
Een eenvoudige methode voor de voorspelling van het concentratieverloop van een conservatieve stof in opgepompt grondwater

ir. C.H. van Immerzeel

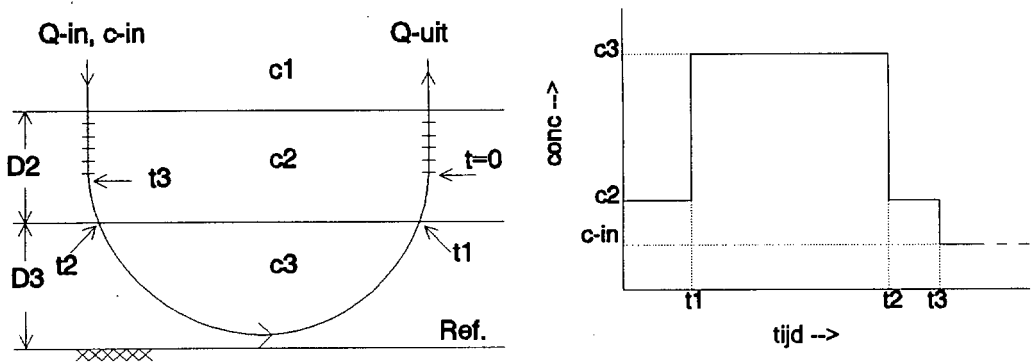
Samenvatting

Voor het voorspellen van het concentratieverloop van een conservatieve stof in opgepompt grondwater wordt vaak uitgegaan van stroombaanberekeningen met numerieke grondwatermodellen. Per stroombaan wordt dan het concentratieverloop in de tijd bepaald. Door het combineren van de gegevens van alle stroombanen ontstaat een voorspelling van het concentratieverloop in het opgepompte grondwater. De bovenstaande methodiek is tijdrovend, met name wanneer het verwerken van de stroombaangegevens handmatig wordt verricht. In dit artikel wordt het programma WELCONA gepresenteerd dat aan bovenstaand bezwaar tegemoet komt. Het programma WELCONA gaat uit van stroombaanberekeningen met een algemeen gebruikt analytisch programma, AQ-AS (RIVM, 1989). De ruimtelijke verdeling van de initiële concentraties in de ondergrond kunnen bij WELCONA nauwkeurig worden ingevoerd. Bovendien kan met WELCONA het effect van dispersie en retardatie op het concentratieverloop worden berekend. De mogelijkheden van het programma WELCONA worden gedemonstreerd aan de hand van twee voorbeelden. Het eerste voorbeeld betreft een toepassing in het kader van de haalbaarheidsstudie 'Diepinfiltratie Lettele' (IWACO, 1995). Het tweede voorbeeld heeft betrekking op een grondwatersanering in Uiterburen (IWACO, 1993). Het laatste voorbeeld geeft aan dat met deze snelle en eenvoudige methode goede resultaten kunnen worden behaald.

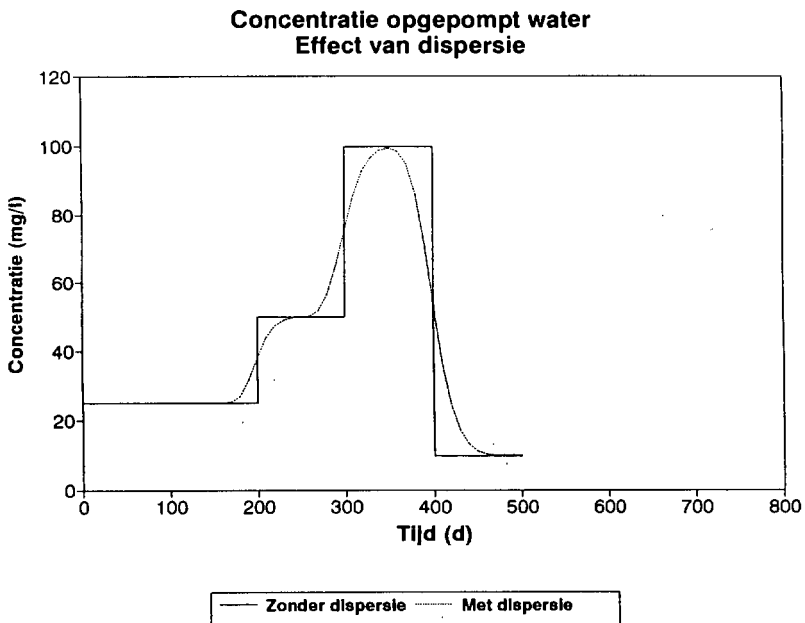
Inleiding

Het voorspellen van het concentratieverloop van een conservatieve stof in opgepompt grondwater is van belang voor zeer verschillende vraagstukken. Bij drinkwaterwinningen speelt bijvoorbeeld soms de verziltingsproblematiek een rol met vragen als: "wat is het maximale onttrekkingsdebiet waarbij het onttrokken water nog aan de norm voor chloride voldoet?" en "hoe lang duurt het voordat de eindconcentratie wordt bereikt?". Het voorspellen van het concentratieverloop van het opgepompte grondwater is ook van belang bij grondwatersaneringen. Hier is vooral het voorspellen van de saneringsduur aan de orde.

