

R. Hendriks

ICW nota 1880

juni 1988



nota

instituut voor cultuurtechniek en waterhuishouding, wageningen

ALTERRA
Wageningen Universiteit & Research center
Omgevingswetenschappen
Centrum Water & Klimaat
Team Integraal Waterbeheer

GRONDWATERKWALITEIT IN RELATIE TOT GRONDWATERSTROMING

PHLO-cursus Waterkwaliteit Landelijke Gebieden

dr. J. Hoeks

Nota's (Notes) of the Institute are a means of internal communication and not a publication. As such their contents vary strongly, from a simple presentation of data to a discussion of preliminary research results with tentative conclusions. Some notes are confidential and not available to third parties if indicated as such

1/10/1911
The following is a list of the names of the
persons who were present at the
meeting of the Board of Directors
of the City of New York, held on
the 10th day of January, 1911.

I N H O U D

	blz.
1. INLEIDING	1
2. TRANSPORT VAN GRONDWATER	3
2.1. Stroomlijnen en verblijftijd	3
2.2. Beschrijving van de grondwaterstroming	4
2.3. Toepassingen	8
3. TRANSPORT VAN OPGELOSTE STOFFEN	11
3.1. Effect van interactieprocessen	11
3.2. De stoffenbalans	13
3.3. Dispersie	14
3.4. Adsorptie en afbraak	16
3.5. Chemische en biochemische reacties	20
4. KOPPELING VAN GRONDWATERSTROMING EN STOFTRANSPORT	22
4.1. Algemene aspecten van grondwaterkwaliteitsmodellering	22
4.2. Voorbeeld van een eenvoudig grondwaterkwaliteitsmodel	22
4.3. Ontwikkeling van complexe grondwaterkwaliteitsmodellen	24
5. VOORBEELDEN VAN TOEPASSING VAN GRONDWATERKWALITEITSMODELLEN	27
5.1. Grondwaterverontreiniging bij een afvalstortplaats	27
5.2. Vaststelling beschermingszones rond beekdalen	29
5.3. Berekening van intrekgebieden rond pompstations	30
5.4. Hydrologische isolatie bij bodemsanering	30
5.5. Concentratieverloop in het grondwater	32
6. CONCLUSIES	35
7. LITERATUUR	37

1. The first part of the document is a list of names and addresses of the members of the committee. The names are listed in alphabetical order, and the addresses are listed below each name. The list includes names such as Mr. J. H. Smith, Mr. W. B. Jones, and Mr. C. D. Brown, among others.

1. INLEIDING

De kwaliteit van grondwater is afhankelijk van een complex van factoren, die kort samengevat betrekking hebben op de aan- en afvoer van opgeloste stoffen, het transport van deze stoffen in het bodemsysteem en de interacties met de vaste bodemdeeltjes.

De toevoer van stoffen naar het grondwater is afhankelijk van de atmosferische depositie en de belasting tengevolge van menselijke activiteiten op het bodemoppervlak. Agrarische activiteiten kunnen leiden tot uitspoeling van meststoffen en bestrijdingsmiddelen. Ze vinden doorgaans plaats op grote oppervlakten met gevolg dat de belasting een diffuus karakter heeft. Niet-agrarische activiteiten zijn daarentegen veelal beperkt tot relatief kleine terreinen. De belasting is daardoor alleen lokaal van belang. De aard van de uitgespoelde stoffen kan per activiteit sterk verschillen. Voorbeelden van niet-agrarische vervuilingsbronnen zijn: vuilstortplaatsen, bergingsbassins en vloeivelden voor opslag en behandeling van afvalwater, verkeerswegen, industrieën, garages en benzinstations, lekkende opslagtanks en transportleidingen voor olie of gas, en andere.

In het bodemsysteem kunnen de verontreinigende stoffen zich verplaatsen via de gasfase (in gas- of dampvorm) of via de waterfase (in opgeloste vorm). Het transport via het grondwater wordt in de eerste plaats bepaald door de richting en snelheid van de grondwaterstroming, die samenhangt met de geohydrologische gesteldheid van het gebied. De concentraties in het grondwater worden echter niet alleen bepaald door de belasting en de grondwaterstroming. Ook de interactieprocessen in de bodem, waartoe gerekend kunnen worden adsorptie, afbraak en chemische evenwichtsreacties, oefenen een belangrijk concentratieregulerend effect uit.

Bij het verlenen van vergunningen voor activiteiten, die op de bodem plaatsvinden, zal steeds meer rekening worden gehouden met de milieuhygiënische consequenties. Door de invoering van de Wet op de Milieu-Effect-Rapportage is het beschrijven van de milieu-effecten momenteel

voor vele activiteiten verplicht geworden. Het is daarvoor noodzakelijk te beschikken over technieken waarmee de milieu-effecten van dergelijke activiteiten kunnen worden voorspeld.

De ontwikkeling van grondwaterkwaliteitsmodellen, waarmee de verspreiding van opgeloste stoffen in het grondwater wordt beschreven, heeft daardoor de laatste jaren een grote vlucht genomen. In relatief korte tijd is een groot aantal modellen ontwikkeld, uiteenlopend van zeer eenvoudig tot zeer complex. In vele modellen zijn de interactieprocessen betrekkelijk eenvoudig geformuleerd en betreffen dan in hoofdzaak transport van slechts één component met lineaire adsorptie en eerste-orde afbraak. In andere modellen zijn ook de meer complexe processen als chemische evenwichtsreacties (oplossen, neerslaan, complexering) en ionenomswisseling gemodelleerd. In deze modellen wordt daarom gelijktijdig het transport van meerdere componenten beschouwd.

Afhankelijk van het beschouwde probleem worden meer of minder chemische reacties in het model meegenomen.

De belangrijkste uitgangspunten bij het modelleren van het transport van opgeloste stoffen in het grondwater zullen hier worden besproken en toegelicht aan de hand van een sterk vereenvoudigde benadering. Tevens worden enkele voorbeelden gegeven van het gebruik van modelberekeningen voor het vaststellen van effecten in het kader van bodemverontreiniging, bodemsanering en bodembescherming.

2. TRANSPORT VAN GRONDWATER

2.1. Stroomlijnen en verblijftijd

Ten behoeve van de landbouw en de grondwateronttrekking voor de drinkwatervoorziening is in het verleden reeds veel aandacht besteed aan de stroming van water via de bodem en de diepere ondergrond. Er bestaan dan ook vele grondwatermodellen in de vorm van analytische oplossingen en numerieke computermodellen. In het merendeel van de grondwatermodellen worden voornamelijk berekeningen uitgevoerd met betrekking tot grondwaterstanden, intensiteit van kwel of wegzijging, oppervlakteafvoeren, afvoeren naar sloten of beken en de vochtinhouding van de onverzadigde zone. In de meeste gevallen wordt echter geen aandacht besteed aan de weg die het water aflegt. Voor de beschrijving van het transport van opgeloste stoffen in het grondwater zijn echter juist de stroombaan waarlangs het transport plaatsvindt en de reistijd van het water van groot belang. Dit betekent dat de meeste grondwatermodellen aangepast moeten worden, alvorens ze geschikt zijn voor de berekening van het transport van opgeloste stoffen in het grondwater.

Opgeloste stoffen, die met het infiltrerende water in het grondwater terechtkomen, worden met de grondwaterstroming meegevoerd volgens bepaalde stroomlijnen (fig. 1). De loop van deze stroomlijnen hangt samen met de geohydrologische situatie, waarbij met name de aanwezigheid van afsluitende lagen, de dikte van watervoerende pakketten en de doorlatendheid van deze pakketten belangrijk zijn.

Vooraf van belang is de infiltratie en afvoer van water in een watervoerende laag. Zo kan de loop van de stroomlijnen veranderen door winning van grondwater. Het opvoeren van de winning heeft bijvoorbeeld tot gevolg dat het intrekgebied groter wordt, waardoor mogelijk gebieden met een intensief bodemgebruik binnen het intrekgebied komen te liggen. Dit kan leiden tot verslechtering van de kwaliteit van het opgepompte water (VAN DUIVENBOODEN, 1980).

De voeding van het watervoerende pakket kan ook veranderen als gevolg van landinrichtingsmaatregelen. Zo zal het graven van nieuwe waterlopen en het verbeteren van de ontwatering door aanleg van buis-

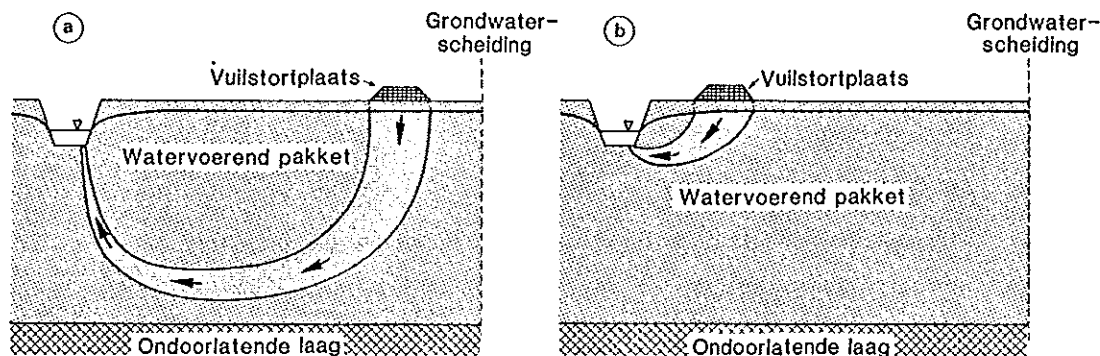


Fig. 1. Verloop van de door een vuilstortplaats verontreinigde stroombaan in het watervoerende pakket in relatie met de ligging ten opzichte van de waterscheiding (naar HOEKS, 1976)

drainage betekenen dat de wegzijging van overtollige neerslag naar het watervoerende pakket afneemt, waardoor benedenstrooms de loop van de stroombanen verandert en de kwelintensiteit in laaggelegen gebieden afneemt. Plaatselijk kan de kweldruk zover afnemen dat wegzijging gaat optreden. Met name in natuurgebieden kan dit leiden tot het verdwijnen van plantesoorten en een achteruitgang in ecologische waarde van het gebied. Dit is niet alleen het gevolg van een verminderde watertoevoer naar het gebied maar ook van de veranderende waterkwaliteit in de wortelzone. Het calciumhoudende kwelwater wordt hier namelijk verdrongen omdat de infiltratie van relatief zuur regenwater toeneemt.

2.2. Beschrijving van de grondwaterstroming

Aangezien het grondwater de "drager" is van de opgeloste stoffen, is een beschrijving van de grondwaterstroming een eerste vereiste voor berekeningen omtrent het transport van opgeloste stoffen. Voor sterk geschematiseerde omstandigheden is de loop van stroomlijnen in het grondwater te beschrijven met tamelijk eenvoudige formules. Zodra men rekening wenst te houden met heterogeniteit en anisotropie binnen de te onderscheiden bodemlagen wordt de beschrijving al snel gecompliceerd

en zal men veelal over moeten gaan tot computerberekeningen met behulp van numerieke modellen. Om de ruimtelijke variabiliteit in het veld, zoals deze bijvoorbeeld bestaat met betrekking tot doorlatendheden, in rekening te brengen wordt ook wel met stochastische modellen gerekend. De in te voeren parameters hebben dan een zekere spreiding, welke wordt uitgedrukt in een verwachtingswaarde en een variantie. De output van dergelijke modellen wordt dan eveneens opgegeven als een verwachtingswaarde met een betrouwbaarheidsinterval. Overigens moet dan de heterogeniteit onder veldomstandigheden bekend zijn. Meestal vergt dit zeer uitvoerig veldonderzoek omdat de benodigde gegevens vaak niet voorhanden zijn.

