

---

# Dichtheidsberekeningen met een standaard grondwatermodel

Ir. T.N. Olsthoorn

---

## Samenvatting

*Grondwaterstroming bij variabele dichtheid kan uitstekend worden uitgerekend met een standaard grondwatermodel, zoals MODFLOW (Maas en Emke, 1988). De berekeningen worden vereenvoudigd door gebruik te maken van de zoetwaterstijghoogte in plaats van druk, en van de hydrostatische zoetwaterstijghoogte in plaats van hydrostatische druk. Dit artikel laat aan de hand van de eenvoudig voorbeeld zien hoe dit werkt. Het voorbeeld wordt gecontroleerd aan de hand van de analytische oplossing. En passant wordt de mathematische definitie gegeven van omgevingsstijghoogte, die dient om de verticale stroming te berekenen bij variabele dichtheid (Van de Eem, 1992). De aanpak is niet beperkt tot uitsluitend doorsneden zoals het geval is bij methoden die zich baseren op de stroomfunctie (Van den Akker, 1982 en Olsthoorn, 1992) of aangepaste methode van Konikow Bredehoeft (Van der Eem, 1992). Uitgewerkt voor een MODFLOW-modelrooster waarbij de cellen in een laag in hoogte mogen variëren, wordt de methode momenteel grootschalig toegepast in het grondwatermodel van de Amsterdamse Waterleidingduinen. Wanneer men met name geïnteresseerd is in de stroming in het zoete deel van het model is de aanpak extra aantrekkelijk, aangezien de resultaten, de zoetwaterstijghoogte en de volumestromen, daar zonder enige wijziging of correctie direct bruikbaar zijn.*

## Inleiding

Het is verbazend hoe eenvoudig en elegant (eigenlijk) de simultane stroming van zoet, brak en zout water met een gewoon grondwatermodel kan worden uitgerekend. Maas en Emke (1988) hebben hier het voortouw genomen. Zij rekenen echter met drukken en verdelen de aquifer in lagen met constante dichtheid. Het berekenen van stroming met variabele dichtheid met een standaardmodel wordt echter een stuk eenvoudiger met stijghoogten. Omrekening van en naar drukken, omzetting van randvoorwaarden naar drukken alsmede splitting van lagen langs grensvlakken kan dan vervallen.

Omdat de wet van Darcy bij variabele dichtheid alleen voor druk is gedefinieerd beginnen we daarmee. We stappen echter zo snel mogelijk over op stijghoogten. Behalve de vereenvoudiging die dit oplevert, verkrijgen we en passant de definitie van de 'omgevingstijghoogte' (zie voor een beschrijving Van der Eem, 1992). We toetsen één en ander aan de hand van een eenvoudig voorbeeld met bekende analytische oplossing. Tenslotte leggen we uit hoe je de dichtheidsstroming met stijghoogten moet zien.

De aanpak blijkt zo algemeen, dat we hem nu op grote schaal en in drie dimensies in MODFLOW toepassen voor de Amsterdamse Waterleidingduinen. Een verslag hierover volgt later.

Volgens Darcy geldt in de horizontale  $x$  en  $y$ -richting en de naar boven positief genomen  $z$ -richting (zie symbolenlijst):

$$q_x = -\frac{\kappa_x}{\mu} \frac{\partial p}{\partial x}; \quad q_y = -\frac{\kappa_y}{\mu} \frac{\partial p}{\partial y}; \quad q_z = -\frac{\kappa_z}{\mu} \left( \frac{\partial p}{\partial z} + \gamma \right)$$

Samen met de eis van continuïteit en een bronterm,  $q$  [ $T^{-1}$ ], geldt de overkoepelende differentiaalvergelijking:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\kappa_x}{\mu} \frac{\partial p}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\kappa_y}{\mu} \frac{\partial p}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{\kappa_z}{\mu} \left( \frac{\partial p}{\partial z} + \gamma \right) \right] = q$$