Ir. C.H. van Immerzeel is werkzaam bij IWACO B.V. Groningen, Chopinlaan 12, Postbus 8064, 9702 KB Groningen, tel (050) 521 42 45, fax (050) 526 14 53, e-mail KVI@GRONINGEN.IWACO.NL



Figuur 1: Schematische weergave van een stroombaan (links) met het corresponderende concentratieverloop (rechts)



Figuur 2: Concentratieverloop van het opgepompte grondwater op basis van één stroomlijn met en zonder dispersie

Voor de beantwoording van deze vragen wordt doorgaans gebruik gemaakt van numerieke computermodellen. Met deze modellen wordt de grondwaterstroming berekend. Hierna wordt voor één of enkele waterdeeltjes de afgelegde weg (stroombaan) berekend naar de onttrekkingsput. Deze informatie wordt vaak handmatig per stroombaan gecombineerd met aanwezige kennis van de (ruimtelijke) verdeling van de stof in de ondergrond. Door het combineren van de gegevens van alle stroombanen ontstaat een voorspelling van het concentratieverloop in het opgepompte grondwater.

Deze methode is uitstekend geschikt wanneer er voldoende gegevens zijn van de ondergrond (kD-en c-waarden, grondwaterstanden) om het gebruik van een numeriek grondwatermodel te rechtvaardigen. En wanneer met dit model ook stroombanen berekend kunnen worden. En wanneer er niet te veel stroombanen verwerkt hoeven te worden. En wanneer de ruimtelijke verdeling van de stof in de ondergrond niet te gecompliceerd is. Kortom: wanneer er voldoende gegevens zijn en er voldoende tijd en geld beschikbaar is.

Dit is zelden het geval. Daarom is het programma WELCONA gemaakt. Het programma WELCONA gaat uit van een berekening met een algemeen gebruikt, analytisch programma AQ-AS (RIVM, 1989). Met dit programma kunnen een groot aantal stroombanen worden berekend vanuit een groot aantal putten. Het programma WELCONA berekent mede op basis van deze stroombanen het concentratieverloop van de stof in het opgepompte grondwater. De ruimtelijke verdeling van de stof in de ondergrond bij aanvang van de onttrekking kan hiertoe gedetailleerd worden ingevoerd. Het programma WELCONA berekent het concentratieverloop van de stof in het opgepompte grondwater, niet alleen van iedere individuele put maar ook van alle onttrekkingsputten samen. Wanneer er infiltratieputten in het model zijn opgenomen, wordt tevens rekening gehouden met de concentratie van de stof in het infiltratiewater. Als optie kan met het programma WELCONA de invloed van dispersie en retardatie op het concentratieverloop worden berekend. Dit is vooral van belang bij grondwatersaneringen. Daarnaast geeft het programma WELCONA de verblijftijdsverdeling van het opgepompte water per put en voor alle onttrekkingsputten samen.

De mogelijkheden van het programma WELCONA worden hieronder gedemonstreerd aan de hand van twee voorbeelden. Het eerste voorbeeld betreft een toepassing in het kader van de haalbaarheidsstudie 'Diepinfiltratie Lettele' (IWACO, 1995). Het tweede voorbeeld heeft betrekking op een grondwatersanering in Uiterburen (IWACO, 1993). Maar eerst wordt het principe van het programma nader toegelicht.

Het principe (1): convectief transport

Als alleen convectief (meevoerend) transport wordt beschouwd en geen dispersief (spreidend) transport, dan kan het concentratieverloop van een conservatieve stof in het opgepompte water eenvoudig worden bepaald uit de berekende stroombanen en de initiële concentratieverdeling in de ondergrond. Voor één stroombaan en een horizontale gelaagdheid van de concentraties in de ondergrond wordt dit geïllustreerd in figuur 1.

In het voorbeeld is in de ondergrond sprake van drie concentraties: c_1 , c_2 en c_3 . De lagen met een concentratie c_2 en c_3 hebben een dikte van D_2 resp. D_3 [L]. De dikte van de bovenste laag (D_1) is niet van belang omdat aangenomen wordt dat boven het niveau (D_2+D_3) ten opzichte van de referentiehoogte de concentratie c_1 [M/L^3] is. Van tijdstip $t = 0$ tot $t = t_1$ wordt water met een concentratie c_2 opgepompt. Van $t = t_1$ tot $t = t_2$ wordt water met een concentratie c_3 opgepompt. Van $t = t_2$ tot $t = t_3$ is de concentratie c_2 . Vanaf tijdstip $t = t_3$ is de con-

concentratie van het opgepompte water gelijk aan dat van het infiltratiewater (c_{in}). Door op deze wijze de gegevens van meerdere stroombanen te combineren wordt het concentratieverloop van het opgepompte water verkregen.

Het principe (2): dispersie

Bij stroming van grondwater in een watervoerend pakket raken verontreinigde waterdeeltjes steeds verder van elkaar verwijderd door snelheidsverschillen en hoekverdraaiingen. Dit verschijnsel wordt dispersie genoemd. Door dispersie worden concentratiesprongen op een stroombaan (figuur 1) minder abrupt.