Als slechts een beperkt aantal gegevens over de geohydrologische situatie beschikbaar is, dan kan men proberen de situatie te schematiseren. Dit leidt tot relatief eenvoudige oplossingen, die uiteraard geen exacte beschrijving maar over het algemeen wel een redelijke eerste schatting geven van de grondwaterstroming. Een voorbeeld van een dergelijke vereenvoudiging wordt in het volgende nader uitgewerkt. Globaal gesproken is de bodem opgebouwd uit slecht doorlatende waterscheidende lagen en goed doorlatende watervoerende lagen. De stroming van water in slecht doorlatende (slibhoudende of venige) lagen vindt overwegend in verticale richting plaats, terwijl de stroming in watervoerende lagen min of meer horizontaal verloopt. Bij de volgende berekeningen is uitgegaan van een slecht doorlatend afdekkend pakket boven een watervoerende laag, die aan de onderzijde wordt afgesloten door een praktisch ondoorlatende laag.

Het transport van water in het afdekkende pakket wordt hier beschouwd als vertikaal transport. De indringingsdiepte van het water kan dan als volgt worden berekend:

$$d = \frac{N t}{\epsilon} \quad (1)$$

waarin:

d = gemiddelde indringingsdiepte van het water na t jaren (m)

t = tijd sinds infiltratie (jaren)

N = deel van het neerslagoverschot dat infiltreert in het afdekkende pakket (m.jaar^{-1})

ϵ = effectieve watergevulde poriënvolume ($\text{m}^3.\text{m}^{-3}$)

Voor het transport van stoffen in de bodem is de werkelijke snelheid van het water in de poriën van belang, vandaar dat de Darcy-snelheid -dat is hier de jaarlijkse infiltratiesnelheid (N)- gedeeld moet worden door het effectieve watergevulde poriënvolume (e), dat is dat deel van het poriënvolume waardoor de stroming van water plaatsvindt. Afgesloten poriën met stagnant water blijven hierbij dus buiten beschouwing.

De infiltratie in het afdekkende pakket (N) wordt berekend uit de stijghoogteverschillen tussen het freatisch grondwater en het diepe grondwater in het onderliggende watervoerende pakket en de weerstand van het afdekkende pakket, meestal uitgedrukt als C-waarde (=dikte/doorlatendheid, in dagen).

De stroming in het watervoerende pakket verloopt min of meer horizontaal met een geringe verticale component. Voor relatief eenvoudige analytische oplossingen is meestal een vergaande schematisatie noodzakelijk. Als voorbeeld kunnen de volgende situaties worden onderscheiden (zie HOEKS, 1977, 1981):

- a. isohypsen parallel, stroomlijnen parallel (lineair)
- b. isohypsen concentrisch, stroomlijnen divergent (radiaal-divergent)
- c. isohypsen concentrisch, stroomlijnen convergent (radiaal-convergent)

In de praktijk zullen uiteraard allerlei tussenvormen optreden. De hier gegeven schematisaties zijn dan ook een sterke vereenvoudiging van de werkelijkheid. Als voorbeeld zal hier het geval van lineaire stroming (geval a) worden uitgewerkt. Voor de overige gevallen wordt verwezen naar HOEKS (1977).

Het verloop van isohypsen en stroomlijnen is voor het geval van lineaire stroming in het watervoerende pakket weergegeven in fig. 2. De volgende berekening is af te leiden uit formules voor transporttijden in het grondwater, zoals gegeven door ERNST (1973).

De stroomsnelheid van het grondwater in het watervoerende pakket is afhankelijk van de bovenstroomse infiltratie en de dikte van het watervoerende pakket, gecorrigeerd voor het poriënvolume. Op afstand x van het punt van infiltratie is de stroomsnelheid dan gelijk aan:

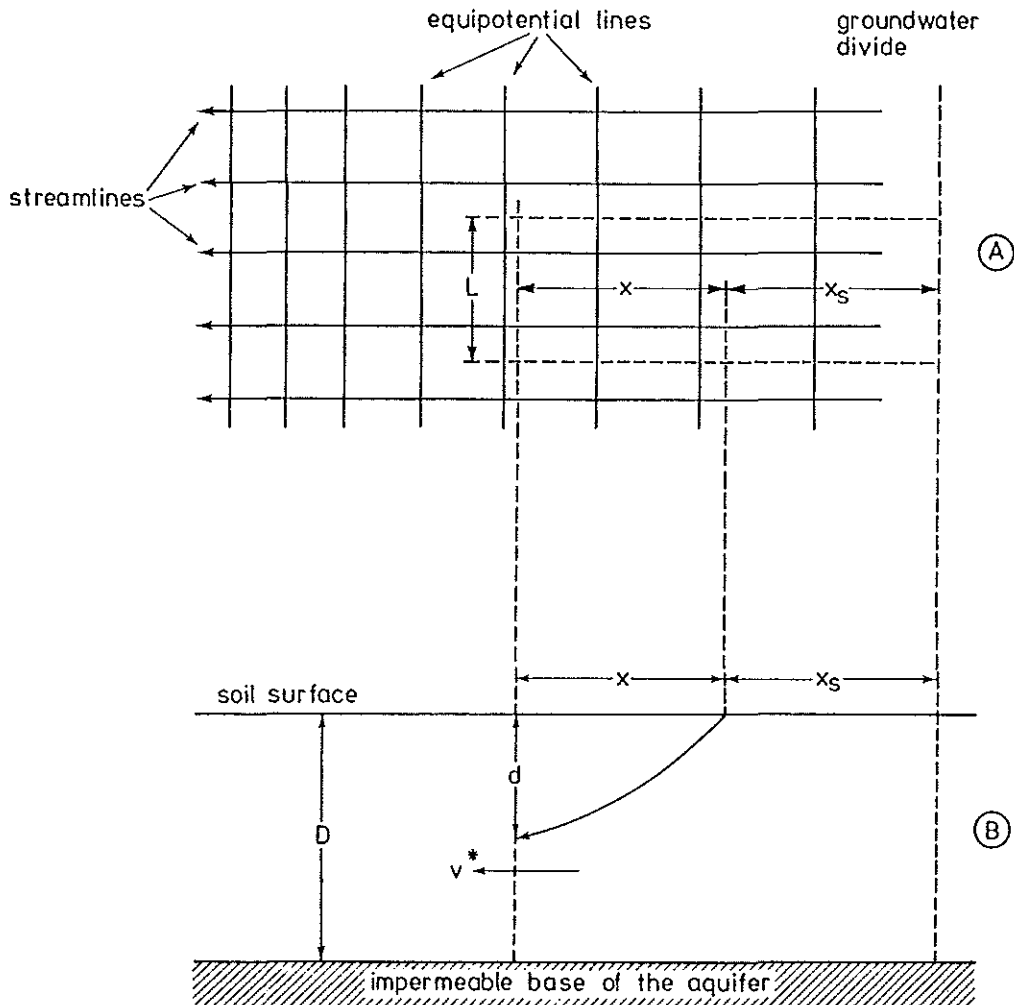


Fig. 2. Lineaire stroming van grondwater in een watervoerend pakket.
 A: patroon van isohypsen en stroomlijnen
 B: verloop van een stroomlijn in het watervoerende pakket
 (zie tekst voor betekenis van symbolen)

$$v^* = \frac{(x + x_s) N}{e D} \quad (2)$$

waarin:

v^* = gemiddelde, effectieve stroomsnelheid van het grondwater in de poriën (m.jaar⁻¹)

x = afstand tot het punt van infiltratie (m)

x_s = afstand tussen infiltratiepunt en waterscheiding (m)

N = hoeveelheid water die infiltreert in het watervoerende pakket (m.jaar⁻¹)

e = watergevuuld poriënvolume (m³.m⁻³)

D = dikte van het watervoerende pakket (m)

Omdat per definitie $v^* = dx/dt$ kan vergelijking (2) worden herschreven als een differentiaalvergelijking, welke na integratie de volgende formule voor de horizontale verplaatsing van het grondwater oplevert:

$$x = x_s (e^{N(t-t_1)/eD} - 1) \quad (3)$$

waarin:

t_1 = verblijftijd van het water in het afdekkende pakket (jaar)

t = tijd sinds infiltratie in het afdekkende pakket (jaar)

$t-t_1$ = tijd sinds infiltratie in het watervoerende pakket (jaar)

Zoals reeds uit fig. 2 blijkt, dringt de stroomlijn met toenemende x steeds dieper in het watervoerende pakket door. Deze diepte van de stroombaan is dus afhankelijk van de afgelegde afstand x en wordt als volgt berekend:

$$d = \left(\frac{x}{x + x_s} \right) D + d_1 \quad (4)$$

waarin:

d = totale indringingsdiepte (m)

d_1 = dikte van het afdekkende pakket (m)

Als het afdekkende pakket ontbreekt dan is uiteraard $d_1=0$ en dientengevolge ook $t_1=0$. Op dezelfde wijze zijn ook analytische oplossingen af te leiden voor radiaal-divergente en radiaal-convergente stroming (zie HOEKS, 1977, 1981).

2.3. Toepassingen

De berekening van het stroomlijnenpatroon wordt veel gebruikt om te laten zien hoe de stroming in het watervoerende pakket langs stroombanen verloopt. Bij lokale verontreiniging, bijvoorbeeld bij een vuilstortplaats, kan dit leiden tot verschillen in grondwaterkwaliteit op verschillende diepten in het watervoerende pakket (zie fig. 3). Bij

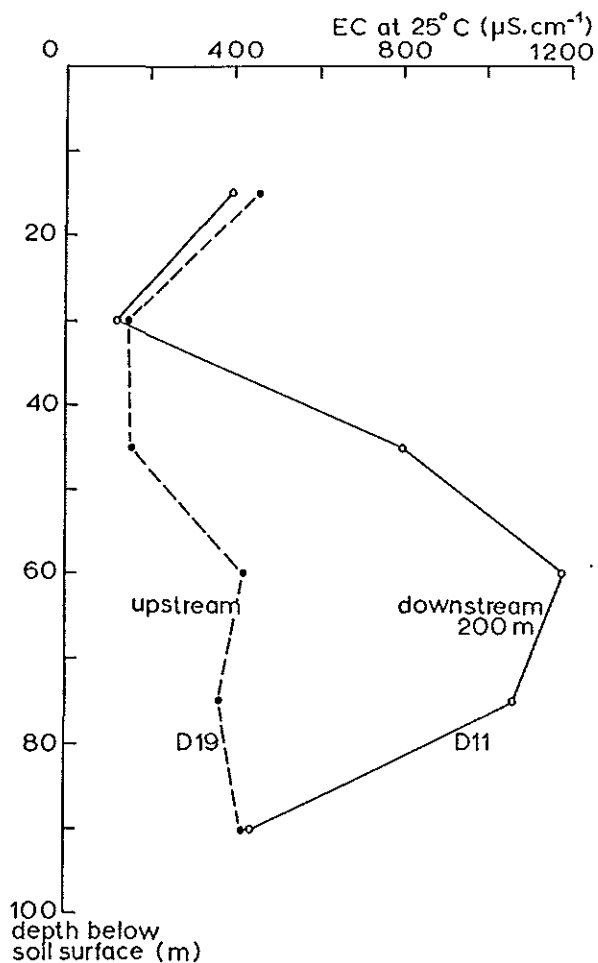


Fig. 3. Het elektrisch geleidingsvermogen van het grondwater 200 meter benedenstrooms van een vuilstortplaats als functie van de diepte in het watervoerende pakket

het opsporen van de verontreiniging moet men hier terdege rekening mee houden. Meerdere grondwaterfilters op verschillende diepte zijn nodig om de verontreinigde stroombaan te traceren.