We schakelen nu over op stijghoogte door te schrijven:  $\phi = p/\gamma_0 + z$ , zodat  $p = \gamma_0(\phi - z)$ , met  $\gamma_0$  [ $F/L^3$ ] als vast soortelijk gewicht, waarvoor we om pragmatische redenen dat van zoet water kiezen. Overgang op stijghoogte moet uitsluitend worden opgevat als een overstap op een handiger parameter. Aangezien geldt dat  $k = \gamma_0 \kappa/\mu$ , met  $k$  [ $L/t$ ] de doorlatendheid van zoet water volgt de volgende differentiaalvergelijking in zoetwaterstijghoogten:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ k_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ k_y \frac{\partial \phi}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ k_z \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} + \left( \frac{\gamma}{\gamma_0} - 1 \right) \right) \right] = q$$

We definiëren nu de hydrostatische zoetwaterstijghoogte,  $G$  [ $L$ ], als volgt:

$$G(z) = \frac{\Gamma(z)}{\gamma_0} + z = \frac{\int_0^z \gamma(z) dz}{\gamma_0} + z = - \int_0^z \left( \frac{\gamma(z)}{\gamma_0} - 1 \right) dz$$

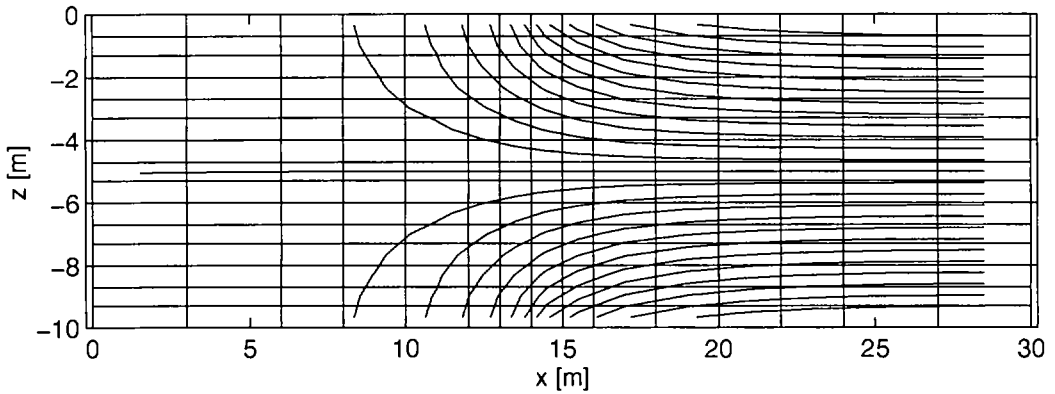
waarin  $\Gamma$  [ $F/L^2$ ] de hydrostatische druk is, zodat nu geldt:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ k_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ k_y \frac{\partial \phi}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ k_z \frac{\partial (\phi - G)}{\partial z} \right] = q$$

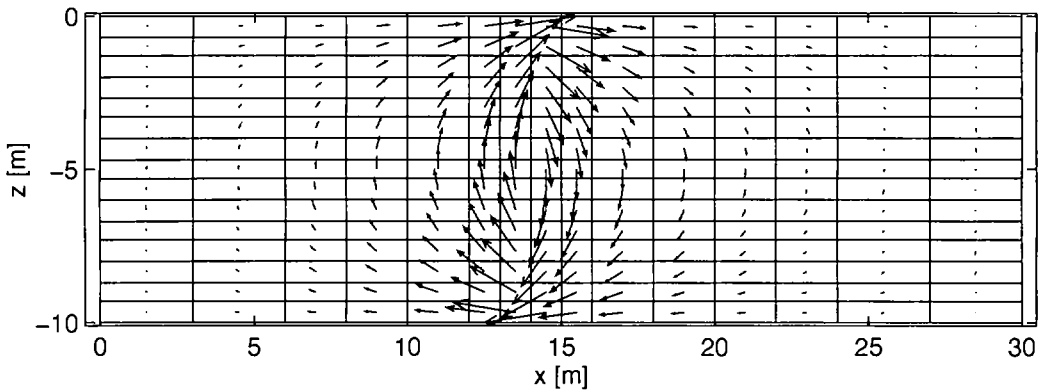
Waaruit blijkt dat  $\Phi = \phi - G$  de omgevingsstijghoogte is. Deze immers levert door differentiëren naar  $z$  de verticale snelheid op (Van der Eem, 1992):

$$q_z = -k_z \frac{\partial \Phi}{\partial z}$$

Om de stroming met een standaard grondwatermodel te kunnen uitrekenen kunnen we alleen gebruik maken van de zoetwaterstijghoogte,  $\phi$ . We brengen daarom het dichtheidseffect naar rechts:



Figuur 1: Modelcellen en berekende stijghoogtecontouren. Verticaal grensvlak op x=14 m.