Naast dispersie in de richting van de stroombaan (longitudinale dispersie) wordt er dispersie loodrecht op de stroombaan (transversale dispersie) onderscheiden. Aan transversale dispersie wordt hier geen aandacht besteed.

De gangbare manier waarop dispersie modelmatig wordt beschreven (namelijk met behulp van de convectie–dispersie-vergelijking) heeft een aantal nadelen (Wipfler e.a., 1996). Zo is het niet mogelijk uitsluitend te geven over de begrenzing van de verontreiniging. De mathematische oplossing levert namelijk geen eindige begrenzing op van de verontreiniging. Fysisch betekent dit dat er deeltjes in het front van de vervuilingpluim zouden zijn die in een uiterst korte tijd een oneindig grote afstand afleggen. Dit is niet realistisch.

Recent is een nieuwe manier beschikbaar gekomen voor de modellering van dispersie (Wipfler e.a., 1996). De nieuwe berekeningsmethode wordt ook in het programma WELCONA gebruikt. De nieuwe berekeningsmethode van de dispersie levert, in tegenstelling tot de gangbare methode, een duidelijke begrenzing van de vervuiling op. Daarnaast wordt de dispersie in de nieuwe methode beschreven op basis van algemeen gedefinieerde bodemparameters. De methode is hierdoor consistent van opbouw dan de gangbare methode.

Voor de beschrijving van de dispersie zijn in het nieuwe model slechts twee parameters nodig. De eerste parameter (de dispersiviteit (L)) wordt ook gebruikt in de gangbare methode. De dispersiviteit is een maat voor de spreiding van de verontreiniging. De dispersiviteit is afhankelijk van de samenstelling van de bodemlagen (fijn, grof). Elke bodemlaag kent dan ook in principe een andere waarde van de dispersiviteit. Omdat het in de praktijk moeilijk is deze verschillende waarden te bepalen, wordt in het programma WELCONA met één waarde voor de dispersiviteit gewerkt. Deze waarde is van toepassing voor de hele ondergrond en kan in eerste instantie worden geschat op basis van literatuurgegevens. Op basis van een gemeten concentratieverloop kan de waarde van de dispersiviteit eventueel worden bijgesteld.

De tweede parameter voor de beschrijving van de dispersie met behulp van de nieuwe methode is nieuw. Het betreft de verhouding v_f/v_g tussen de snelheid van de waterdeeltjes aan het front (v_f , (L/T)) en de gemiddelde snelheid van de waterdeeltjes (v_g , (L/T)). De verhouding v_f/v_g is gelijk aan de verhouding k_f/k_g : de maximale doorlatendheid (k_f , (L/T)) en de effectieve gemiddelde doorlatendheid (k_g , (L/T)). De waarde van v_f/v_g kan in het veld worden afgeleid uit de aankomsttijd van het verontreinigingsfront.

Voor de berekening van het concentratieverloop met de nieuwe methode is de gemiddelde snelheid van de deeltjes nodig (v_g , (L/T)). In het programma WELCONA wordt deze snelheid voor iedere concentratiesprong op een stroombaan berekend als het quotiënt van

de afgelegde weg en de reistijd. Beide gegevens kunnen direct worden afgeleid uit de uitvoer van het programma AQ-AS.

Het effect van dispersie op het concentratieverloop wordt schematisch weergegeven in figuur 2. In figuur 2 is te zien hoe door dispersie, zoals verwacht, concentratiesprongen op de stroombaan worden afgevlakt. Het oppervlak onder de curven in figuur 2 stelt de hoeveelheid van de verontreinigende stof voor die is opgepompt (de 'vracht'). Dit oppervlak is met en zonder dispersie gelijk: dispersie beïnvloedt slechts het concentratieverloop in de tijd maar niet de totale hoeveelheid verontreinigende stof die wordt opgepompt.

Het principe (3): retardatie

Het verschijnsel retardatie wordt veroorzaakt door adsorptie (hechting) van een deel van de opgeloste stof aan het bodemmateriaal. De zogenaamde adsorptie isotherm beschrijft (bij een bepaalde temperatuur) de relatie tussen de hoeveelheid geadsorbeerde stof (F , (M/L^3)) en de hoeveelheid stof in oplossing (c , (M/L^3)).

De eenvoudigste vorm van de adsorptie-isotherm is lineair, dat wil zeggen dat er een vaste verhouding bestaat tussen de hoeveelheid geadsorbeerde stof (F) en de hoeveelheid stof in oplossing (c). Deze zogenaamde lineaire evenwichts-adsorptie-isotherm kan worden gebruikt als de adsorptie bij benadering instantaan plaatsvindt, omkeerbaar en lineair is.