In vele numerieke modellen wordt de verticale indringing van een verontreinigde stroombaan in het watervoerende pakket niet in beschouwing genomen, omdat de stroming daar meestal wordt beschouwd op een regionale schaal in het twee-dimensionale horizontale vlak, waarbij de verticale indringing in het watervoerende pakket wordt verwaarloosd. In dit geval wordt menging over de volledige dikte van het watervoerende pakket aangenomen, zodat eventuele verschillen in grondwaterkwaliteit met de diepte niet kunnen worden berekend.

Met het model STRELIN (GROENENDIJK, 1988) is het mogelijk om in een verticale doorsnede loodrecht op de isohypsen de stroomlijnen in het verticale vlak te berekenen. In feite is het model gebaseerd op de hiervoor gegeven vereenvoudigde benadering. Met STRELIN is het echter mogelijk om meerdere lagen te onderscheiden in het verticale vlak, terwijl ook de voeding van het grondwater kan variëren met de afstand tot de waterscheiding. De voeding van het diepe grondwater is namelijk afhankelijk van het bodemgebruik en de hydrologische situatie, en kan worden berekend met modellen als SWATRE (FEDDES et al., 1978) of WATBAL (BERGHUIJS-VAN DIJK, 1985).

Een berekening van de stroomlijnen heeft het voordeel dat zichtbaar gemaakt wordt waar het water vandaan komt. Dit is van belang om vast te stellen van welke bron een eventuele verontreiniging afkomstig is. Bij de grondwateronttrekking ten behoeve van de drinkwatervoorziening worden soortgelijke berekeningen gemaakt voor de vaststelling van beschermingszones. Een voorbeeld van een berekening met STRELIN is gegeven door ADRIAANSE en KEMMERS (1988). Hier is de berekening gebruikt voor het vaststellen van de lokatie en omvang van bufferzones rondom te beschermen beekdalen in de provincie Noord-Brabant.

Soortgelijke berekeningen worden gebruikt voor de onttrekking van verontreinigd grondwater bij bodemsaneringen (BRUGGEMAN en SNELTING, 1985). Aan de hand van de berekeningen worden de lokaties van onttrekingsputten en het te kiezen onttrekkingsdebiet vastgesteld.

Bij in-situ reiniging van de bodem worden dan bovendien nog infiltratieputten aangelegd. Een berekening van het stroomlijnenpatroon geeft dan aan of de verontreinigingen volledig onderschept kunnen worden en of een goede hydrologische isolatie ten opzichte van de omgeving wordt bereikt.

3. TRANSPORT VAN OPGELOSTE STOFFEN IN RELATIE MET INTERACTIEPROCESSEN

3.1. Effect van interactieprocessen

Opgeloste stoffen worden in de bodem verspreid omdat ze worden meegevoerd met de grondwaterstroming. Daarom is in par. 2 allereerst een beschrijving van de grondwaterstroming gegeven. Daarnaast wordt de snelheid van verplaatsing en de concentratie in het grondwater beïnvloed door een groot aantal interactieprocessen, zoals adsorptie afbraak of chemische reacties. Een overzicht van interacties tussen de drie fasen in de bodem, de gasfase, de waterfase en de vaste fase is weergegeven in fig. 4. De opgeloste stoffen in de waterfase kunnen

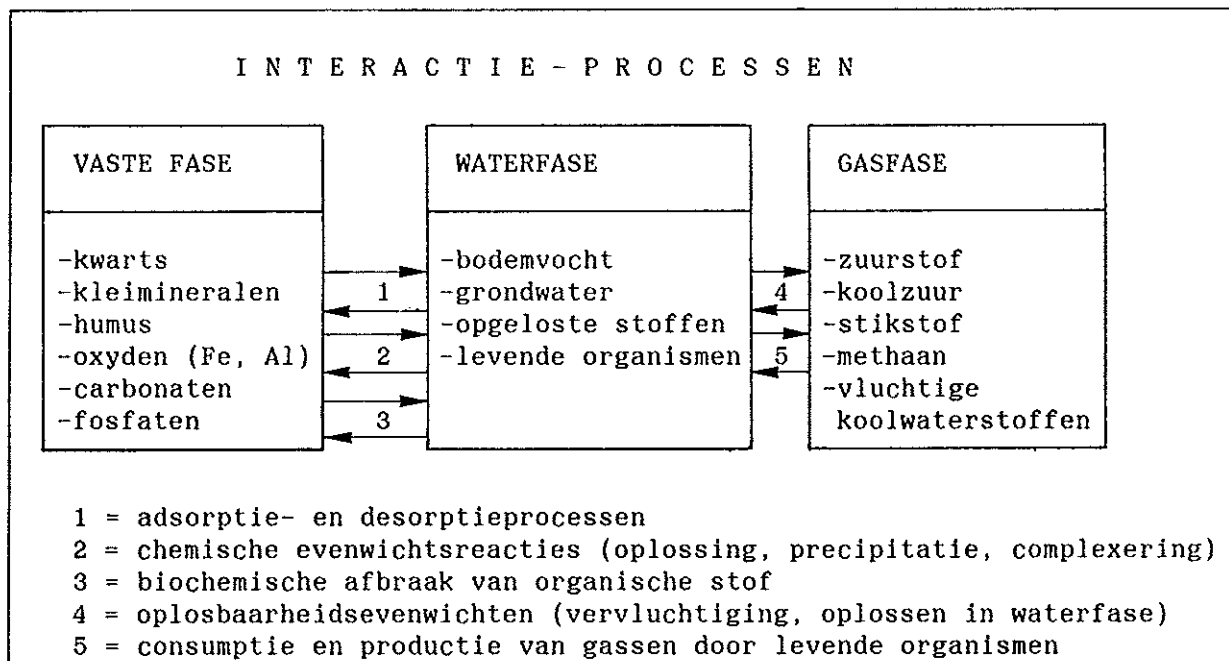


Fig. 4. Overzicht van interacties tussen de drie fasen in de bodem

dus overgaan naar de vaste fase of naar de gasfase. Dit laatste kan met name het geval zijn in de onverzadigde zone boven de grondwaterspiegel. Slechts een enkele component, zoals het chloride-ion, wordt niet beïnvloed door deze interactieprocessen. Een dergelijke component noemt men een conservatieve stof. Het chloride-ion wordt daarom vaak gebruikt als tracer om de stroomsnelheid van het water vast te stellen. Het concentratieverloop van niet-conservatieve stoffen kan hiermee worden vergeleken om een indruk te krijgen van het effect van interactieprocessen.

De interactieprocessen hebben verschillende effecten op de verspreiding en de concentratie van opgeloste stoffen in de bodem. Kwantitatieve gegevens over de interactieprocessen in de bodem zijn te ontleen aan de literatuur. Voorzichtigheid is echter geboden bij de vertaling van laboratoriumresultaten naar de veldsituatie. Vanwege de vele interacties tussen de verschillende opgeloste stoffen onderling zal het vaak nodig zijn om laboratoriumonderzoek uit te voeren met infiltratiewater en gronden uit de veldsituatie. In het laboratorium kan het effect van interactieprocessen op het transport van stoffen door de grond worden onderzocht met behulp van kolomproeven. Door de resultaten te presenteren in zogenaamde "doorbraakcurven" wordt duidelijk welke processen een rol spelen en kan het effect worden gekwantificeerd. In fig. 5 is een voorbeeld gegeven van doorbraakcurven, zoals deze verwacht kunnen worden voor stoffen, die betrokken zijn bij interactieprocessen.

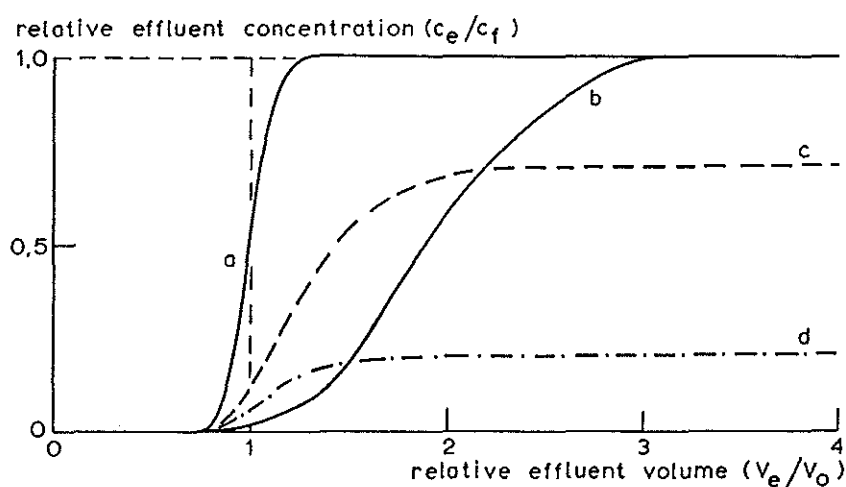


Fig. 5. Schematische weergave van het effect van interactieprocessen op de doorbraak van opgeloste stoffen bij kolomexperimenten (naar HOEKS, 1977):

- a. conservatieve stof, waarbij alleen dispersie een rol speelt (geen adsorptie, afbraak of chemische processen)
- b. met adsorptie (geen afbraak of chemische processen)
- c/d. met biologische afbraak of chemische evenwichtsreacties (geen adsorptie)

Uit fig. 5 blijkt dat het front van een conservatieve stof als chloride S-vormig verloopt. De toevoer van water aan de kolom op het begin-

tijdstip veroorzaakt een abrupte concentratietoename in de kolom. Niettemin blijkt het front na passage van de kolom een diffuus karakter te hebben, hetgeen veroorzaakt wordt door dispersie en diffusie in de kolom. Hierdoor treedt dus frontvervaging op (BOLT, 1985).

Adsorptie heeft tot gevolg dat het front van een stof zich langzamer verplaatst in de bodem dan het water. Adsorptie heeft in feite geen invloed op de uiteindelijke concentratie in het grondwater, want na passage van het front is de concentratie gelijk aan de concentratie in het infiltrerende water. Bij adsorptie dient men te bedenken dat adsorptie van de ene stof veelal leidt tot desorptie van andere stoffen, die dan dus worden toegevoegd aan het grondwater. Hierdoor leidt adsorptie van verontreinigende stoffen veelal tot desorptie van bijvoorbeeld calcium en magnesium, waardoor de hardheid van het grondwater toeneemt.