Figuur 2: Modelcellen en berekende snelheidsvectoren.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ k_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ k_y \frac{\partial \phi}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ k_z \frac{\partial \phi}{\partial z} \right] = q + \frac{\partial}{\partial z} \left[ k_z \frac{\partial G}{\partial z} \right] = q - \frac{\partial}{\partial z} \left[ k_z \left( \frac{\gamma}{\gamma_0} - 1 \right) \right]$$

Deze vergelijking wordt door elk standaard grondwatermodel opgelost, mits de tweede term van het rechterlid wordt opgeteld bij de bronterm  $q$ . We zullen nu laten zien hoe het werkt.

### Voorbeeld

We kiezen het voorbeeld van Van den Akker (1982) dat ook door Olsthoorn (1990) is gebruikt voor toetsing van zijn spreadsheetmodel. Het betreft de stroming in een verticale rondom gesloten doorsnede 10 m hoog en 60 m breed. In het centrum bevindt zich een verticaal grensvlak met links zoet water ( $1000 \text{ kg/m}^3$ ) en rechts zout water ( $1025 \text{ kg/m}^3$ ). De doorlatendheid is 35 m/d in alle richtingen en de porositeit 35%. Gevraagd wordt het snelheidsveld in de doorsnede op  $t = 0$ .

Dit stoppen we bijvoorbeeld in MODFLOW (of in een spreadsheetmodel), d.w.z. we gebruiken een rechthoekig horizontaal-verticaal georiënteerd cellenrooster zodat alle cellen in een laag even hoog zijn en aansluiten (zoals in figuren 1 en 2). De differentiaalvergelijking geldt dan bij benadering voor dit rooster.

Alleen de dichtheid moet nu nog worden verwerkt. Aangezien het soortelijk gewicht,  $\gamma$ , bij dit voorbeeld langs elke verticaal van de doorsnede constant is, valt de bijdrage van de dichtheid (tweede term rechterlid van de differentiaalvergelijking) geheel weg uit het model!

Conclusie: het dichtheidseffect moet hier dus geheel in de randvoorwaarden zitten. Wat zijn die randvoorwaarden? Welnu, om te beginnen hebben we altijd in tenminste 1 punt een stijghoogte nodig. Deze kiezen we bijvoorbeeld nul in het punt linksboven. Verder geldt dat alle randen dicht zijn. Dus  $q_x = 0$  aan de linker en rechter rand van de doorsnede. Dit levert geen bijzonderheden: aangezien  $q_x$  direct volgt uit de horizontale gradiënt van de zoetwaterstijghoogte stelt een dichte rand in het zoetwatermodel ook een dichte rand bij dichtheidsstroming voor. Voor een dichte boven- en onderrand wordt dit anders:

$$q_z = -k_z \frac{\partial \Phi}{\partial z} = -k_z \frac{\partial(\phi - G)}{\partial z} = 0 \rightarrow q_{\text{fresh},z} = -k_z \frac{\partial \phi}{\partial z} = -k_z \frac{\partial G}{\partial z} = k_z \left( \frac{\gamma}{\gamma_0} - 1 \right)$$

Dus om bij dichtheidstroming  $q_z$  gelijk aan nul te krijgen moet de Darcy-snelheid in  $z$ -richting van het zoetwatermodel,  $q_{\text{fresh},z}$  gelijk zijn aan  $k_z(\gamma/\gamma_0 - 1)$ . Dus, om een dichte boven- en onderrand te krijgen moet in het zoetwatermodel langs onder- een bovenrand een verticale randstroming van deze sterkte worden opgelegd. In MODFLOW geschiedt dit door middel van infiltratiebronnen aan de onderrand en onttrekkingsbronnen aan de bovenkant, waarvan de sterkte gelijk is aan  $Q = k_z(\gamma/\gamma_0 - 1)B$  [ $L^2/t$ ], met  $B$  de breedte van de kolom. In het zoete water (linkerdeel van de doorsnede) vallen deze bronnen geheel weg, aangezien daar  $\gamma = \gamma_0$ . In het zoute water, rechts in de doorsnede, zijn zij niet gelijk aan nul. Na invoering kunnen we het model runnen en verkrijgen stijghoogten en volumestromen tussen de cellen. Figuur 1 toont het stijghoogtebeeld. In de rechterhelft van de figuur zijn onderin de 'infiltratiebronnen' aangebracht, en bovenin de 'onttrekkingsputten'. De contourlijnen tonen hoe het water hiertussen beweegt. De horizontale gradiënten behoeven geen correctie en zijn direct goed. Alleen de verticale snelheden moeten nog voor de dichtheid worden gecorrigeerd:

