

DISPERSIE VAN FOSFATEN IN GROND

NOTA 58

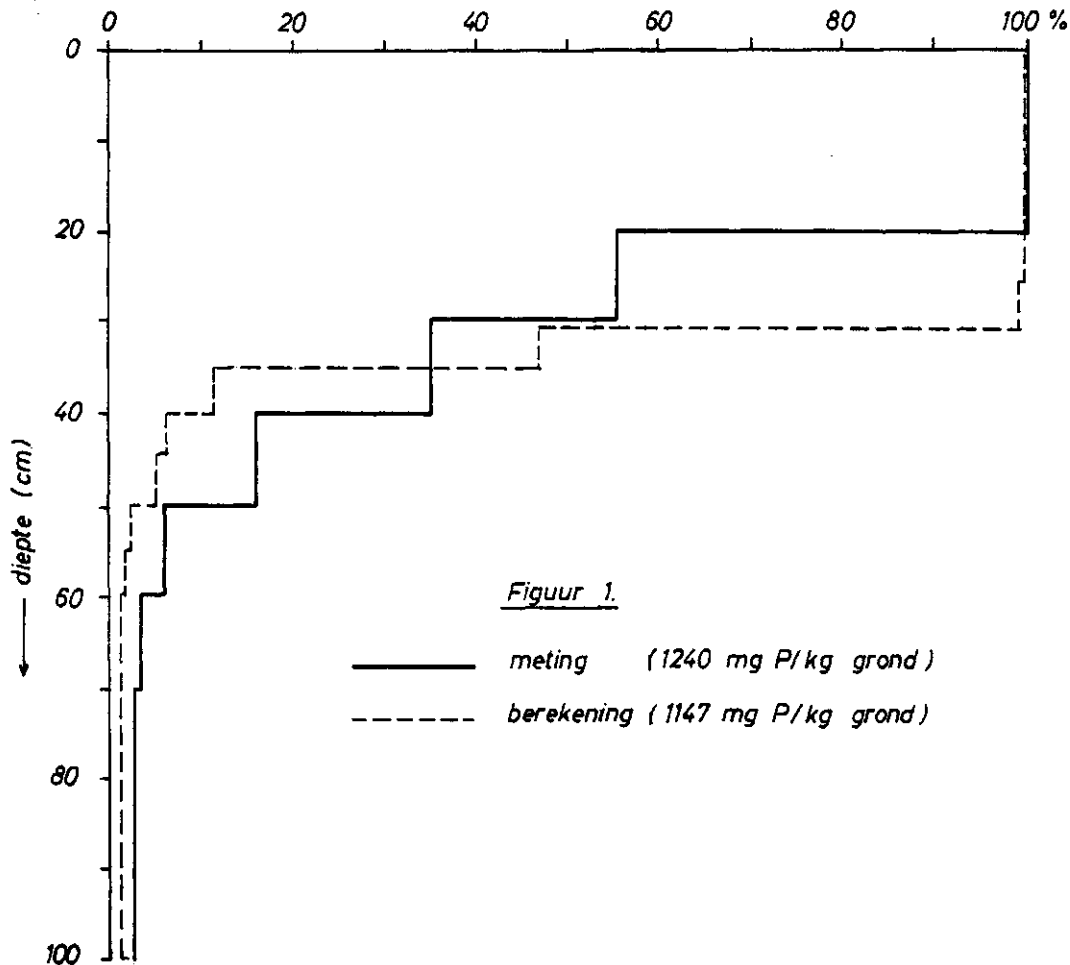
Laboratorium voor Hydraulica en
Afvoerhydrologie
Landbouwhogeschool, Wageningen
Juli 1982
Ir. J.H.G. Verhagen.

INHOUD

Bladzijde

1. INLEIDING	1
2. EEN EENVOUDIG MODEL VAN FOSFAATTRANSPORT IN GROND	3
3. PROBLEEMSTELLING	4
3.1. Benaderde probleemstelling	5
3.2. Modificatie van vergelijking (1)	5
3.3. Analytische oplossing	6
4. SAMENVATTING EN CONCLUSIES	13
5. TOEPASSING VAN HET GEVONDEN RESULTAAT OP EEN PRAKTIJK VOOR- BEELD	15
6. LITERATUUR	17

1. INLEIDING



Figuur 1 (uit Beek [1]) toont de verdeling van fosfaat over de diepte in de grond van een vloeiveld bij Tilburg, dat al een jaar of vijftig in gebruik is bij een rioolwaterbehandeling. Uitgezet is het percentage gebonden fosfaat ten opzichte van die in de bovenste laag.