Microbiologische afbraak- en omzettingsreacties en ook chemische reacties hebben wel invloed op de uiteindelijke concentraties in het grondwater. Bij biologische afbraakprocessen zal, na adaptatie van de microorganismen, de concentratie in het grondwater afnemen naarmate de verblijftijd in de bodem toeneemt. Overigens dient men er rekening mee te houden dat bij afbraak eventueel ongewenste afbraakproducten kunnen ontstaan.

De belangrijkste chemische reacties betreffen het oplossen of neerslaan van slecht oplosbare verbindingen in de bodem, waarbij opgeloste stoffen worden toegevoegd aan of verdwijnen uit het grondwater. De concentraties worden dan bepaald door de oplosbaarheidsproducten van de slecht oplosbare verbindingen. Andere belangrijke reacties zijn de redoxreacties, waarbij oxydatie of reductie van stoffen optreedt afhankelijk van de heersende redoxpotentiaal. Ook kunnen complexen gevormd worden uit verschillende ionen of met organische stoffen, waardoor de oplosbaarheid van een stof drastisch gewijzigd kan worden.

3.2. De stoffenbalans

Voor het transport van opgeloste stoffen in de bodem kan een stoffenbalans worden opgesteld, namelijk de zogenaamde continuïteitsvergelijking:

$$\epsilon \frac{\delta C}{\delta t} = D_s \frac{\delta^2 C}{\delta x^2} - v \frac{\delta C}{\delta x} - S \quad (5)$$

waarin:

- ϵ = watergevuuld poriënvolume ($m^3 \cdot m^{-3}$)
- C = concentratie van de opgeloste stof ($g \cdot m^{-3}$)
- t = tijd (jaren)
- D_s = dispersiecoëfficiënt (inclusief diffusie) ($m^2 \cdot jaar^{-1}$)
- x = afstand (m)
- v = Darcy-stroomsnelheid ($m \cdot jaar^{-1}$)
- S = "sink" term omvattend adsorptie, afbraak en/of chemische processen ($g \cdot m^{-3} \cdot jaar^{-1}$)

Deze vergelijking geeft aan, dat de netto toename van de hoeveelheid opgeloste stof per volume-eenheid ($\epsilon \delta C / \delta t$) gelijk is aan de netto toevoer tengevolge van dispersie en diffusie ($D_s \delta^2 C / \delta x^2$) en massastroming ($-v \delta C / \delta x$), verminderd met de hoeveelheid opgeloste stof die aan het systeem wordt onttrokken door adsorptie, afbraak of chemische precipitatie (S). In par. 3.3 zal het optreden van dispersieverschijnselen in de bodem uitvoeriger worden besproken.

In het kader van de PHLO-cursus Waterkwaliteit Landelijke Gebieden (LU, Wageningen) worden de chemische en biochemische processen uitvoerig behandeld door DE HAAN (1984), BREEUWSMA (1984), LEBBINK en NEETESON (1984) en HOUX en BOESTEN (1984). Ter illustratie van de mathematische beschrijving van interactieprocessen zal hier worden volstaan met een eenvoudige beschrijving van lineaire adsorptie en eerste-orde afbraak (zie par. 3.4).

3.3. Dispersie

Bij transport van opgeloste stoffen door een poreus medium als de bodem moet rekening worden gehouden met het optreden van dispersie-effecten. Dispersie is een gecompliceerd proces, dat wordt veroorzaakt door de heterogeniteit van het poriënstelsel in de bodem. De stroming van water vindt plaats via grote poriën (met grote snelheid) en via kleinere poriën (met geringe snelheid). Het front van een opgeloste stof zal daarom via grote poriën sneller doordringen dan via kleine poriën. Een deel van het poriënstelsel kan bovendien bestaan uit zoge-

naamde "dead-end-pores", waarin geen stroming plaatsvindt en waar de opgeloste stof alleen door middel van diffusie kan binnendringen. Deze variatie in stroomsnelheden op microschaal leidt tot concentratieverschillen in de poriën. Op plaatsen, waar dwarsverbindingen tussen poriën bestaan, worden de verschillende deelstromen weer met elkaar gemengd, hetgeen leidt tot nivellering van concentratieverschillen. Het gevolg is dat een front van opgeloste stof tijdens het transport door de bodem steeds verder vervaagt en uiteindelijk als een breed diffuus front uitstroomt in een waterloop of grondwateronttrekkingsput. In feite kan de dispersieterm in de stoffenbalans worden gezien als een correctie op de Darcy-stroming waar alleen met een gemiddelde stroomsnelheid v wordt gerekend en de afwijkingen van v op microschaal buiten beschouwing blijven. Het effect van dispersie is vergelijkbaar met dat van diffusie, aangezien in beide gevallen nivellering van concentratieverschillen optreedt. Meestal worden de effecten van dispersie en diffusie dan ook tesamen beschouwd. In vergelijking (5) is de diffusiecoëfficiënt mee inbegrepen in de dispersiecoëfficiënt D_s . De hier beschreven dispersieverschijnselen tengevolge van verschillen in stroomsnelheden op microschaal wordt ook wel "micro-dispersie" genoemd.

Ook op macroschaal is dispersie mogelijk, bijvoorbeeld in een watervoerend pakket waarin afwisselend grofzandige en fijnzandige, slibhoudende laagjes voorkomen. In de stoffenbalans wordt dan doorgaans gerekend met de gemiddelde stroomsnelheid van het grondwater in het watervoerende pakket, berekend volgens Darcy. In de grofzandige lagen zal de stroomsnelheid echter groter zijn dan dit gemiddelde en in fijnzandige lagen juist kleiner. Opgeloste stoffen verplaatsen zich daardoor sneller via de grofzandige lagen dan via de fijnzandige, slibhoudende lagen. Hierdoor ontstaan in het watervoerende pakket concentratieverschillen met de diepte. Op plaatsen waar dwarsverbindingen bestaan tussen lagen of bij uitstroming in een grondwateronttrekkingsput of een waterloop worden de verschillende stromen weer gemengd en worden de concentratieverschillen genivelleerd. Voor dit type dispersie wordt de term "macro-dispersie" gebruikt.

Over het algemeen, zeker in de verzadigde zone, blijkt de micro-dispersie relatief klein te zijn ten opzichte van de massastroming. De dispersielengte, dat is de dispersiecoëfficiënt D_s gedeeld door de

stroomsnelheid v , ligt meestal in de orde van enkele centimeters. De macrodispersie is veel groter, hier ligt de dispersielengte in de orde van tientallen meters. Onder veldomstandigheden is de dispersiecoëfficiënt overigens moeilijk te schatten. Als reeds grondwaterverontreiniging is opgetreden, kan de dispersiecoëfficiënt worden berekend uit het concentratieverloop, zoals dit in het grondwater is aangetroffen. Vaak ontbreken echter de historische gegevens, zodat niet meer goed is na te gaan welke concentraties in het verleden voorkwamen in het geïnfiltreerde water. In dat geval zal men de dispersiecoëfficiënt experimenteel moeten vaststellen, bijvoorbeeld door injectie van een tracerstof en meting van het concentratieverloop in de tijd benedenstrooms van het injectiepunt.

Het kennen van de dispersiecoëfficiënt is van belang als men vrij nauwkeurig het concentratieniveau van een stof in het grondwater als functie van plaats en tijd wil berekenen. Als de absolute concentratie van minder belang is en men in eerste instantie alleen een ruwe schatting wil hebben van de verontreiniging en een beeld van de verspreiding in het grondwater voor wat betreft richting en afstand, dan kan men de dispersie buiten beschouwing laten. Voor de berekeningen in deze nota is de dispersie verwaarloosd zodat relatief eenvoudige oplossingen worden verkregen, die alleen gebruikt mogen worden voor een eerste ruwe schatting.

3.4. Adsorptie en afbraak

Het effect van adsorptie op het transport van een opgeloste stof kan eenvoudig geïllustreerd worden aan de hand van het volgende voorbeeld. Als het adsorptieproces kan worden beschreven als lineaire adsorptie, dat wil zeggen dat de hoeveelheid die wordt geadsorbeerd (q) recht evenredig is met de concentratie in de oplossing ($q=Kc$), dan kan bij verwaarlozing van dispersie en afbraak uit vergelijking (5) de volgende differentiaalvergelijking worden afgeleid ($S=K\delta C/\delta t$):

$$(\epsilon + K) \frac{\delta C}{\delta t} = -v \frac{\delta C}{\delta x} \quad (6)$$

Hieruit volgt met $\delta C/\delta t * \delta x/\delta C = -\delta x/\delta t$:

$$\frac{\delta x}{\delta t} = \frac{v}{(\epsilon + K)} \quad (7)$$

Aangezien $\delta x/\delta t$ per definitie gelijk is aan een snelheid, in dit geval de snelheid waarmee het front van de opgeloste stof zich verplaatst, kan deze vergelijking worden herschreven als

$$v_i = v^* \left(\frac{1}{1 + R} \right) \quad (8)$$

waarin:

v_i = verplaatsingssnelheid van het front van de opgeloste stof i
(m.jaar⁻¹)

v^* = gemiddelde effectieve stroomsnelheid van het grondwater in de poriën, berekend als v/ϵ (m.jaar⁻¹)

R = distributieverhouding, die aangeeft hoe de opgeloste stof is verdeeld over de vaste fase en de waterfase ($R=q/\epsilon C=K/\epsilon$)

Uit vergelijking (8) blijkt dat adsorptie leidt tot vertraagd transport van de opgeloste stof ten opzichte van de stroomsnelheid van het water (zie ook fig. 6). Voor chloride zal $R=0$ zijn, omdat dit ion niet wordt

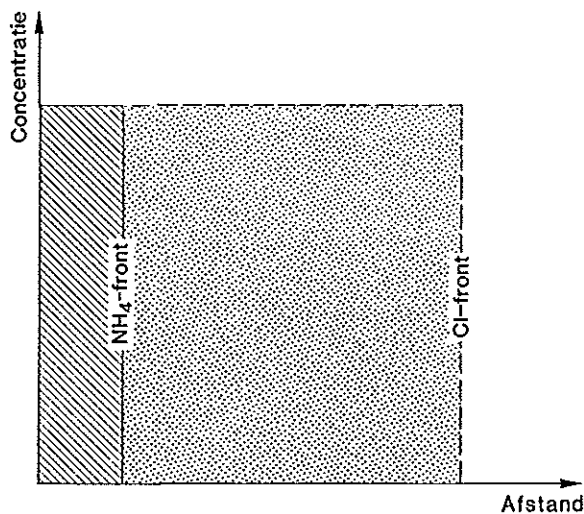


Fig. 6. Frontverplaatsing van de opgeloste stoffen chloride ($R=0$) en ammonium ($R=4$), berekend volgens vergelijking (8)

geadsorbeerd. Dit betekent dat het chloride-ion zich met dezelfde snelheid verplaatst als het water. Voor sommige zware metalen kan de R-waarde wel in de orde van 100-1000 liggen waardoor het transport van deze metalen in de bodem sterk vertraagd wordt.