$$q_z = -k_z \frac{\partial(\phi - G)}{\partial z} = -k_z \frac{\partial \phi}{\partial z} + k_z \frac{\partial G}{\partial z} = q_{\text{fresh},z} - k_z \left( \frac{\gamma}{\gamma_0} - 1 \right)$$

Van de verticale zoetwatersnelheid dient dus overal de snelheid  $k_z(\gamma/\gamma_0 - 1)$  te worden afgetrokken. Deze correctie is nul in het zoete deel van de doorsnede. Met andere woorden, het snelheidsveld in de linkerhelft van figuur 1 is direct goed en behoeft in het geheel geen correctie! In het rechter, zoute deel van de doorsnede is deze correctie een constante. Niet alleen maakt hij juist de aan de boven- en onderrand opgelegde snelheden nul, hij veroorzaakt ook de bekende schuifstroom langs het (in dit geval verticale) grensvlak. Het resulterende snelheidsveld is in figuur 2 weergegeven.

De vraag is nu of dit allemaal juist is. We controleren daartoe het resultaat aan de hand van de analytische oplossing voor de snelheid  $v_x = q_x/n$  op het grensvlak in  $x$ -richting (Verruijt, 1980):

$$v_x = \frac{k_x}{n} \left( \frac{\gamma}{\gamma_0} - 1 \right) \frac{1}{\pi} \ln \left( \tan \left( \frac{\pi z}{2H} \right) \right) = \frac{35}{0,35} \left( \frac{1025}{1000} - 1 \right) \frac{1}{\pi} \ln \left( \tan \left( \frac{\pi z}{20} \right) \right)$$

Figuur 3a toont de analytisch berekende snelheid (getrokken lijn) en de met het model berekende snelheid (balletjes). De overeenkomst spreekt voor zich. De schuifstroom (snelheidsverschil direct links en rechts van het grensvlak) is gegeven door De Josselin de Jong (1977):

$$\Delta v_z = \frac{k_z}{n} \left( \frac{\gamma}{\gamma_0} - 1 \right) \sin \alpha = \frac{35}{0,35} \left( \frac{1025}{1000} - 1 \right) \times 1 = 2,5 \text{ m/d}$$

Figuur 3b geeft de met het model berekende schuifstroom (getrokken lijn en balletjes). Het resultaat is net als dat van Van den Akker (1982) en Olsthoorn (1990) zo'n 10% kleiner dan de analytische waarde van 2,5 m/d. Dit is echter alleen het gevolg van de gekozen celbreedte links en rechts van het grensvlak (hier 1 m, zie figuren 1 en 2). Bij een celbreedte van 0,1 m links en rechts van het grensvlak wordt de rechterlijn met balletjes in figuur 3b verkregen. Deze ligt reeds zeer dicht bij de analytische waarde van 2,5 m/d.

Dat de aanpak net zo goed werkt voor ingewikkelder situaties willen we nu aantonen met een wat complexer voorbeeld, waarin de dichtheid niet alleen in horizontale maar ook in verticale zin varieert. Bij dichtheidsvariatie in verticale zin ontstaan er wel brontermen. Uit de differentiaalvergelijking volgt de grootte daarvan, welke we in een rechthoekig celrooster van een eindige elementenmodel zonder omhaal kunnen discretiseren tot een bronterm per cel:

$$q_z = -k_z \frac{\partial \Phi}{\partial z} = -k_z \frac{\partial(\phi - G)}{\partial z} = -k_z \frac{\partial \phi}{\partial z} + k_z \frac{\partial G}{\partial z}$$