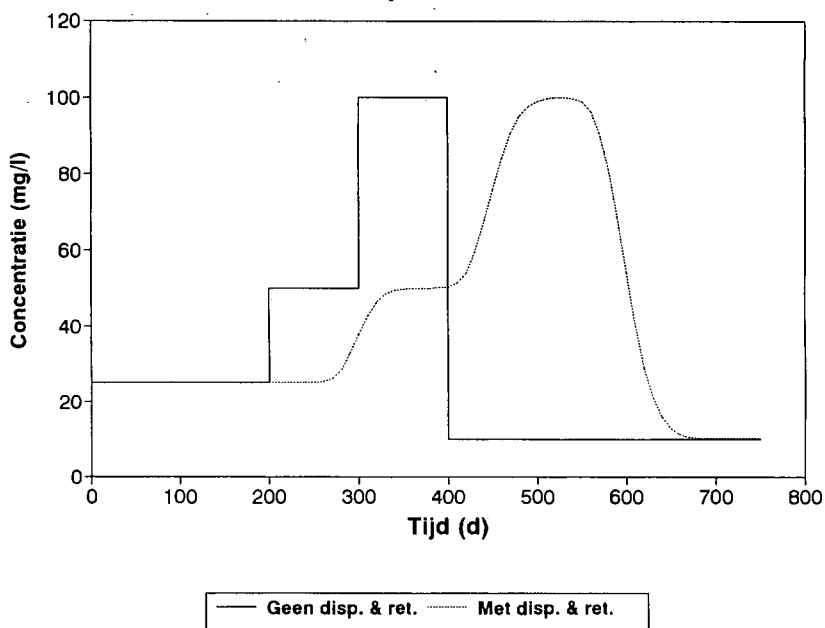
Als adsorptie beschreven kan worden met een lineaire evenwichts-adsorptie-isotherm, dan leidt dit tot vertraging in de voortbeweging van de opgeloste stof ten opzichte van het meevoerende grondwater. Dit komt omdat een deel van de opgeloste stof wordt geadsorbeerd in plaats van meegevoerd met het water. Dit deel van de stof komt pas later, als er weer schoon water langs stroomt, opnieuw in oplossing. Bij retardatie wordt uitgegaan van een vaste concentratie in de oplossing. Bij een gelijke hoeveelheid stof is de concentratie ervan in het grondwater kleiner mét retardatie dan zonder retardatie omdat een deel van de stof is geadsorbeerd.

De vertraging in de voortbeweging van de opgeloste stof ten opzichte van het meevoerende grondwater (retardatie) is gelijk aan de verhouding: (totale hoeveelheid stof) / (opgeloste hoeveelheid stof). Deze verhouding wordt de retardatie R genoemd. De retardatie is dus altijd ≥ 1 . Als de snelheid van de waterdeeltjes v (L/T) is en die van de verontreiniging v' (L/T) dan geldt: $v' = v / R$.

Evenals de snelheid van de waterdeeltjes dient voor de beschrijving van de situatie met dispersie én retardatie de dispersiviteit te worden gedeeld door de retardatiefactor (Bear en Verruijt, 1987).

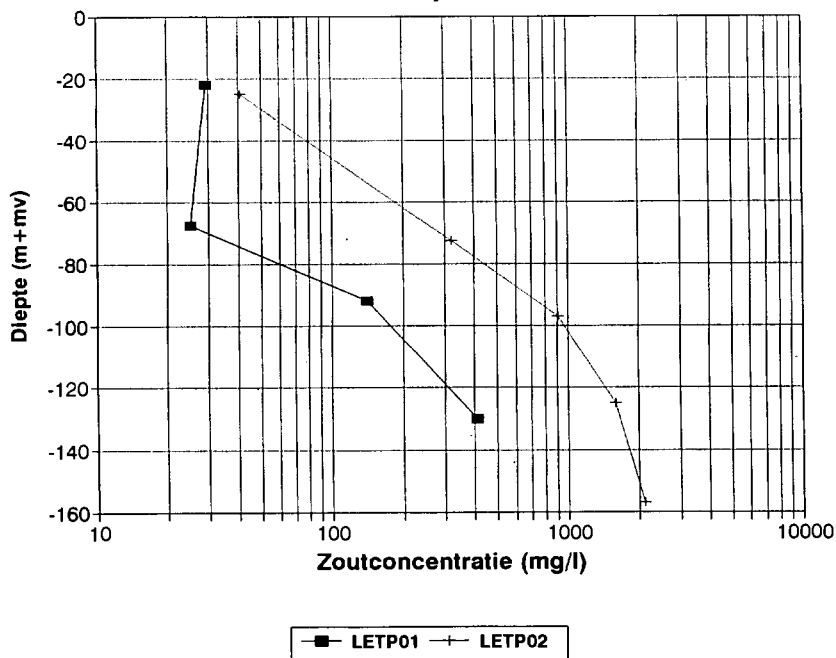
Het effect van dispersie én retardatie op het concentratieverloop wordt geïllustreerd in figuur 3. Figuur 3 laat zien hoe door dispersie concentratiesprongen op de stroombaan worden afgevlakt, terwijl door retardatie er een vertraging optreedt in het concentratieverloop van het opgepompte water. Tevens blijkt uit figuur 3 dat het oppervlak onder de curve met dispersie en retardatie groter is dan het vergelijkbare oppervlak onder de niet vervormde curve. Als adsorptie een rol speelt, zit er namelijk bij eenzelfde concentratie in het grondwater meer stof (verontreiniging) in het systeem dan wanneer dit niet het geval is. De verontreiniging is dan niet alleen opgelost in het water maar is ook geadsorbeerd aan de grond. Het feit dat het oppervlak onder de curve in figuur 3 groter is dan in figuur 2 betekent dus niet dat door retardatie (adsorptie) een groter deel van de aanwezige verontreini-