In veel gevallen is het adsorptieproces echter aanmerkelijk gecompliceerder dan hierboven beschreven, omdat meerdere ionen bij de adsorptie- en desorptieprocessen zijn betrokken. Dit is bijvoorbeeld het geval bij de ionenomswisseling aan het klei/humus-complex in de bodem. De mate van adsorptie van een ion is hier afhankelijk van de concentraties van concurrerende ionen en van het totaal zoutgehalte in de bodemoplossing. Men zal dan multicomponent modellen moeten gebruiken voor de beschrijving van het adsorptieproces.

Het effect van microbiologische afbraak op bijvoorbeeld de concentratie van opgeloste organische stoffen kan worden geïllustreerd door een eenvoudige mathematische beschrijving van het afbraakproces te geven in de vorm van een eerste-orde afbraakreactie, dat wil zeggen dat de afbraaksnelheid S recht evenredig is met de concentratie in oplossing ($S=\alpha C$). Als wordt aangenomen dat tevens lineaire adsorptie optreedt, dan kan de frontverplaatsing worden berekend met vergelijking (8). Achter dit front treedt geen adsorptie meer op omdat daar het adsorptiecomplex reeds verzadigd is (hier is $S=\delta q/\delta t=0$). Hier is dus sprake van een stationaire situatie, zodat $\delta C/\delta t=0$. Voor deze situatie gaat vergelijking (5) over in:

$$v \frac{\delta C}{\delta x} = -\alpha C \quad (9)$$

hetgeen na integratie de volgende vergelijking oplevert:

$$C = C_0 e^{-(\alpha/v) x}$$

en na substitutie van $v=ev^*=ev_1(1+R)$, $v_1=x/t$ en $k=\alpha/\epsilon$:

$$C = C_0 e^{-kt/(1+R)} \quad (10)$$

waarin:

k = afbraaksnelheidscoëfficiënt (jaar⁻¹)

C_0 = aanvangsconcentratie in het infiltrerende water (g.m⁻³)

Uit deze vergelijking blijkt dat de concentratie (C) afneemt met toenemende verblijftijd in het grondwater. Met vergelijking (8) kan nu de verplaatsing van het front worden berekend en met vergelijking (10) is de concentratie ter plaatse van het front uit te rekenen, beide als functie van de tijd sinds infiltratie (zie fig. 7). Door het verwaar-

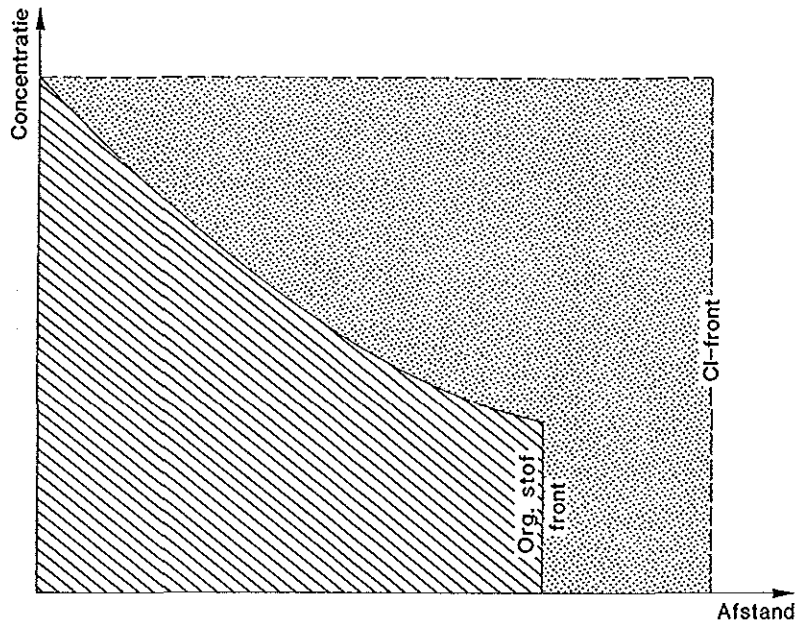


Fig. 7. Frontverplaatsing en concentratieverloop achter het front voor een opgeloste organische stof, die wordt geadsorbeerd en tevens wordt afgebroken; berekend met de vergelijkingen (8) en (10)

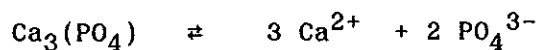
lozen van de dispersie vindt aan het front een abrupte concentratie-stijging plaats ("propstroming"). Dit gebeurt in werkelijkheid uiteraard niet omdat als gevolg van dispersie een diffuus front ontstaat, waarbij de concentratie geleidelijk stijgt.

Afbraak van organische stoffen door micro-organismen is overigens van meer factoren afhankelijk dan hiervoor is verondersteld. In de eerste orde benadering wordt aangenomen dat alleen de substraatconcentratie limiterend is voor de afbraaksnelheid, maar ook andere factoren zoals zuurstofvoorziening, vocht, temperatuur en voedingsomstandigheden bepalen de afbraaksnelheid. Soms zal ook rekening moeten worden gehouden met een adaptatieperiode, waarin de micro-organismen zich aanpassen aan het af te breken substraat, en met de daarop volgende exponentiële groei van een bacteriepopulatie.

3.5. Chemische en biochemische reacties

Meer complex is de introductie van chemische en biochemische evenwichtsreacties waarbij meerdere ionen uit het infiltrerende water reageren met elkaar en met in de bodem aanwezige ionen. Daarbij kunnen omzettingen producten ontstaan of slecht oplosbare verbindingen die als neerslag in de bodem achterblijven.

Bij chemische reacties worden de ionenconcentraties in de waterfase bepaald door de evenwichtsconstanten van de reacties en door de oplosbaarheidsproducten van slecht oplosbare verbindingen. Vooral als meerdere slecht oplosbare verbindingen aanwezig zijn in het bodemsysteem en als ook nog rekening moet worden gehouden met ionenomschikking aan het adsorptiecomplex, dan is de berekening van de evenwichtsconcentraties ingewikkeld omdat bij de berekening meerdere componenten tegelijkertijd in beschouwing moeten worden genomen. Een eenvoudig voorbeeld betreffende de interactie tussen calciumcarbonaat en calciumfosfaat illustreert dat de concentratie van Ca in de bodem gelijktijdig wordt gereguleerd door meerdere componenten. De belangrijkste reacties zijn:



In dit geval wordt de oplosbaarheid van calciumcarbonaat ook nog gereguleerd door de pH en de CO_2 -spanning. Dit betekent dat in feite nog meer reacties in beschouwing moeten worden genomen.

Voorbeelden van veel voorkomende chemische reacties in de bodem zijn de kalkevenwichten in gronden met hogere pH-waarden, de ijzer- en aluminiumevenwichten in gronden met lage pH-waarden en redoxreacties in gronden met afwisselend oxiderend en reducerend milieu, zoals bijvoorbeeld de reductie van nitraat in de ondergrond als gevolg van oxydatie van organische stof of pyriet.

Momenteel zijn meerdere modellen beschikbaar voor de berekening van chemische evenwichten, bijvoorbeeld het model CHARON (DE ROOY, 1982)

en het model COMPLEX (ABDEL KHALIK en BLÖMER, 1984). Het model COMPLEX berekent de activiteiten en complexen van opgeloste ionen in water, waarbij alleen de macro-ionen H^+ , Na^+ , Ca^{2+} , Mg^{2+} , Cl^- , HCO_3^- , CO_3^{2-} en SO_4^{2-} in beschouwing zijn genomen. Deze ionen zijn betrokken bij meerdere reacties.

Het model EPIDIM (GROENENDIJK, 1987) beschrijft een koppeling van chemische evenwichtsreacties met betrekking tot verwerking en neerslag van calciëten en ionenomsomwisseling. Het oplossen en neerslaan van calciëten kan in het model als een proces met momentane evenwichtsinstelling worden beschreven, maar de reactiesnelheid kan ook worden beschreven als een kinetisch eerste-orde proces en de evenwichtsinstelling is dan dus een tijdsafhankelijk proces.

Uiteraard hangt het van het pH-traject in de grond af, welke chemische reacties en ionen in beschouwing moeten worden genomen. Zo zullen bij voortschrijdende verzuring van de bodem onder invloed van atmosferische depositie vooral de Fe- en Al-complexen in beschouwing genomen moeten worden, terwijl bij hogere pH-waarden vooral de carbonaatevenwichten van belang zijn.

Een voorbeeld van een model, dat een complex van biochemische reacties beschrijft, is het ANIMO-model (BERGHUIJS-VAN DIJK et al., 1985) waarmee de stikstofhuishouding in de bodem wordt gesimuleerd. Uitgaande van het bodemtype, het bodemgebruik, de bemesting en de ontwateringstoestand wordt de nitraatbelasting van het grondwater berekend. Het model beschrijft het effect van processen als mineralisatie van organische stof, immobilisatie van stikstof door micro-organismen, nitrificatie en denitrificatie. Koppeling met hydrologische modellen maakt het mogelijk om de uitspoeling en verspreiding van nitraat via het grondwater te berekenen.

4. KOPPELING VAN GRONDWATERSTROMING EN STOFTRANSPORT

4.1. Algemene aspecten van grondwaterkwaliteitsmodellering

Voor de beschrijving van het transport van opgeloste stoffen in grondwatersystemen moeten oplossingen voor de grondwaterstroming, zoals besproken in par. 2, worden gecombineerd met de in par. 3 besproken modellen voor de beschrijving van dispersie en interactieprocessen. De grondwaterstroming is hierbij essentieel omdat deze de stroomrichting en de stroomsnelheid van het water bepaalt. Koppeling van grondwatermodellen met interactiemodellen is niet altijd eenvoudig, vooral niet als de beide modellen afzonderlijk zijn ontwikkeld. Grondwatermodellen zullen zodanig aangepast moeten worden dat de stroomsnelheid v op de roosterpunten als output beschikbaar komt, aangezien met deze snelheden verder gerekend moet worden in het stoftransportmodel. In veel gevallen kan worden volstaan met een berekening van de stationaire stroomsnelheidsverdeling, tenzij door waterhuishoudkundige ingrepen of weersomstandigheden de snelheidsverdeling regelmatig verandert.

Ter illustratie zal in deze paragraaf een voorbeeld worden gegeven van grondwaterkwaliteitsmodellering door koppeling van grondwaterstroming met stoftransport, rekening houdend met adsorptie en afbraak. Daartoe zullen de formules voor de grondwaterstroming, zoals afgeleid in par. 2 voor een sterk geschematiseerde geohydrologische situatie, worden gecombineerd met de in par. 3 gegeven formules voor lineaire adsorptie en eerste-orde afbraak.

4.2. Voorbeeld van een eenvoudig grondwaterkwaliteitsmodel

Voor de geschematiseerde geohydrologische situatie met een afdekkend pakket en een watervoerend pakket, waarin lineaire stroming van grondwater plaatsvindt (zie par. 2) kan nu een eenvoudig grondwaterkwaliteitsmodel worden afgeleid. Door combinatie van vergelijking (1) met vergelijking (8) wordt een vergelijking verkregen voor de indringings-

diepte van het front van de opgeloste stof i in het afdekkende pakket. De effectieve stroomsnelheid van het water in de poriën is in dit geval $v^*=N/\epsilon$. De indringingsdiepte van het front is gelijk aan $d_i=v_i t$ en wordt dan als volgt berekend:

$$d_i = \frac{Nt}{\epsilon_1(1+R_1)} \quad (11)$$

De index 1 verwijst hier naar het afdekkende pakket, terwijl in het volgende de index 2 gebruikt wordt voor het watervoerende pakket. Door nu in vergelijking (11) voor d_i de dikte d_1 van het afdekkende pakket in te voeren, kan men per stof de verblijftijd t_1 in dit pakket berekenen. Op tijdstip t_1 bereikt het front van de betreffende stof dus het watervoerende pakket.