Uitgewerkt voor de totale verticale volumestroom van modelcel 1 naar de daarboven gelegen modelcel 2, met elk hun eigen hoogte en doorlatendheid:

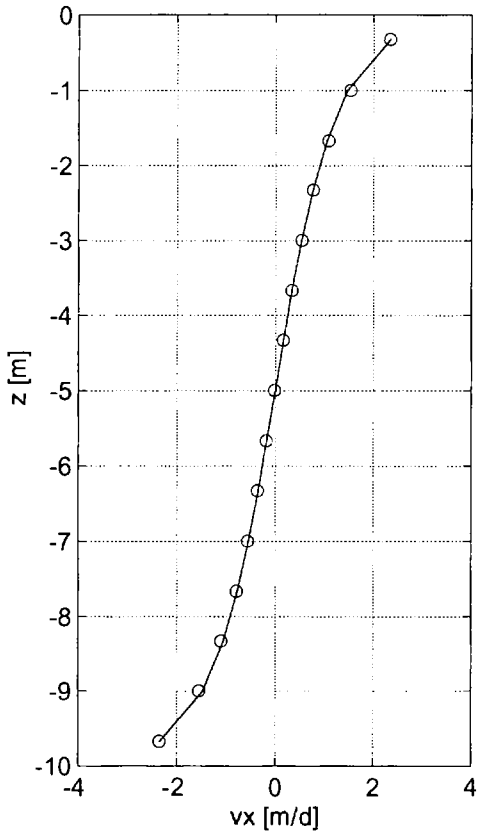
$$Q_{z,1,2} = Cond_{z,1,2}(\phi_1 - \phi_2) - Cond_{z,1,2}(G_1 - G_2)$$

Hierin duiden de indices op de celmiddens, let op,  $z_2$  boven  $z_1$ . De rechterterm is doorgaans positief, aangezien  $G$  met de diepte toeneemt als  $\gamma > \gamma_0$ . De eerste term van het rechterlid is de volumestroom die het zoetwatermodel berekent, de tweede het dichtheidseffect dat achteraf van de berekende zoetwater-volumestroom moet worden afgetrokken om de werkelijke volumestroom te verkrijgen. De conductance  $Cond$  [ $L^2/t$ ] is gelijk aan (zie ook McDonald and Harbaugh, 1988):

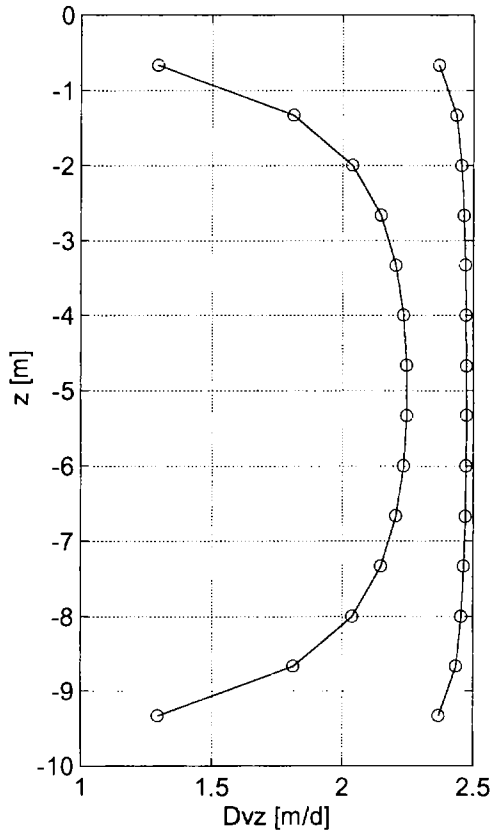
$$Cond_{z,1,2} = \Delta x \Delta y / c_{1,2}$$

met  $c$  [T] de weerstand tussen de celmiddens volgens:

$$c = \frac{\Delta z_1 / 2}{k_{z,1}} + \frac{D}{k_z} + \frac{\Delta z_2 / 2}{k_{z,2}}$$