J. Beek heeft in zijn proefschrift getiteld "Phosphate retention by soil in relation to waste disposal" in 1979 getracht genoemde verdeling te berekenen via een procesbeschrijvend transportmodel. Het resultaat van die berekening is eveneens weergegeven in figuur 1.

Het verschil tussen meting en berekening zit voornamelijk in de steilheid van het fosfaatprofiel. De meting vertoont een veel vlakker verloop dan het rekenresultaat. De grotere dispersie in de natuur werd door Beek [1] toegeschreven aan in-homogeniteiten in de grond (scheuren, bioperforatie, drains).

De grootte van de dispersie van een niet-passieve stof als fosfaat kan echter ook samenhangen met een combinatie van chemische en fysische factoren.

In dit rapport zal worden aangetoond dat bedoelde dispersie optreedt in die situaties, waarin sprake is van een met de tijd variërende verticale watersnelheid met een in het water opgeloste stof die een adsorptie/desorptie reactie met de grond ondergaat.

In het geval dat de tijdschaal van de adsorptie/desorptie reactie van gelijke grootte orde is als de tijdschaal in de verandering in watersnelheid, kan die dispersie aanzienlijk groter zijn dan de met de grondstructuur samenhangende hydrodynamische dispersie.

Aangetoond zal worden dat de lengteschaal van de dispersie in het laatste geval bepaald wordt door de weg die het water in de grond aflegt tijdens de natte periode, zolang die natte periode niet langer duurt dan de reactietijdschaal van de adsorptie.

Dit rapport is een uitvloeisel van een tezamen met J. Beek aangevatte studie in de jaren '78-'79. Doel van die oorspronkelijke studie was methoden te ontwikkelen om de rekentijd van Beek's fosfaatmodel te verkorten. Door het overlijden van Hans Beek is hieraan een voortijdig einde gekomen.

Een woord van dank aan Hans Beek voor zijn bijdrage aan deze studie is hier op zijn plaats. Als collega heb ik hem tijdens onze korte samenwerking zeer leren waarderen.

2. EEN EENVOUDIG MODEL VAN FOSFAATTRANSPORT IN GROND

Doel van het model is aan te tonen, dat bij een fluctuerende transportsnelheid en een adsorptiereactie met een reactiesnelheid van dezelfde grootte-orde als de tijdschaal in de variatie van de transportsnelheid, een dispersie optreedt die aanzienlijk groter kan zijn dan de hydrodynamische dispersie.

Om deze stelling duidelijk naar voren te halen, zullen we:

- a. de hydrodynamische dispersie verwaarlozen. Indien de uitkomst toch een dispersie vertoont, kan die dus niet worden veroorzaakt door fysische dispersie.
- b. een analytische oplossing na streven om numerieke dispersie te vermijden.
- c. de gevonden dispersie in de uitkomst vertalen naar een dispersie coëfficiënt om die vervolgens te vergelijken met gebruikelijke waarden voor een fysische dispersiecoëfficiënt.
- d. een zo groot mogelijke eenvoud te betrachten.

3. PROBLEEMSTELLING

Als processen in dit probleem worden uitsluitend beschouwd het fosfaattransportproces en het adsorptie/desorptie proces van fosfaat uit de oplossing aan de grond en omgekeerd.

De verandering per tijdseenheid in geadsorbeerd fosfaat wordt evenredig gesteld aan de afwijking uit het adsorptie evenwicht $A-\alpha c$, dus:

$$\frac{dA}{dt} = r(\alpha c - A) \quad (1)$$

waarin:	A = adsorptie van P aan grond	[mg P/kg grond]
	c = concentratie van opgelost P	[mg P/liter H ₂ O]
	α = adsorptiecoëfficiënt	[cm ³ H ₂ O/gr grond]
	r = snelheid van adsorptie/desorptie reactie	[dag ⁻¹]
	t = tijd	[dag]

Daar de toename van gebonden fosfaat per volume- en tijdseenheid gelijk is aan de onttrekking van opgelost fosfaat uit het bodemvocht per volume- en tijdseenheid kan de behoudswet van fosfaat voor een elementair volumedeeltje grond worden geschreven als:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{v}{n} \frac{\partial c}{\partial z} + \frac{b}{n} \frac{dA}{dt} = 0 \quad (2)$$