De horizontale verplaatsing in het watervoerende pakket wordt berekend door combinatie van de vergelijkingen (2) en (8), waarna op vergelijkbare wijze als bij vergelijking (3) de integratie van de ontstane differentiaalvergelijking leidt tot:

$$x_i = x_s [e^{N(t-t_1)/\epsilon_2 D(1+R_2)} - 1] \quad (12)$$

De bijbehorende indringingsdiepte van het front is dan:

$$d_i = \left(\frac{x_i}{x_i + x_s}\right)D + d_1 \quad (13)$$

In geval afbraak plaatsvindt wordt de concentratie in het afdekkende pakket, dus voor $t < t_1$, berekend als

$$C = C_0 e^{-k_1 t / (1+R_1)} \quad (14)$$

In het watervoerende pakket, dat wil zeggen als $t > t_1$, wordt de concentratie berekend met:

$$C = C_0 e^{-[k_2(t-t_1)/(1+R_2) + k_1 t_1/(1+R_1)]} \quad (15)$$

Als het afdekkende pakket ontbreekt, dan vallen uiteraard alle parameters met de index 1 weg uit bovenstaande vergelijkingen door voor deze parameters nul in te voeren.

Dergelijke eenvoudige analytische oplossingen zijn uitstekend bruikbaar om de belangrijkste kenmerken van het transport van opgeloste stoffen in het bodem- en grondwatersysteem te illustreren. De toepassing van analytische oplossingen voor praktijksituaties zal meestal beperkt blijven tot het geven van eerste ruwe schattingen. Soms zijn dergelijke ruwe schattingen echter al voldoende, bijvoorbeeld voor de vergelijking van alternatieven in het kader van de milieu-effect-rapportage.

4.3. Ontwikkeling van complexe grondwaterkwaliteitsmodellen

Hoewel sterk vereenvoudigde modellen en analytische oplossingen zeer bruikbaar kunnen zijn in bepaalde gevallen, veronderstellen deze modellen een zekere graad van homogeniteit, die in het veld niet voorkomt. Daarom zal men voor de toepassing op praktijkschaal al gauw de beschikking willen hebben over complexe numerieke modellen die rekening kunnen houden met de in het veld optredende heterogeniteiten. Dat betekent dat de grondwaterstroming meer in detail uitgerekend moet worden, waarbij rekening gehouden kan worden met variaties in dikte van afdekkende en watervoerende pakketten, doorlatendheden die variëren met afstand en diepte, en variaties in toevoer en onttrekking van water. Eventueel kan men gebruik maken van stochastische modellen, zodat ook nog rekening kan worden gehouden met de ruimtelijke variabiliteit van parameters binnen lagen, die in het model als homogeen worden beschouwd.

Ook de interactieprocessen kunnen meer of minder gecompliceerd worden beschreven. In het merendeel van de gevallen zal men de berekening niet kunnen beperken tot slechts één opgeloste stof, omdat de concentratie van deze stof tevens afhangt van de concentraties van andere opgeloste stoffen. In het grondwaterkwaliteitsmodel zal men daarom tegelijkertijd het transport van meerdere opgeloste stoffen moeten beschouwen. Dit leidt al snel tot complexe numerieke modellen voor een multicomponent-systeem.

ONTWIKKELING VAN GRONDWATERKWALITEITSMODELLEN

		INTERACTIE PROCESSEN	
		Eenvoudig	Uitgebreid
HYDROLOGIE	Eenvoudig	Analytische oplossingen TRADE FLOP STRELIN	Mixing cell transport +COMPLEX, CHEMEO CHARON, EPIDIM
	Uitgebreid	Prickett-Lonquist Konikow-Bredehoeft INTERA ONZAT-INTERA	FEMSAT+ANIMO WATBAL of SWATRE+ ANIMO GROVERPLA+CHARON

Fig. 8. Ontwikkeling van grondwaterkwaliteitsmodellen door combinatie van hydrologische modellen met modellen die de interactieprocessen in de bodem beschrijven

In het schema in fig. 8 is een overzicht gegeven van mogelijke combinaties tussen grondwatermodellen, die een beschrijving van de hydrologie geven, en interactiemodellen, die een beschrijving van de bodemchemische en biologische reacties geven. In het schema zijn slechts enkele voorbeelden van modellen genoemd. Uit de literatuur zijn uiter-

aard nog vele andere voorbeelden te geven. In dit verband kan ook gewezen worden op de activiteiten van het International Ground Water Modelling Centre (IGWMC) in Delft, die overzichten uitgeeft van bestaande en toepasbare modellen voor de berekening van grondwaterstromingen en grondwaterkwaliteit.

5. VOORBEELDEN VAN TOEPASSING VAN GRONDWATERKWALITEITSMODELLEN

5.1. Grondwaterverontreiniging bij een afvalstortplaats

De eerder afgeleide analytische oplossingen zijn te gebruiken om bijvoorbeeld de te verwachten verontreiniging van het grondwater bij een lokale verontreinigingsbron, zoals een afvalstortplaats, te berekenen. Behalve het kiezen van een geschikte schematisatie van de geohydrologische situatie, is een belangrijk probleem hoe de juiste waarden voor de verschillende parameters te vinden. Dit geldt in het bijzonder voor de distributieverhouding R , waarmee het effect van adsorptie wordt beschreven, en de afbraaksnelheidscoëfficiënt k om het effect van afbraak te beschrijven. Door HOEKS (1977, 1981, 1983) zijn enkele rekenvoorbeelden gegeven betreffende grondwaterverontreiniging bij een afvalstortplaats, olie- en organische verontreiniging in een waterwingebied en de indringing van zuurfronten in de bodem onder invloed van atmosferische depositie van verzurende stoffen.

In fig. 9 is een voorbeeld gegeven van een berekening van de grondwaterverontreiniging bij een afvalstortplaats, waar geen bodemafdichting is toegepast. Weergegeven is de situatie na 50 jaar voor chloride, ammonium, zink en organische stoffen gemeten als het chemisch zuurstofverbruik. Voor het chloride-ion is aangenomen dat geen adsorptie en afbraak optreedt, voor ammonium en zink alleen adsorptie, en voor de organische stoffen alleen afbraak. Voor de berekening zijn de volgende gegevens gebruikt:

- geohydrologische gegevens:

afdekkend pakket : $d_1 = 3 \text{ m}$ $\epsilon_1 = 0,35$
 watervoerende pakket : $D = 50 \text{ m}$ $\epsilon_2 = 0,40$
 infiltratie : $N = 0,2 \text{ m.jaar}^{-1}$
 afstand tot waterscheiding: $x_s = 900 \text{ resp. } 1100 \text{ m}$

- gegevens betreffende interactieprocessen:

	afdekkend pakket	watervoerend pakket
Chloride (Cl)	: $R_1 = 0$ $k_1 = 0$	$R_2 = 0$ $k_2 = 0$
Ammonium (NH ₄)	: $R_1 = 1,0$ $k_1 = 0$	$R_2 = 0,2$ $k_2 = 0$
Zink (Zn)	: $R_1 = 10,0$ $k_1 = 0$	$R_2 = 4,0$ $k_2 = 0$
Organische stoffen (COD)	: $R_1 = 0$ $k_1 = 1$	$R_2 = 0$ $k_2 = 0,3$

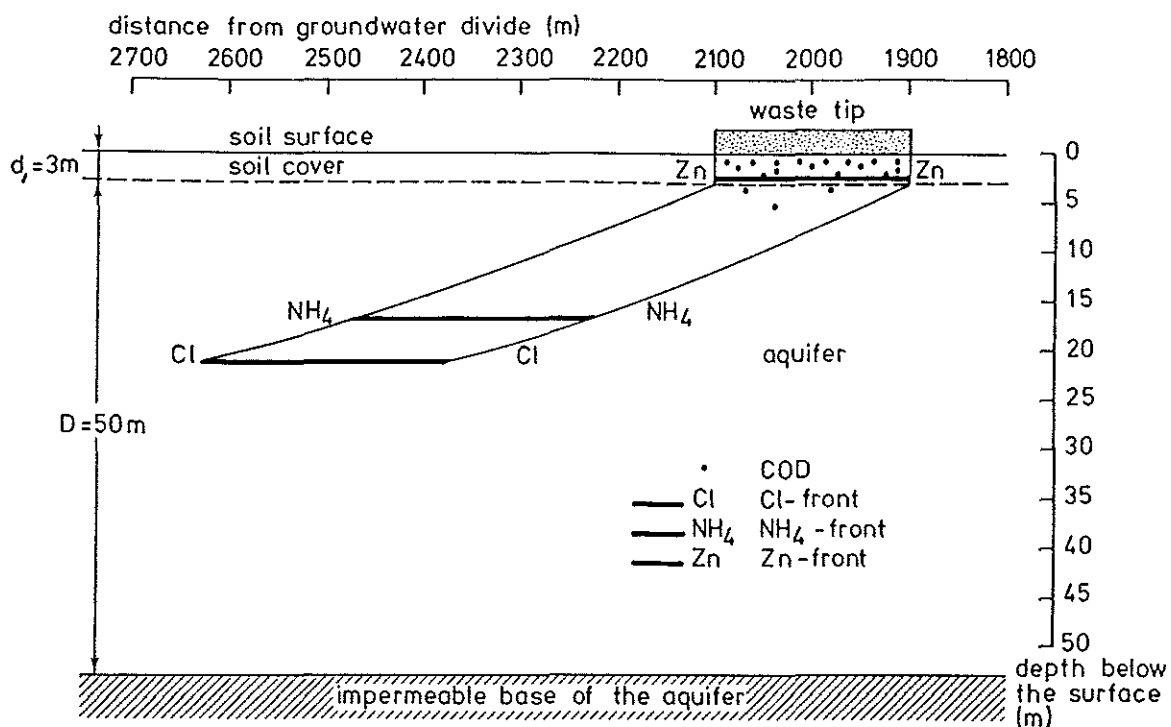


Fig. 9. Verontreiniging van het grondwater met chloride, ammonium, zink en organische stoffen bij een afvalstortplaats na 50 jaar, berekend met de gegevens zoals vermeld in de tekst

Het rekenvoorbeeld geeft aan dat met de analytische oplossingen zoals gegeven in par. 4 in feite de frontverplaatsing wordt berekend. Voor Cl, NH₄ en Zn is de concentratie achter het front gelijk aan de concentratie in het infiltrerende afvalwater. Voor de organische stoffen kan het concentratieverloop achter het front worden berekend door bijvoorbeeld de afgelegde afstand en de bijbehorende concentratie aan het front op verschillende tijdstippen uit te rekenen.

