 4: Isohalinen vóór inpoldering van de Haarlemmermeer en 150 jaar na inpoldering.

6 Evaluatie

De moederversie van HST3D uit 1987 is in de afgelopen 10 jaar zodanig verder ontwikkeld dat nu locale en regionale stof- en warmtetransportproblemen waarbij dichtheidsstroming een rol speelt, op relatief eenvoudige wijze kunnen worden doorgerekend. Een modellering met HST3D vereist echter wel dat aandacht wordt besteed aan zaken die bij een reguliere hydrologische modellering niet aan de orde komen. Dit betreft bijvoorbeeld het gebruik van de parameter druk i.p.v. de stijghoogte, het rekenen met dispersie, het meewegen van numerieke dispersie en het kiezen van ruimte- en tijdstappen zodanig dat een stabiele oplossingsmethode wordt verkregen. Daarnaast is het veelal niet eenvoudig om voor het grote aantal invoerparameters realistische waarden te vinden.

De huidige HST3D/2D-versie wordt in Nederland hoofdzakelijk gebruikt voor het doorrekenen van koude- en warmteopslagsystemen. Het model kent echter veel meer toepassingsmogelijkheden zoals:

- het gedrag van percolatiewater uit een vuilstort;
- het gedrag van verontreinigingen die in opgeloste vorm zwaarder of lichter zijn dan water;
- de verandering van het zoet/zout grensvlak als gevolg van hydrologische ingrepen zoals grondwateronttrekkingen of oppervlaktewaterinfiltratie.

Daarnaast kan het model gebruikt worden voor alle drie-dimensionale stof- en warmtetransportproblemen waarbij dichtheden niet direct een rol spelen. Verder kan ook het transport van andere vloeistoffen of gassen worden gemodelleerd.

7 Slot

Hydrologen die geconfronteerd worden met een grondwaterprobleem waarbij naast kwantiteit ook kwaliteit een rol speelt, zijn veelal geneigd dit te analyseren middels een bestaand grondwaterstromingsmodel waaraan een eenvoudige kwaliteitsmodule is gekoppeld. De in dit artikel gepresenteerde modellen geven aan dat dergelijke methoden in principe niet meer noodzakelijk zijn, hoewel ze in individuele gevallen inzichtelijk kunnen werken. Wij hopen met dit artikel te bereiken dat meer hydrologen er toe overgaan gekoppelde stromingsmodellen te gebruiken, waardoor de mogelijkheid bestaat kwaliteitsveranderingen in het grondwater nauwkeuriger te simuleren.

Lijst van symbolen

ε	=	porositeit	[-]
ρ	=	dichtheid van de vloeistof	[kg/m ³]
ρ^*	=	dichtheid van bronterm	[kg/m ³]
ρ_s	=	dichtheid vaste fase	[kg/m ³]
ρ_b	=	bulkdichtheid van het poreuze medium	[kg/m ³]
t	=	tijd	[s]
κ	=	intrinsieke permeabiliteit	[m ²]
μ	=	viscositeit	[kg/ms]
p	=	druk	[Pa]

q	=	brondebiet	$[m^3/m^3s]$
q_h	=	warmteflux	$[W/m^3]$
w	=	massafractie opgeloste stof	$[-]$
w^*	=	massafractie opgeloste stof van de bronterm	$[-]$
D_s	=	mechanische dispersiecoëfficiënt	$[m^2/s]$
D_m	=	moleculaire dispersiecoëfficiënt	$[m^2/s]$
I	=	eenheidsmatrix	$[-]$
v	=	interstitiële snelheid	$[m/s]$
λ	=	lineaire afbraakcoëfficiënt	$[1/s]$
R_{fs}	=	retardatiecoëfficiënt	$[kg_{stof}/s.kg_{vast}]$
c_f	=	warmtecapaciteit van de vloeistof	$[J/kg^{\circ}C]$
c_s	=	warmtecapaciteit van het poreuze medium	$[J/kg^{\circ}C]$
T	=	temperatuur	$[^{\circ}C]$
K_f	=	warmtegeleidingscoëfficiënt vloeistof	$[W/m^{\circ}C]$
K_s	=	warmtegeleidingscoëfficiënt poreuze medium	$[W/m^{\circ}C]$
D_h	=	thermomechanische dispersiecoëfficiënt	$[W/m^{\circ}C]$

Literatuur

- Bakema, G en I. Jellema (1997)** The HST3D program for solving problems related to ATES. Proceedings Megastock 1997, Sapporo, Japan.
- IF Technology (1996)** Effectenstudie koudeopslag Congresgebouw Den Haag 2/9615/GW; Arnhem.
- IF Technology (1997)** Effectenstudie lage temperatuur warmteopslag Dolfinarium Harderwijk; 2/9620/AS; Arnhem.
- Kipp, K.L. (1987)** HST3D: A computer code for the simulation of heat and solute transport in three-dimensional ground-water flow systems; USGS Water-Resources Investigations Report 86-4095; Denver, Colorado.
- Ossenkoppele, H. (1993)** Modellerling van de verdeling van de beweging van zoet, brak en zout grondwater in het duingebied van de gemeentewaterleiding Amsterdam. Gemeentewaterleiding Amsterdam, TU Delft; Leiduin.
- Stuyfzand, P.J. (1993)** Hydrochemistry and Hydrology of the Coastal Dune area of the Western Netherlands; KIWA, Nieuwegein.