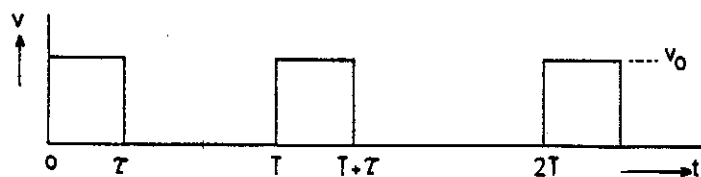
waarin:	v = transportsnelheid van het water boven de grond	[cm/dag]
	n = poriën volume	-
	b = bulkdensity	[gr grond/cm ³ grond]
	z = verticale coördinaat	[cm]

Merk op dat in bovenstaande formulering de hydrodynamische dispersie is verwaarloosd.

De transportsnelheid V wordt gedefinieerd als een periodieke functie van de tijd en wel als volgt:

$$\begin{aligned} v &= v_0 & \text{voor} & & nT \leq t < nT + \tau & & n = 0, 1, 2, \dots \\ v &= 0 & \text{voor} & & nT + \tau \leq t < (n+1)T & & n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (3)$$

Of grafisch voorgesteld:



We stellen $\tau = 0(1/r)$, d.w.z. de duur van de natte periode is van dezelfde grootte-orde als de tijdschaal van de adsorptie/desorptie reactie. We denken hierbij aan de orde-grootte van één dag. De periode T daarentegen is groot t.o.v.

τ . We denken daarbij bijvoorbeeld aan een aantal weken.

Omdat T dus ook de duur van de droge periode groot is t.o.v. τ zal aan het eind van de droge periode het adsorptie evenwicht al lang bereikt zijn, dus er geldt:

$$A(z, nT) = \alpha c(z, nT) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4)$$

Met gegeven begin- en randvoorwaarden is het gestelde probleem numeriek op te lossen. Omdat we het optreden van numerieke dispersie geheel willen vermijden zijn we aangewezen op numerieke integratie langs de karakteristieke richtingen $\frac{dz}{dt} = \frac{v}{n}$ en $\frac{dz}{dt} = 0$ (Door A te elimineren uit vergelijkingen (1) en (2) ontstaat namelijk een 2^e orde hyperbolische partiële differentiaalvergelijking met karakteristieke richtingen $\frac{dz}{dt} = \frac{v}{n}$ en $\frac{dz}{dt} = 0$).

Om didactische redenen prefereren we echter een analytische oplossing.

3.1. Benaderde probleemstelling

Het fosfaattransportprobleem in de gestelde vorm is analytisch niet oplosbaar. Daar we toch een analytische oplossing prefereren zullen we vergelijking (1) enigszins modificeren. Die modificatie wordt in de volgende paragraaf uiteengezet en het verschil met de exacte oplossing aangegeven.

3.2. Modificatie van vergelijking (1)

Vergelijking (1) is bij gegeven functie $c(z, t)$ gemakkelijk op te lossen. Met de beginconditie $A(z, 0) = \alpha c(z, 0)$ wordt die oplossing:

$$A(z, t) = \alpha e^{-rt} \left[r \int_0^t c(z, t') e^{rt'} dt' + c(z, 0) \right] \quad (5)$$

Om een indruk te krijgen over het verloop van $A(z, t)$ bij een willekeurige $c(z, t)$ beschouwen we het gedrag van (5) voor kleine respectievelijk grote waarden van rt dus voor $rt \ll 1$ en $rt \gg 1$.

Het gedrag voor $rt \ll 1$ is uit (5) af te leiden door voor $c(z, t)$ de Taylorreeks om het punt $z, 0$ in te vullen. Het gedrag van $A(z, t)$ wordt dan:

$$A(z, t) = \alpha c(z, 0) \left[1 + \frac{1}{2} rt^2 \frac{\partial c(z, 0)}{\partial t} + O(rt)^3 \right] \quad (6)$$

Dus de afwijking van $A(z, t)$ met zijn beginwaarde is voor kleine waarden van rt evenredig met $(rt)^2$. Het gedrag van $A(z, t)$ voor $rt \gg 1$ is eveneens uit (5) af te leiden. Eenvoudiger is het echter om in dat geval uit te gaan van de oorspronkelijke differentiaalvergelijking (1).