Uit dit rekenvoorbeeld blijkt dat door afbraak van de organische stoffen uiteindelijk een stationaire situatie ontstaat waarbij het front zich niet verder verplaatst. Gerekend vanaf het punt van infiltratie neemt de concentratie geleidelijk af met de diepte en de afstand tot dat de stof zover is afgebroken, dat de concentratie gedaald is tot beneden de detectiegrens. In geval van adsorptie ontstaat geen stationaire situatie. Zolang de infiltratie van verontreinigd water door gaat blijft het front zich verplaatsen, echter met een zekere vertraging ten opzichte van de grondwaterstroming. Het front verplaatst zich met de tijd steeds verder in benedenstroomse richting.

5.2. Vaststelling beschermingszones rond beekdalen

Een voorbeeld van een berekening van het stroomlijnenverloop in het verticale vlak met het STRELIN-model is gegeven door ADRIAANSE en KEMMERS (1988). De berekening is uitgevoerd om de lokatie en omvang van bufferzones rondom te beschermen beekdalen in de provincie Noord-Brabant vast te stellen (zie fig. 10). Uitgangspunt voor de berekening

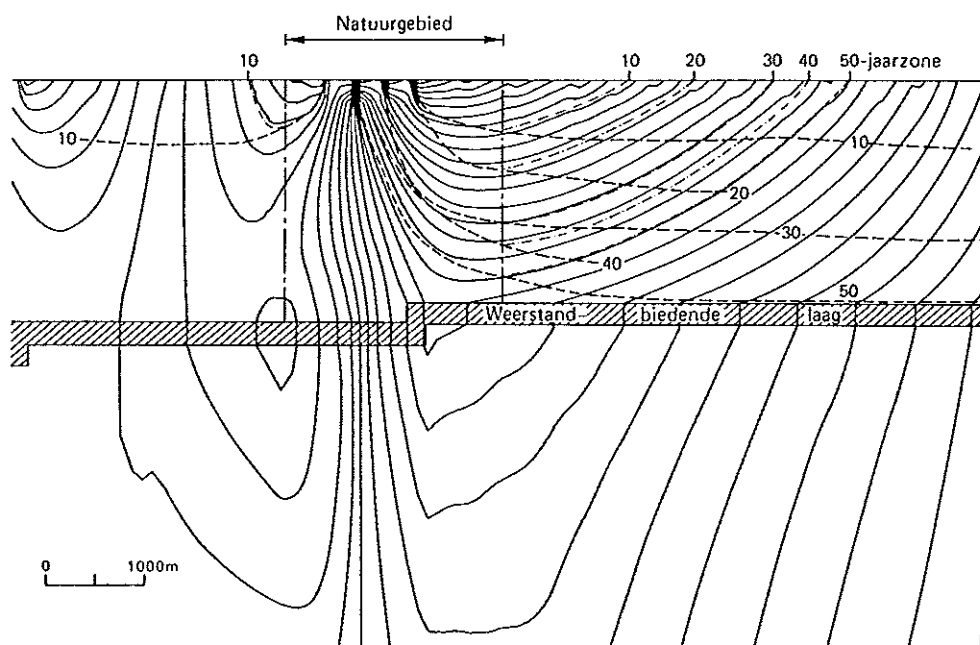


Fig. 10. Voorbeeld van een berekening met STRELIN van stroombanen in het grondwater ten behoeve het vaststellen van bufferzones rond beekdalen in Noord-Brabant (naar ADRIAANSE en KEMMERS, 1988)

was dat geen nitraathoudend grondwater mag worden toegevoerd aan het te beschermen beekdal. Dit betekent dat de nitraatconcentratie nul moet zijn ter plaatse van de grens van het beekdal. Met het model ANIMO (BERGHUIJS-VAN DIJK et al., 1985) is de nitraatbelasting van het grondwater berekend als functie van het bodemgebruik, de bemesting en de ontwateringstoestand. Vervolgens is de denitrificatiesnelheid in de ondergrond vastgesteld. Met dit gegeven is uitgerekend na hoeveel jaren verblijftijd in de bodem de nitraatconcentratie tot nul is gedaald. Voor het merendeel van de situaties bleek dit 10 jaar of minder te zijn. Met de STRELIN-berekening kan nu de omvang van de bufferzone

worden vastgesteld, dat is het gebied waarvan het infiltrerende water binnen 10 jaar het te beschermen beekdal bereikt. In deze bufferzone dienen dus maatregelen te worden getroffen om de nitraatbelasting van het grondwater te verminderen.

5.3. Berekening van intrekgebieden rond pompstations

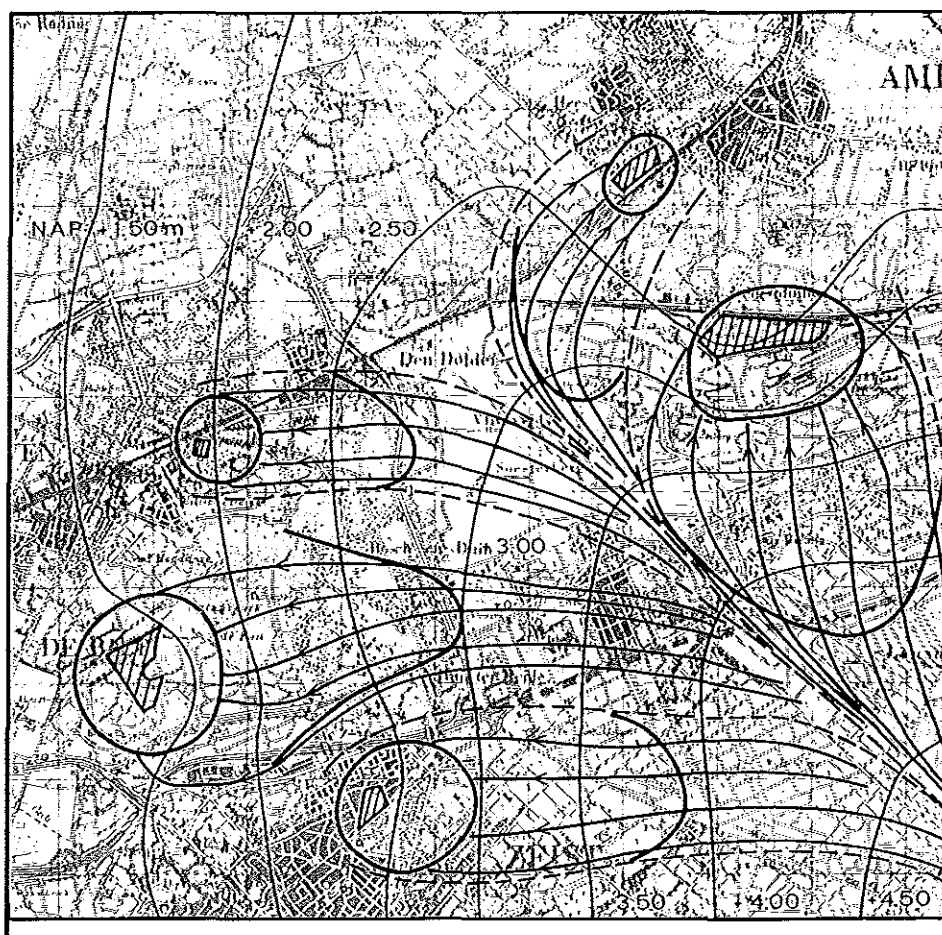
De verplaatsing van verontreinigende stoffen in het grondwater is vaak niet nauwkeurig te berekenen, omdat de interactieprocessen onvoldoende bekend zijn. Daarom wordt bij de vaststelling van beschermingszones rond waterwinplaatsen het effect van de interactieprocessen buiten beschouwing gelaten. Men volstaat hier met een berekening van het stroomlijnenpatroon om de herkomst van het water vast te stellen en een berekening van verblijftijden. Wat dit laatste betreft worden de beschermingszones vastgesteld als 10-jaars en 25-jaars zones. De combinatie van de modellen FLSTAT en FLOP (HEIJ et al., 1985) is goed bruikbaar voor dergelijke berekeningen. Een voorbeeld van een dergelijke berekening is gegeven in fig. 11.

Hierbij moet worden opgemerkt, dat de berekening van de stroombanen een orde nauwkeuriger is dan de berekening van de verblijftijden, waarbij immers meer parameters (o.a. doorlatendheid) een rol spelen. De aldus berekende omvang van het intrekgebied kan tevens worden gebruikt voor het kwantificeren van de belasting van het opgepompte water met verontreinigende stoffen afkomstig van bronnen met een diffuus karakter.

De bovenstaande berekening is bruikbaar voor winning van grondwater uit een freatisch pakket. In vele gevallen is echter boven het watervoerende pakket, waaruit gewonnen wordt, nog een afdekkend pakket aanwezig. In dat geval dient ook de verblijftijd in het afdekkende pakket in rekening te worden gebracht (zie VAN DEN AKKER en VAN WEENEN, 1986).

5.4. Hydrologische isolatie bij bodemsanering

Soortgelijke berekeningen omtrent het stroomlijnenverloop worden gebruikt voor hydrologische isolatie van verontreinigde lokaties of voor



LEGENDA

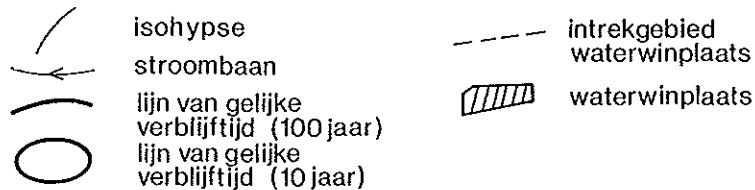


Fig. 11. Isohypsens, stroombanen, intrekgebieden en gemiddelde verblijftijden rond pompstations op de Utrechtse Heuvelrug, berekend met FLSTAT en FLOP (naar HEIJ et al., 1985)

de onttrekking van verontreinigd grondwater bij bodemsaneringen (BRUGGEMAN en SNELTING, 1985). Aan de hand van de berekeningen worden de lokatie van onttrekkingsputten en het te kiezen onttrekkingsdebiet vastgesteld. Bij in-situ reiniging van de bodem worden dan bovendien nog infiltratieputten aangelegd. Een berekening van het stroomlijnenpatroon geeft dan aan of de verontreinigingen volledig onderscheept kunnen worden en of een goede hydrologische isolatie ten opzichte van de omgeving wordt bereikt. Een voorbeeld van een berekening van de stroomlijnen rond injectie- en onttrekkingsputten is gegeven in fig. 12.