Concentratie opgepompt water Effect van dispersie en retardatie



Figuur 3: Effect van dispersie en retardatie op het concentratieverloop van het opgepompte grondwater

Zoutconcentratie profielen Lettele



Figuur 4: Gemeten zoutconcentratie profielen Lettele

ging opgepompt wordt; de totale hoeveelheid verontreinigende stof in de bodem is alleen groter.

Voorbeeld 1: 'Diepinfiltratie Lettele'

Als voorbeeld voor de toepassing van het programma WELCONA wordt de haalbaarheidstudie 'Diepinfiltratie Lettele' gebruikt (IWACO, 1995). De volgende vraag stond in deze studie centraal:

wat is het verloop van de zoutconcentratie in het opgepompte water na aanvang van de winning?

Om de uitgangssituatie van het zoutgehalte bij aanvang van de winning vast te leggen, is op twee lokaties (LETP01 en LETP02) het zoutgehalte in de ondergrond bepaald (figuur 4).

Uit figuur 4 blijkt dat er tussen de twee profielen een aanzienlijk verschil bestaat. Op basis hiervan is het nauwelijks mogelijk een betrouwbare uitgangssituatie te formuleren.

De profielen zijn ten behoeve van de concentratie-berekeningen geschematiseerd tot drie lagen. In iedere laag is het zoutgehalte constant verondersteld. Op basis van de resultaten van de stroombaanberekeningen en de geschematiseerde zoutconcentratie-profielen is met het programma WELCONA het concentratieverloop berekend volgens het in figuur 1 weergegeven principe. Bij de berekeningen is uitgegaan van een zoutconcentratie in het infiltratiewater (oeverfiltraat) van 100 mg/l.

Er zijn twee berekeningen gemaakt: één op basis van zoutconcentratie profiel LETP01 en één op basis van zoutconcentratie profiel LETP02. De berekeningsresultaten zijn weergegeven in figuur 5. Uit figuur 5 blijkt dat de berekende concentraties op basis van concentratieprofiel LETP01 beneden de norm voor drinkwater (150 mg/l) blijven. De berekende concentraties op basis van concentratieprofiel LETP02 daarentegen zijn lange tijd (meer dan 2000 dagen) boven de norm.

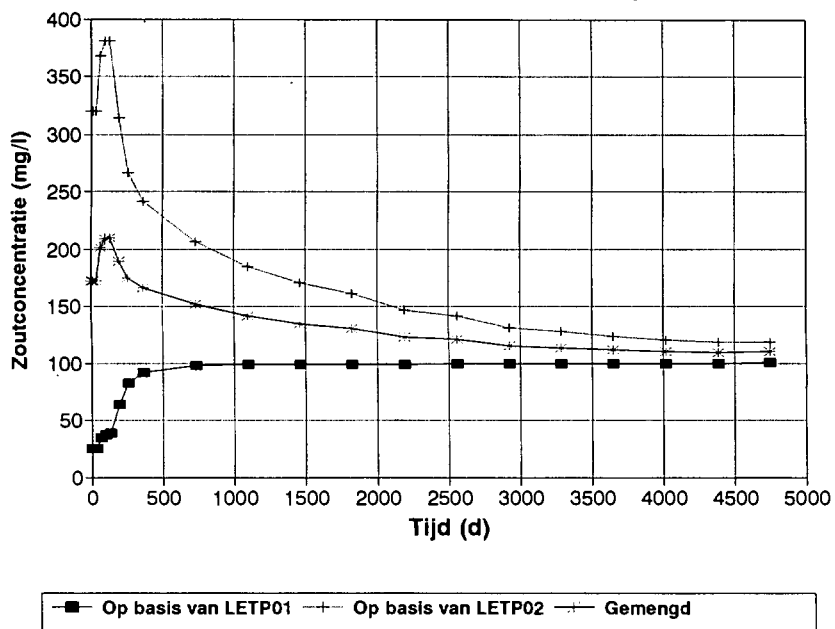
Mede op basis van deze uitkomsten is de lokatie Lettele minder geschikt bevonden voor diepinfiltratie.