We schrijven:

$$A(z, t+1/r) = A(z, t) + 1/r \frac{dA(z, t)}{dt} + O\left(\frac{1}{rt}\right)^2$$

Dit gesubstitueerd in (1) geeft:

$$\begin{aligned} \frac{dA(z,t)}{dt} &= r(\alpha c(z,t) - A(z,t+1/r)) - \frac{dA(z,t)}{dt} + O\left(\frac{1}{rt}\right)^2 \\ \text{of } A(z,t+1/r) &= \alpha c(z,t) + O\left(\frac{1}{rt}\right)^2 \\ \text{dus: } A(z,t) &= \alpha c(z,t-1/r) + O\left(\frac{z}{rt}\right)^2 \end{aligned} \quad (7)$$

(N.B.: Formeel geldt bovenstaande benadering slechts wanneer de variatiesnelheid in c , gedefinieerd als $\frac{1}{c} \frac{\partial c}{\partial t}$, klein is t.o.v. de reactiesnelheid r).

We maken nu de volgende benadering in de probleemstelling.

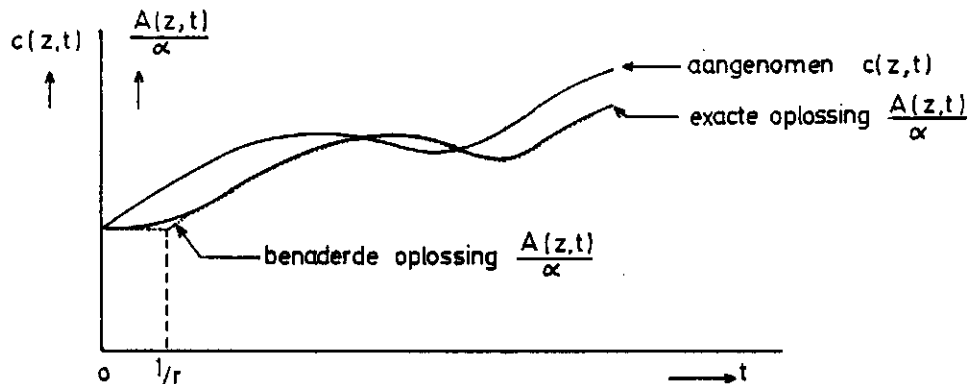
In plaats van vergelijking (1) schrijven we voor $0 < t < 1/r$:

$$A(z,t) = \alpha c(z,0)$$

en voor $t > 1/r$:

$$A(z,t) = \alpha c(z,t-1/r)$$

Zoals uit onderstaande grafiek is te zien is het verschil tussen benaderde en oorspronkelijke formulering niet groot.



Omdat $v(t)$ gedefinieerd is als een periodieke functie van t met periode T , geldt bovenstaande benadering voor iedere periode T , dus:

$$\begin{aligned} \text{voor } nT < t < nT+1/r \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad & A(z,t) = \alpha c(z,nT) \\ \text{en voor } nT+1/r < t < (n+1)T \quad & A(z,t) = \alpha c(z,t-1/r) \end{aligned} \quad (8)$$

Vergelijking (8) en (2) vormen tezamen de benaderde probleemstelling die nu analytisch oplosbaar is.

3.3. De analytische oplossing

Beschouw twee gevallen:

Geval I : de duur van de natte periode τ is kleiner dan $1/r$

Geval II: de duur van de natte periode τ is groter dan $1/r$, maar kleiner dan $2/r$

dus, $1/r < \tau < 2/r$.

Uitbreiding van het aantal gevallen voor nog grotere waarden van τ is mogelijk maar niet nodig voor het doel van deze notitie.

A. Geval I

De duur van de natte periode korter dan de tijdschaal van de adsorptie-reactie:

$$0 < \tau < 1/r \quad \text{of} \quad 0 < r\tau < 1.$$

Beschouw de eerste bevoeiingscyclus $0 < t < T$. Volgens (8) geldt in de eerste natte periode:

$$A(z,t) = \alpha c(z,0), \quad \text{dus} \quad \frac{dA(z,t)}{dt} = 0$$

en vergelijking (2) wordt:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{v_0}{n} \frac{\partial c}{\partial z} = 0$$

met als oplossing: $c(z,t) = c(z - \frac{v_0}{n}t)$.