**Figuur 3a:** Horizontale snelheid op grensvlak,  $x = 14$  m, getrokken lijn: analytisch; balletjes: modelresultaat.

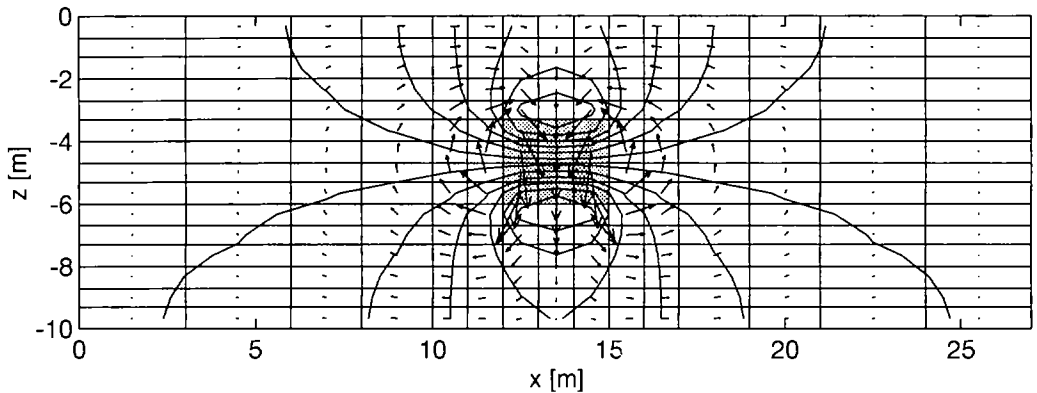


**Figuur 3b:** Schuifstroom op grensvlak,  $v_{z,links} - v_{z,rechts}$ , voor het model van figuren 1 en 2 (linkerlijn) met cellen van 1 m breedte ter weerszijde van grensvlak en voor een model met cellen van 0,1 m breedte links en rechts van het grensvlak (rechterlijn). De analytische oplossing is 2,5 m/d langs heel het grensvlak.

Waarbij de tussenlaag met dikte 'D' al dan niet aanwezig is. Met andere woorden in het zoutwatermodel dient de volumestroom tussen twee boven elkaar gelegen cellen een sprong te maken die gelijk is aan:

$$\Delta Q_{z,1,2} = +Cond_{z,1,2}(G_1 - G_2)$$

Een positieve sprong van de volumestroom in het zoutwatermodel aan het bovenvlak van een cel impliceert een uitstroming, analoog betekent zo'n sprong aan de onderzijde een in-



**Figuur 4:** Stijghoogtecontouren en snelheidsvectoren bij daling van een bel zout water in zoet water (de bel bestaat uit 4 rijen x 3 kolommen cellen met dichtheid  $1025 \text{ kg/m}^3$ ).

stroming. Het verschil is de bronterm die aan de cel moet worden opgelegd om de dichtheid te verrekenen:

$$\Delta Q = \text{Cond}_T (G - G_T) - \text{Cond}_B (G_B - G)$$

waarin de indices B en T de cel boven resp. onder de beschouwde cel (zonder index) aanduiden. Figuur 4 geeft een voorbeeld, in dezelfde omgeving als het eerste voorbeeld, waarin een bel zout water omlaag zakt in een omgeving van zoet water. De verkregen stroming laat de wervels zien waarmee het zoute water initieel omlaag daalt. Het aardige van dit voorbeeld is dat het hele stijghoogtebeeld buiten de bel ook zonder correctie juist is.

## Conclusie

De gevolgde aanpak is niet beperkt tot doorsneden, zoals bij Van den Akker (1982) en Olsthoorn (1990). Een ingewikkelde omzetting van randvoorwaarden van en naar drukken is al evenmin noodzakelijk. Bijzonder praktisch is dat de berekende stijghoogte direct goed is waar zoetwater voorhanden is. Dit is vaak juist het deel van het pakket dat van belang is (waterwinning, ecologie). Het is in dat geval niet nodig om verder aandacht aan het zoute deel van het model te besteden. Het is m.i. een uiterst geschikte manier om grootschalig dichtheid in te brengen in een standaard model.

De correctie van de verticale volumestroom is eenvoudig. Deze beperkt zich tot het bijtellen van een waarde bij de verticale volumestromen die het zoetwatermodel heeft berekend. Nadat dit is gedaan kunnen zonder enige wijziging stroomlijnen worden berekend of deeltjes worden verplaatst met programma's als MODPATH en MT3D.