Voorbeeld 2: 'Sanering K.O. Vessel-terrein Uiterburen'

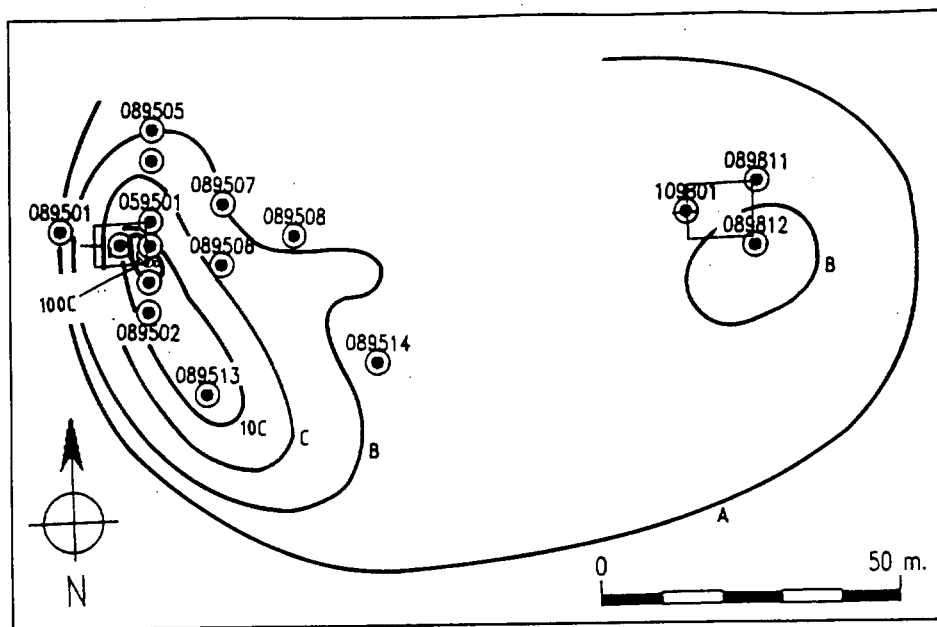
Als voorbeeld voor de toepassing van het programma WELCONA bij een grondwatersanering wordt hier de sanering van het K.O. Vessel-terrein in Uiterburen gebruikt (IWACO, 1993). De verontreinigingssituatie wordt weergegeven in de figuren 6 (1,5–2,5 m –mv) en 7 (6,0–7,0 m –mv).

In de figuren 6 en 7 zijn, op basis van een 24-tal analyseresultaten de A-, B- en C-contouren getekend van de aanwezige BTEX-verontreiniging. Omdat de verontreiniging voor meer dan 95% bestaat uit benzeen, zijn de A-, B- en C-waarden gehanteerd voor benzeen. De A-contour komt overeen met 0,2 µg/l; de B-contour met 1,0 µg/l en de C-contour met 5,0 µg/l. Uit de figuren 6 en 7 blijkt dat het gaat om een zware verontreinigingssituatie met concentraties BTEX van 10 tot zelfs meer dan 100 maal de C-waarde.

**Zoutconcentratie opgepompt water
Oeverfiltr. (100 mg/l); Q=10 Mm³/jr**



Figuur 5: Berekend zoutconcentratie-verloop



Figuur 6: Verontreinigingssituatie BTEX in het grondwater op 1,5-2,5 m -mv

Ook deze contouren zijn in de figuren 6 en 7 opgenomen.

De ondergrond bestaat tot ca. 1,7 m –mv uit klei en veen van de Westland-Formatie. Hieronder bevindt zich tot de hydrologische basis een laag fijn zand van de Formatie van Twente. De hydrologische basis wordt gevormd door een ca. 50 meter dikke laag Potklei op ca. 8 m –mv. De verontreiniging reikt niet dieper dan dit niveau. In het gebied heerst een infiltratiesituatie. De regionale stromingsrichting is zuidoostelijk, maar de invloed ervan is verwaarloosbaar.

Het terrein is gesaneerd door de meest verontreinigde grond tot ca. 2 m –mv af te graven. Daarna is het verontreinigde grondwater gesaneerd door het te onttrekken en te zuiveren. De onttrekking heeft plaatsgevonden door middel van twee pompputten nabij de peilbuizen 059501 en 089513. Het onttrekkingsdebiet bedroeg resp. 36 m³/d en 10 m³/d.

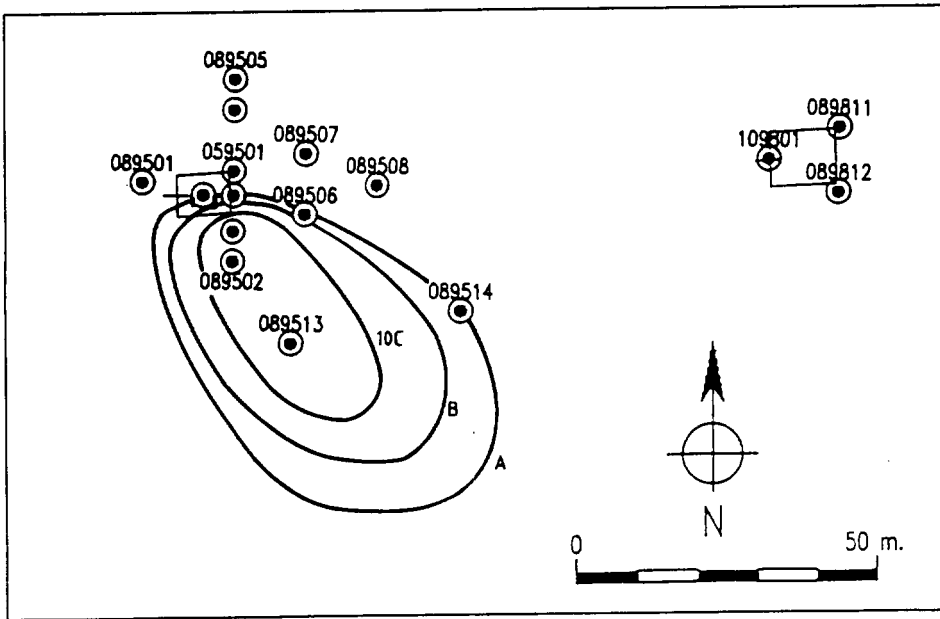
Voor de grondwatermodellering met het programma AQ-AS is de ondergrond geschematiseerd tot één watervoerend pakket ($kD = 35 \text{ m}^2/\text{d}$) met een deklaag ($c = 400 \text{ d}$).