Met een gegeven beginwaarde $c(z,0) = F(z)$ is dus de oplossing voor $0 < t < \tau$:

$$c(z,t) = F(z - \frac{v_0}{n}t) \quad (9)$$

In de daaropvolgende droge periode $\tau < t < T$ is $v = 0$ en reduceert vergelijking (2) tot:

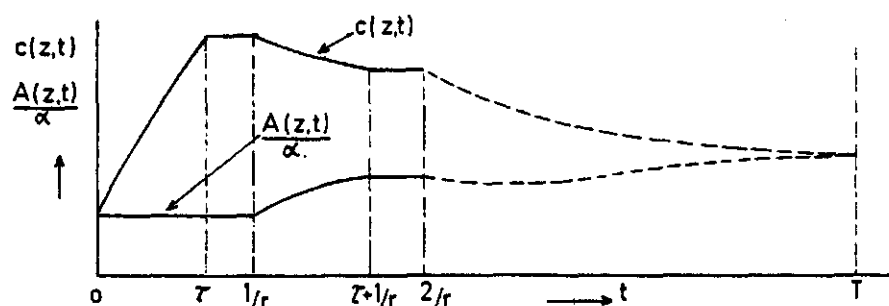
$$\frac{\partial}{\partial t} (c + \frac{b}{n} A) = 0.$$

Uiteraard is dit allemaal gemakkelijk op te lossen, maar de volledige oplossing van het probleem is voor ons doel niet interessant. Wat ons in een praktisch probleem in de eerste plaats interesseert is de oplossing gemiddeld over lange termijn, d.w.z. lang ten opzichte van de periode T . Het enige belangrijke aspect van de oplossing in de droge periode is dan dat aan het eind van de droge periode volgens (4) geldt:

$$A(z,T) = \alpha c(z,T),$$

omdat immers gegeven was dat $T \gg 1/r$.

Het gedrag van de oplossing voor een bepaalde waarde van z zou er dus in geval I als volgt uit kunnen zien:

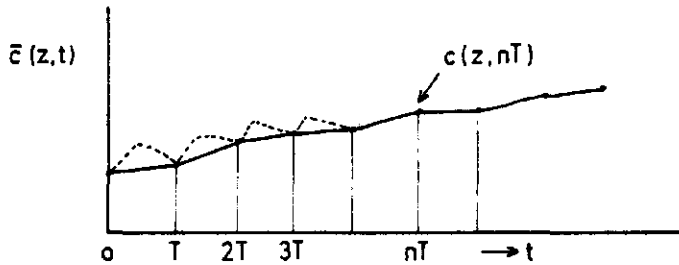


Zoals gezegd zijn we slechts geïnteresseerd in het verloop van $c(z,t)$ op een tijdschaal groot t.o.v. T . In feite zijn we dus geïnteresseerd in een andere

functie $\bar{c}(z,t)$ waarvan de kermerken zijn, dat die gaat door de punten $c(z,nT)$ met $n = 0, 1, 2, \dots$ en daar tussen in een glad, bijvoorbeeld lineair verloop heeft. Dus de functie $\bar{c}(z,t)$ is gedefinieerd als:

$$\bar{c}(z,t) = c(z,nT) + \frac{t-nT}{T} [c(z,(n+1)T) - c(z,nT)] \quad (10)$$

voor $nT < t < (n+1)T$ en $n = 0, 1, \dots$



We proberen nu uit het gestelde probleem een vergelijking af te leiden die geldt voor de functie $\bar{c}(z,t)$, waarnaar onze interesse uitgaat.

Daartoe integreren we vergelijking (2) over de tijd gedurende één bevoelingscyclus T . Nemen we gemakshalve de eerste cyclus, dan krijgen we gebruikmakend van de conditie $v = 0$ voor $\tau < t < T$

$$\int_0^T \left(\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{b}{n} \frac{dA}{dt} \right) dt + \frac{v_0}{n} \int_0^T \frac{\partial c}{\partial x} dt = 0$$

$$c(z,T) - c(z,0) + \frac{b}{n} (A(z,T) - A(z,0)) + \frac{v_0}{n} \int_0^T \frac{\partial c}{\partial x} dt = 0$$

Met het gegeven dat $A(z,nT)$ gelijk is aan $\alpha c(z,nT)$ wordt dit:

$$\left(1 + \frac{\alpha b}{n}\right) [c(z,T) - c(z,0)] + \frac{v_0}{n} \int_0^T \frac{\partial c}{\partial x} dt = 0 \quad (11)$$

Substitutie van (10) in (11) geeft:

$$\frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial t} + \frac{v_0}{nT} \frac{1}{1 + \frac{\alpha b}{n}} \int_0^T \frac{c}{z} dt = 0 \quad (12)$$