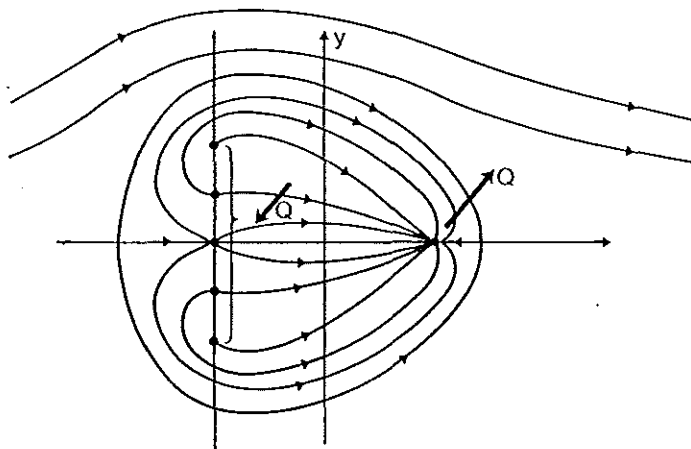


Fig. 12. Voorbeeld van berekening van stroomlijnen bij in-situ reiniging van een verontreinigde bodem, waarbij schoon water wordt geïnjecteerd via injectieputten terwijl het verontreinigde grondwater benedenstrooms wordt opgepompt via een onttrekkingsput (naar BRUGGEMAN en SNELTING, 1985)

Uit dit voorbeeld kan worden geconcludeerd dat het mogelijk is om met relatief eenvoudige middelen (putten en retourputten) een goede isolatie van een verontreiniging in een watervoerend pakket te realiseren en verdere verspreiding in de omgeving te voorkomen. Tegelijkertijd wordt hiermee ook de sanering in gang gezet aangezien het opgepompte water kan worden gereinigd en opnieuw kan worden gebruikt voor extractie van de verontreinigende stoffen. Een dergelijke sanering in-situ zal met name plaatsvinden op lokaties waar het onmogelijk of te duur is om de grond af te graven.

5.5. Concentratieverloop in het grondwater

In de hiervoor gegeven rekenvoorbeelden werden vooral de stroombanen, waarlangs de verontreiniging zich verplaatst, berekend. Alleen bij het voorbeeld in par. 5.1. wordt ook, zij het globaal, de concentratie in de stroombaan berekend. Voor een meer exacte berekening van de concentratie van de opgeloste stof in het grondwater is het nodig het effect van dispersie in rekening te brengen.

Als men rekening wil houden met het effect van dispersie, dan zijn in de meeste gevallen geen eenvoudige analytische oplossingen meer mogelijk, en zal men over moeten gaan naar numerieke computermodellen. Een relatief eenvoudig model (TRADE) wordt beschreven door ROEST en RIJTEMA (1983), waarbij de afstand is gediscrètiseerd in laagjes en per laagje een analytische oplossing wordt gegeven als functie van de tijd. De dispersie wordt in dit model geïntroduceerd als numerieke dispersie, omdat binnen de laagjes volledige menging wordt verondersteld. Deze numerieke dispersie neemt toe naarmate de gekozen laagdikte groter is. Door het model te ijken met meetgegevens kan de laagdikte zo worden gekozen dat de numerieke dispersie overeenkomt met de werkelijk optredende dispersie.

In fig. 13 zijn enkele voorbeelden gegeven van berekeningen met het TRADE-model. In dit geval zijn voor een aantal stoffen de doorbraakcurven

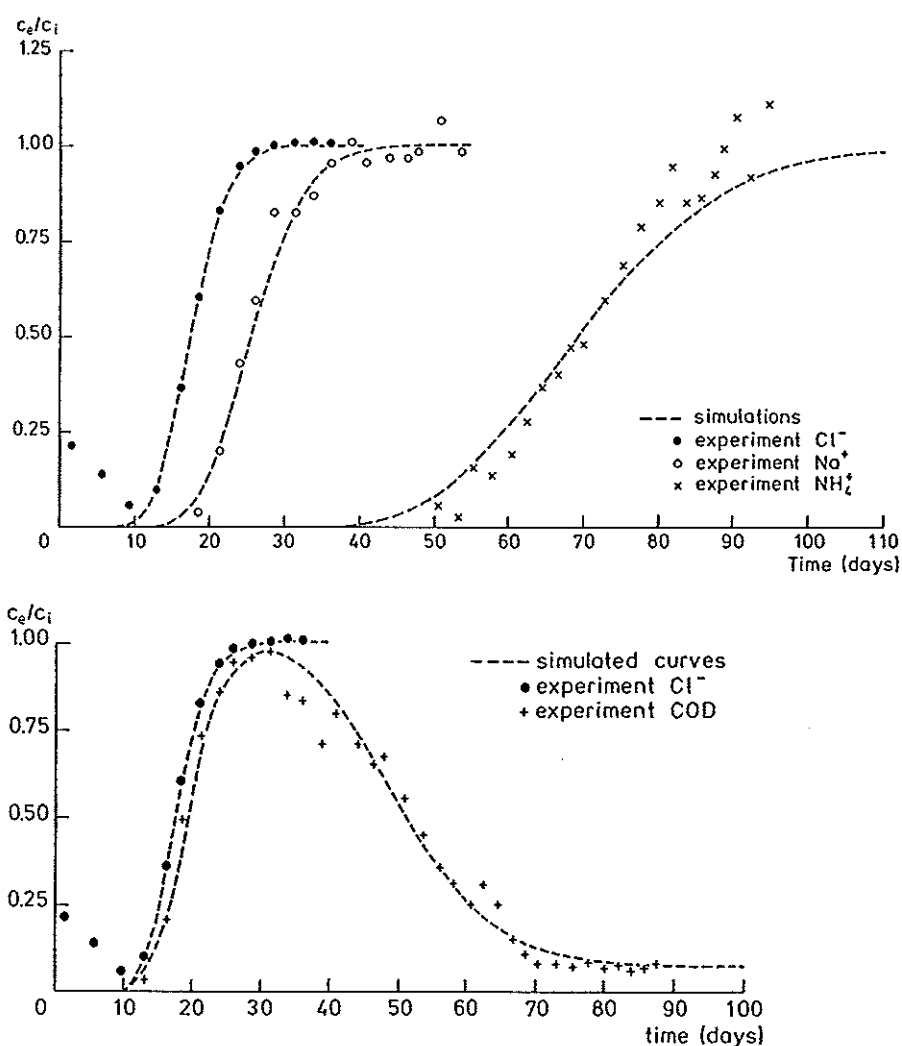


Fig. 13. Vergelijking van met TRADE berekende doorbraakcurven (ROEST en RIJTEMA, 1983) met meetgegevens van een grondkolom, die gevoed wordt met percolatiewater van een afvalstortplaats (naar HOEKS et al., 1979)

nodig zijn, waarmee het in principe mogelijk is om meer exacte voor-
spellingen van de concentraties te geven. Uiteraard moet dan ook de
grondwaterstroming zo exact mogelijk berekend worden. Vaak betekent
dit dat extra veld- en laboratoriumonderzoek nodig is om ontbrekende
parameters vast te stellen. De ruimtelijke variabiliteit van parame-
ters kan in stochastische modellen worden ingevoerd door per parameter
een kansverdeling met verwachtingswaarde en variantie op te geven. De
spreiding in de parameters wordt meegenomen bij de berekening waardoor
ook de spreiding in het eindresultaat wordt berekend. Voor de bere-
kende grootheden wordt dus ook een traject met verwachtingswaarde en
variantie opgegeven.

7. LITERATUUR

- ABDEL KHALIK, M.A. and F. BLÖMER, 1984. COMPLEX: a chemical equilibria computer model. Project Reuse Drainagewater, Report 2, ICW, Wageningen
- ADRIAANSE, P.I. en R.H. KEMMERS, 1988. Bufferzones tegen nitraatin-spoeling in beekdalen; methode om ligging en breedte vast te stellen. ICW-Rapport 27
- AKKER, C. VAN DEN, en R. VAN WEENEN, 1986. Verblijftijden en intrekgebieden bij winning van grondwater uit pakketten met semi-spanningswater. H2O 19: 66-70
- BERGHUIJS-VAN DIJK, J.T., 1985. WATBAL: a simple water balance model for a unsaturated/saturated soil profile. Nota ICW 1670, Wageningen
- BERGHUIJS-VAN DIJK, J.T., P.E.RIJTEMA en C.W.J.ROEST, 1985. ANIMO: Agricultural Nitrogen Model. Nota ICW 1671, Wageningen
- BOLT, G.H., 1985. Transport of solutes in soil: Basic features of front retardation. Wat.Sci.Tech. 17: 87-99
- BREEUWSMA, A., 1984. Fosfaathuishouding. PHLO-cursus "Waterkwaliteit landelijk gebied", okt/nov 1984, LU, Wageningen
- BRUGGEMAN, G.A., en H. SNELTING, 1985. Hydrologisch scherm als isolering van bodemverontreiniging. H2O 18: 186-192
- DUIVENBOODEN, W. VAN, 1980. De samenstelling van het in de Achterhoek gewonnen grondwater. RIVM, Bilthoven
- ERNST, L.F., 1973. De bepaling van de transporttijd van het grondwater bij stroming in de verzadigde zone. Nota ICW 755, Wageningen
- PEDDES, R.A., P.J.KOWALIK and H.ZARADNY, 1978. Simulation of field water use and crop yield. Simulation Monographs, Centre Agr. Publ. Doc., Wageningen
- GROENENDIJK, P., 1987. Onderzoek naar de effecten van wateraanvoer en peilveranderingen in agrarische gebieden op de waterkwaliteit in natuurgebieden. Deel 3. EPIDIM, een chemisch evenwichtsmo-
del met adsorptie, verwerking en neerslag van calciet. Nota ICW 1774, Wageningen

- GROENENDIJK, P., 1988. Onderzoek naar de effecten van wateraanvoer en peilveranderingen in agrarische gebieden op de waterkwaliteit in natuurgebieden. Deel 8. STRELIN, een computerprogramma voor de berekening van stroomlijnen, potentialen en verblijftijden. Nota ICW 1810, Wageningen
- HAAN, F.A.M. DE, 1984. Chemische processen. PHLO-cursus "Waterkwaliteit landelijk gebied", okt/nov 1984, LU, Wageningen
- HEIJ, G.J., M.J.H. PASTOORS en H. SNEELTING, 1985. De berekening van stroombanen en intrekgebieden in het gebied van de Utrechtse Heuvelrug. H2O 18: 182-185
- HOEKS, J., 1977a. Berekening van grondwaterverontreiniging bij puntbelastingen. Nota ICW 968, Wageningen.
- HOEKS, J., 1977b. Mobility of pollutants in soil and groundwater near waste disposal sites. Techn. Bull. ICW 105, Wageningen
- HOEKS, J., 1981. Analytical solutions for transport of conservative and non-conservative contaminants in groundwater systems. Water, Air and Soil Poll. 16: 339-350 (ook als Techn. Bull. n.s. ICW 2)
- HOEKS, J., 1983. Verzuring van bodem en grondwater als gevolg van atmosferische depositie. Nota ICW 1480, Wageningen
- HOEKS, J., D.BEKER and R.J.BORST, 1979. Soil column experiments with leachate from a waste tip. II. Behaviour of leachate components in soil and groundwater. Nota ICW 1131, Wageningen
- HOUX, N.W.H. en J.J.T.I. BOESTEN, 1984. Afbraak organische microverontreinigingen. PHLO-cursus "Waterkwaliteit landelijk gebied", okt/nov 1984, LU, Wageningen
- LEBBINK, G. en J. NEETESON, 1984. Koolstof- en stikstofhuishouding. PHLO-cursus "Waterkwaliteit landelijk gebied", okt/nov 1984, LU, Wageningen
- ROEST, C.W.J., and P.E.RIJTEMA, 1983. Analysis of a model for transport, adsorption and decomposition of solutes in the soil. Nota ICW 1404, Wageningen
- ROOY, N.M. DE, 1982. CHARON: a manual. Report R1310-11, WL, Delft