Met het programma AQ-AS zijn op basis van deze schematisatie 160 stroombanen berekend: per putfilter op 10 hoogtes 8 stroombanen. Ten behoeve van de berekening van het programma WELCONA is de verontreinigingssituatie (figuren 6 en 7) geschematiseerd. De A-, B- en C-contouren zijn daarbij als polygonen in WELCONA ingevoerd. Bij elke polygoon is een beginconcentratie opgegeven.

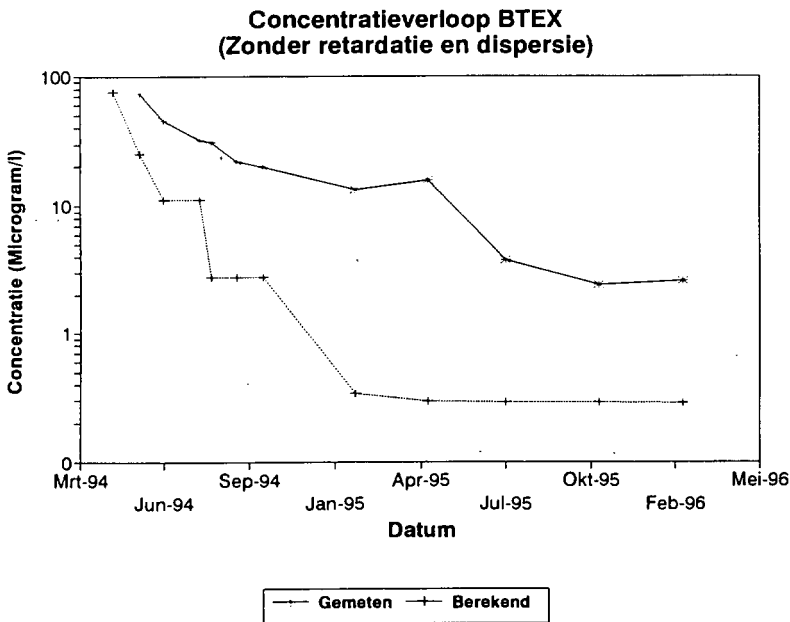
Op basis hiervan is met WELCONA het BTEX concentratieverloop berekend als geen rekening wordt gehouden met retardatie en dispersie (figuur 8). Ten behoeve van het overzicht zijn in figuur 8 de debiet-gewogen concentraties van beide onttrekkingsputten weergegeven. Uit figuur 8 blijkt dat het berekende BTEX-concentratieverloop sterk afwijkt van het gemeten verloop: de berekende concentraties nemen te snel af.

Wanneer echter rekening wordt gehouden met retardatie, dan wordt een goede overeenkomst gevonden tussen het berekende en het gemeten BTEX concentratieverloop (figuur 9). De retardatiefactor werd hierbij gekalibreerd op 4, hetgeen duidt op een organisch stofgehalte (foc) van de ondergrond van 0,001 tot 0,01 (RIVM, 1990). Een foc-waarde van 0,001 is representatief voor een organisch-stofarme ondergrond terwijl een foc-waarde van 0,01 representatief is voor een ondergrond met relatief veel organisch stof. Helaas zijn er geen metingen beschikbaar met betrekking tot het organisch stofgehalte van de ondergrond om dit te verifiëren. Wanneer echter de opbouw van de ondergrond in aanmerking wordt genomen (1,7 meter klei en veen op 6,3 meter fijn zand), dan lijkt de (op indirecte wijze) gevonden range van het organisch stofgehalte niet onwaarschijnlijk. De gevonden retardatiefactor (4) is daarom niet in tegenspraak met de (beperkte) gegevens van de ondergrond.