De integraal in de tweede term is:

$$\int_0^T \frac{\partial c}{\partial z} dt = \int_0^T \frac{d}{dz} F\left(z - \frac{v_0}{n} t\right) dt = -\frac{n}{v_0} \int_z^{z - \frac{v_0}{n} T} \frac{d}{dz} F\left(z - \frac{v_0}{n} t\right) d\left(z - \frac{v_0}{n} t\right) =$$

$$= -\frac{n}{v_0} \left\{ F\left(z - \frac{v_0}{n} T\right) - F(z) \right\}$$

dus (12) wordt:

$$\frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial t} + \frac{1/T}{1 + \frac{\alpha b}{n}} \left\{ F(z) - F\left(z - \frac{v_0}{n} T\right) \right\} = 0.$$

Nu is $F(z) - F\left(z - \frac{v_0}{n} T\right) = c(z,0) - c\left(z - \frac{v_0}{n} T, 0\right) = \bar{c}(z,0) - \bar{c}\left(z - \frac{v_0}{n} T, 0\right)$

Algemeen geldt dan voor de gezochte functie $\bar{c}(z,t)$:

$$\frac{\partial \bar{c}(z, t)}{\partial t} + \frac{1/T}{1 + \frac{\alpha b}{n}} \left\{ \bar{c}(z, nT) - \bar{c}\left(z - \frac{v_0}{n} \tau, nT\right) \right\} = 0 \quad (13)$$

voor $nT < t < (n+1)T$

De vraag in deze notitie gesteld is: bezit deze oplossing een dispersief karakter te beschrijven met behulp van een dispersiecoëfficiënt en zo ja, hoe groot is dan die dispersiecoëfficiënt?

Om deze vraag te kunnen beantwoorden beschouwen we het geval dat $\frac{v_0 \tau}{n}$ klein is t.o.v. de karakteristieke lengteschaal l_c , waarover c varieert. Dan geldt:

$$\bar{c}(z, nT) - \bar{c}\left(z - \frac{v_0}{n} \tau, nT\right) = \frac{v_0 \tau}{n} \frac{\partial \bar{c}(z, nT)}{\partial z} - \frac{1}{2} \left(\frac{v_0}{n} \tau\right)^2 \frac{\partial^2 \bar{c}(z, nT)}{\partial z^2}$$

Dit ingevuld in (13) geeft:

$$\frac{\partial \tau}{\partial t} + \frac{v_0 \tau / nT}{1 + \alpha b / n} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \frac{\frac{1}{2} v_0 \tau / n \cdot v_0 \tau / nT}{1 + \alpha b / n} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} = 0$$

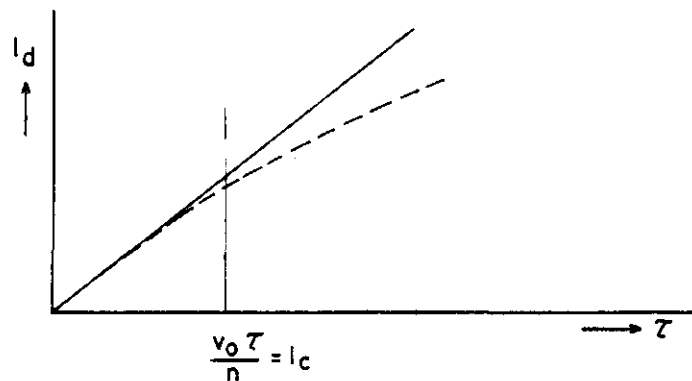
of met de notatie:

$$\bar{v} = \frac{v_0 \tau / nT}{1 + \alpha b / n} \quad \text{en} \quad \frac{1}{2} \frac{v_0 \tau}{n} = l_d \quad \text{wordt dit:} \quad (14)$$

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - l_d \bar{v} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} = 0$$

We zien dus dat het tijdsgemiddelde fosfaatprofiel $\bar{c}(z, t)$ zich verplaatst in z -richting met een snelheid \bar{v} en afvlakt door dispersie, waarbij de dispersiecoëfficiënt D gelijk is aan $\bar{v} \cdot l_d$. Hierbij is l_d op te vatten als een lengteschaal waarover de verticale uitwisseling plaatsvindt. De grootte van l_d is:

$$l_d = \frac{1}{2} \frac{v_0 \tau}{n} \quad \text{zolang} \quad \frac{v_0 \tau}{n} < l_c \quad \text{en} \quad 0 < \tau < 1/r \quad (15)$$



Conclusie:

De oplossing vertoont dus inderdaad een dispersief karakter, dat voor kleine waarde van τ ($\tau < \frac{n l_c}{v_0}$) overgaat in een zuivere dispersie met dispersiecoëfficiënt $\bar{v} l_d$, waarin $l_d = \frac{1}{2} \frac{v_0 \tau}{n}$.