Voor grootschalig, regionaal gebruik in een model als MODFLOW, waar je geen lagen wilt toevoegen om de dichtheid te verwerken en waar aangrenzende cellen in een laag niet perse op gelijke hoogte hoeven te liggen, dient een wat zorgvuldiger afleiding van de correctie-termen plaats te vinden. Dit wordt gedaan in een afzonderlijk artikel (Olsthoorn, 1996) dat de toepassing beschrijft in een regionaal model van de Amsterdamse Waterleidingduinen. De modellering voor dit voorbeeld is overigens geheel in een spreadsheet gedaan.

## Literatuur

- Akker, C. v.d. (1982)** Numerical Analysis of the Stream Function; Thesis, TU-Delft.
- De Josselin de Jong, G. (1977)** Review of vortex theory for multiple fluid flow; Delft Progress Rept. 2, pag 255–236.
- Eem, J.P. van der (1992)** Rekenen aan de stroming van zoet, brak en zout grondwater; KIWA-mededeling 121, KIWA, Nieuwegein.
- Maas, C. and M.J. Emke (1988)** Solving varying density groundwater problems with a single density computer program; in: De Breuck & Walschot (red), Proc. of the 10th SWIM, Ghent, *Natuurwetensch. Tijdschrift*, jrg 70, pag 143–154.
- McDonald, M.G. en A.W. Harbaugh (1988)** A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model; Chapter A1 USGS Open-File Report 83-875, book 6, modeling techniques, ca 300 pag.
- Olsthoorn, T.N. (1990a en b)** Grondwatermodellering met behulp van een spreadsheet, voorraadvorming bij variabele dichtheid in een heterogene bodem; in: *H<sub>2</sub>O*, jrg 23, nr 23, pag 640–645 en *H<sub>2</sub>O*, jrg 23, nr 24, pag 664–669.
- Olsthoorn, T.N. (1996)** Modellering van de simultane stroming van zoet en zout grondwater met behulp van een normaal eindige-differentiemodel (in voorbereiding).
- Verruijt, A. (1980)** The rotation of a vertical interface in a porous medium; in: *Water Resources Research*, jrg 16, nr 1, pag 239–240.

## Lijst van symbolen

$q_x, q_y$	Darcy-snelheid [L/t]
$v_x, v_y$	Grondwatersnelheid [L/t]
$x, z$	Coördinaten resp. horizontaal en verticaal opwaarts positief [L]
$\gamma$	Soortelijk gewicht vloeistof [F/L <sup>3</sup> ], $\gamma = \rho g$ met $\rho$ dichtheid [M/L <sup>3</sup> ] en $g$ sterkte zwaartekrachtsveld [F/M]
$\gamma_0$	Soortelijk gewicht zoet water [F/L <sup>3</sup> ]
$\mu$	Viscositeit van de vloeistof [Ft/L <sup>2</sup> ]
$\kappa$	Intrinsieke doorlatendheid bodem [L <sup>2</sup> ]
$k$	Doorlatendheid zoet water, $k = \kappa/(\mu \gamma_0)$ [L/t]
$p$	Waterdruk [F/L <sup>2</sup> ]
$\Gamma$	Hydrostatische druk $-\int \gamma dz$ , tussen de grenzen $z = 0$ en $z = z$ [F/L <sup>2</sup> ]
$G$	Hydrostatische zoetwaterstijghoogte $-\int (\gamma/\gamma_0 - 1) dz$ , tussen de grenzen $z = 0$ en $z = z$ , [L]; ook geldt $G = \Gamma/\gamma_0 + z$ [L]
$\phi$	Zoewaterstijghoogte $\phi = p/\gamma_0 + z$ [L]
$\Phi$	Omgevingsstijghoogte $= \phi - G$ [L]
$n$	Porositeit [-]
$H$	Dikte watervoerend pakket [L]
$D$	Dikte scheidende laag [L]
$Cond$	Geleidingsfactor ('Conductance') coor de stroming tussen twee modelcellen [L <sup>2</sup> /t]

Ir. T.N. Olsthoorn  
Gemeentewaterleidingen Amsterdam  
Vogelenzangseweg 21  
2114 BA Vogelenzang  
Tel: (023) 5233569  
Fax: (023) 5281460  
E-mail: t.olsthoorn@gw.amsterdam.nl