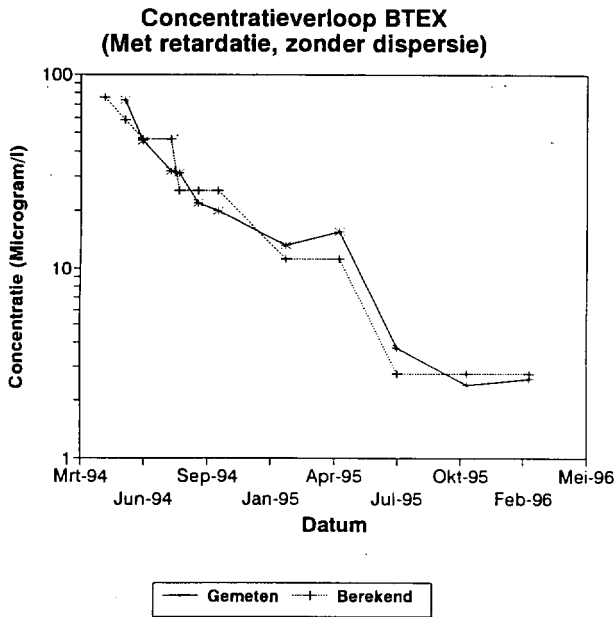
Wanneer bij de berekeningen met WELCONA tevens rekening wordt gehouden met dispersie dan ontstaat een curve die in het laatste deel van het concentratie-traject nog iets meer overeenkomsten vertoont met de meetwaarden (figuur 10).



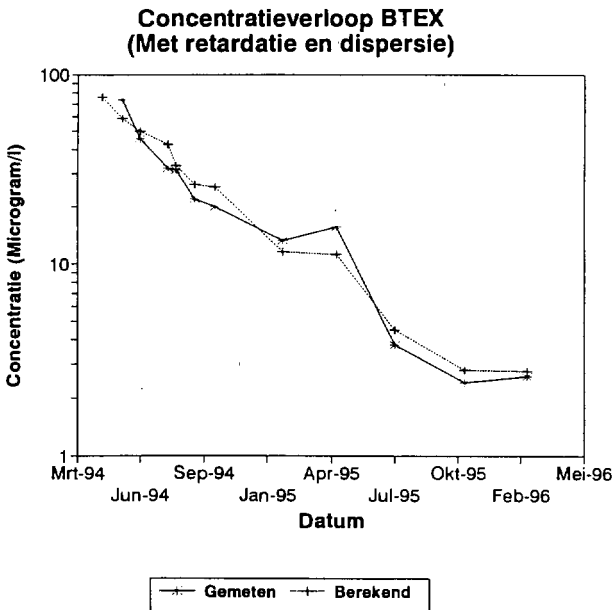
Figuur 7: Verontreinigingssituatie BTEX in het grondwater op 6,0-7,0 m-mv



Figuur 8: Gemeten en berekend concentratieverloop van BTEX in het opgepompte grondwater (geen retardatie en dispersie).



Figuur 9: Gemeten en berekend concentratieverloop van BTEX in het opgepompte grondwater (met retardatie, geen dispersie)



Figuur 10: Gemeten en berekend concentratieverloop van BTEX in het opgepompte grondwater (met retardatie en dispersie)

De 'fit' is echter niet veel verbeterd in vergelijking met de berekening zonder dispersie (figuur 9). Dit duidt erop dat het effect van dispersie op het concentratieverloop in dit geval beperkt is.

Op basis van deze resultaten is geconcludeerd dat de gepresenteerde methodiek voor de voorspelling van de BTEX concentratie in het opgepompte grondwater goed voldoet. Uit de resultaten blijkt dat adsorptie een belangrijke rol kan spelen. Daarom is het, voor het doen van een juiste voorspelling, belangrijk dat de retardatiefactor juist wordt ingeschat. Zoals reeds opgemerkt hangt de retardatiefactor sterk af van het organisch stofgehalte (foc). De juiste bepaling van dit gehalte is daarom voor het doen van een voorspelling van de BTEX concentratie in het opgepompte grondwater van groot belang.

Conclusies

Het programma WELCONA gaat uit van een stroombaanberekening met een algemeen gebruikt, analytisch programma (AQ-AS). De stroombanen worden door het programma WELCONA verwerkt tot een concentratieverloop van het opgepompte water. De ruimtelijke verdeling van de initiële concentraties in de ondergrond kunnen bij WELCONA nauwkeurig worden ingevoerd, terwijl gerekend kan worden met een groot aantal stroombanen. Daarnaast kan het effect van dispersie en retardatie op het concentratieverloop worden berekend. Het voorbeeld van de grondwatersanering in Uiterburen (IWACO, 1993) geeft aan dat met deze snelle en eenvoudige methode goede resultaten kunnen worden behaald, mits de invloed van adsorptie goed ingeschat kan worden.

Literatuur

- Bear, J. en A. Verruijt (1987)** Modeling groundwater flow and pollution; D. Reidel Publishing Company, Dordrecht.
- IWACO B.V. (1993)** Sanering K.O. Vessel-terrein Uiterburen; IWACO-projectnr. 22.1500.0.
- IWACO B.V. (1995)** Haalbaarheid van het project Diepinfiltratie Lettele; IWACO-projectnummer 22.2819.0.
- RIVM (1989)** AQ-AS Computer Program Package for Groundwater Pathlines and Isochrones (Analytical Solutions).
- RIVM (1990)** Verspreiding van stoffen bij bodemverontreiniging; Rapportnr. 725201002.
- Wipfler, L., E. Veling en K. Maas (1996)** Een nieuw transportmodel voor verontreiniging in het grondwater; in: *Stromingen*, jrg 2, nr 1, pag 13-25.