B. Geval II

De duur van de natte periode ligt tussen $1/r$ en $2/r$, dus $1 < r\tau < 2$.

In dit geval wordt de oplossing van het probleem in de natte periode voor twee tijdsintervallen afzonderlijk bekeken en wel voor: $0 < t < 1/r$ en voor $1/r < t < \tau$. Voor $0 < t < 1/r$ geldt volgens (8):

$$A(z, t) = \alpha c(z, t)$$

De oplossing is analoog aan geval I, dus:

$$c(z, t) = F\left(z - \frac{v_0 t}{n}\right) \text{ voor } 0 < t < 1/r, \text{ met in het bijzonder:} \quad (16)$$

$$c(z, 1/r) = F\left(z - \frac{v_0}{nr}\right).$$

In het tijdsinterval $1/r < \tau < 2/r$ geldt volgens (8):

$$A(z, t) = \alpha c(z, t - 1/r), \text{ dus:}$$

$$\frac{dA(z, t)}{dt} = \alpha \frac{d}{dt} F\left(z - \frac{v_0 t}{n} + \frac{v_0}{nr}\right) = -\frac{\alpha v_0}{n} \left(\frac{dF}{dz}\right)_{z - \frac{v_0 t}{n} + \frac{v_0}{nr}}$$

Vergelijking (2) wordt daarmee:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{v_0}{n} \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\alpha b}{n} \frac{v_0}{n} \left(\frac{dF}{dz}\right)_{z - \frac{v_0 t}{n} + \frac{v_0}{nr}} \quad (17)$$

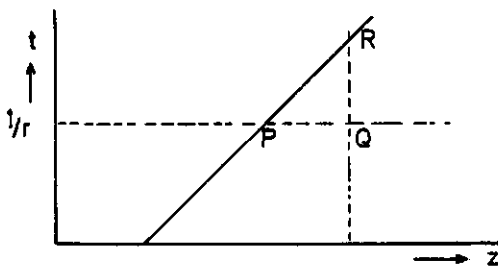
Dit is een hyperbolische differentiaalvergelijking. De karakteristieken hebben de richtingscoëfficiënt $\frac{dz}{dt} = \frac{v_0}{n}$

Langs die karakteristieken geldt:

$$\frac{dc}{k} = \frac{dz}{v_0/n} = dt \quad (18)$$

waarin:

$$k = \frac{\alpha b}{n} \frac{v_0}{n} \left(\frac{dF}{dz}\right)_{z - \frac{v_0 t}{n} + \frac{v_0}{nr}}$$



Integratie van (18) langs de karakteristiek van P tot R geeft:

$$\int_P^R dc = \frac{n}{v_0} \int_P^Q k dz = \frac{\alpha b}{n} \int_P^Q \left(\frac{dF}{dz}\right)_P dz$$

$$\text{dus: } c_R - c_P = \frac{\alpha b}{n} \left(\frac{dF}{dz}\right)_P (z_Q - z_P) = \frac{\alpha b}{n} \left(\frac{dF}{dz}\right)_P \frac{v_0}{n} (t - 1/r)$$

waarin: $c_P = c\left(z - \frac{v_0 t}{n} + \frac{v_0}{nr}, 1/r\right)$ hetgeen volgens (16) ook te schrijven is als:

$$c_P = F\left(z - \frac{v_0 t}{n}\right),$$

dus voor $1/r < t < 2/r$ geldt:

$$c(z, t) = F\left(z - \frac{v_0 t}{n}\right) + \frac{\alpha b}{n} \left(\frac{dF}{dz}\right)_P \frac{v_0}{n} (t-1/r) \quad (19)$$

Substitutie van de oplossing (19) en (16) in vergelijking (12) geeft:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{v_0/nT}{1+\alpha b/n} \left[\int_0^\tau \left(\frac{dF}{dz}\right)_{z-v_0 t/n} dt + \int_{1/r}^\tau \frac{\alpha b}{n} \frac{v_0}{n} (t-1/r) \left(\frac{d^2 F}{dz^2}\right)_P dt \right] = 0$$

Uitwerking van de eerste integraal geeft:

$$\frac{n}{v_0} F\left(z - \frac{v_0 t}{n}\right) \Big|_0^\tau = \frac{n}{v_0} \left\{ F(z) - F\left(z - \frac{v_0 \tau}{n}\right) \right\}$$

De tweede integraal partiëel integreren geeft:

$$\begin{aligned} & - \frac{\alpha b}{n} (t-1/r) \left(\frac{dF}{dz}\right)_{z_P} \Big|_{1/r}^\tau + \frac{\alpha b}{n} \frac{n}{v_0} \int_{1/r}^\tau \left(\frac{dF}{dz}\right)_{z_P} d\frac{v_0}{n} (t-1/r) = \\ & = - \frac{\alpha b}{n} (\tau-1/r) \left(\frac{dF}{dz}\right)_{z-\frac{v_0 \tau}{n} + \frac{v_0}{nr}} + \frac{v_0}{nr} - \frac{\alpha b}{n} \frac{n}{v_0} \left\{ F\left(z - \frac{v_0 \tau}{n} + \frac{v_0}{nr}\right) - F(z) \right\} \end{aligned}$$

De vergelijking voor \bar{c} in het interval $0 < t < T$ wordt dus:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{1/T}{1+\alpha b/n} \left\{ F(z) - F\left(z - \frac{v_0 \tau}{n}\right) - \frac{\alpha b}{n} \frac{v_0}{n} (\tau-1/r) \left(\frac{dF}{dz}\right)_{z-\frac{v_0 \tau}{n} + \frac{v_0}{nr}} \right. \\ \left. - \frac{\alpha b}{n} \left\{ F\left(z - \frac{v_0 \tau}{n} + \frac{v_0}{nr}\right) - F(z) \right\} \right\} = 0 \end{aligned}$$

Analoog aan geval I (vergelijking (13)) geldt dus in ieder interval

$nT < t < (n+1)T$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}(z, t)}{\partial t} + \frac{1/T}{1+\frac{\alpha b}{n}} \left\{ \bar{c}(z, nT) - \bar{c}\left(z - \frac{v_0 \tau}{n}, nT\right) - \frac{\alpha b}{n} \frac{v_0}{n} (\tau-1/r) \right. \\ \left. \cdot \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}\left(z - \frac{v_0 \tau}{n} + \frac{v_0}{nr}, nT\right) - \frac{\alpha b}{n} \left\{ \bar{c}\left(z - \frac{v_0 \tau}{n} + \frac{v_0}{nr}, nT\right) - \bar{c}(z, nT) \right\} \right\} = 0 \end{aligned} \quad (20)$$

Vergelijking (20) is wat gecompliceerder dan vergelijking (13). Om aan te kunnen tonen dat vergelijking (20) eveneens een dispersieachtig karakter bezit beschouwen we het geval dat $\frac{v_0 \tau}{n}$ klein is t.o.v. de karakteristieke lengte schaal l_c van een verandering in $\bar{c}(z, t)$.

In dat geval zijn $\bar{c}\left(z - \frac{v_0 \tau}{n}, nT\right)$, $\frac{d\bar{c}}{dz}\left(z - \frac{v_0 \tau}{n} + \frac{v_0}{nr}, nT\right)$ en $\bar{c}\left(z - \frac{v_0 \tau}{n} + \frac{v_0}{nr}, nT\right)$ te ontwikkelen in Taylorreeksen om z, nT .

Substitutie ervan in vergelijking (20) geeft:

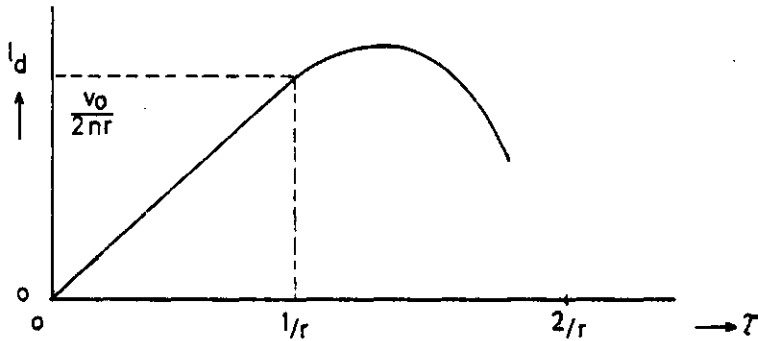
$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\frac{v_0}{nT} \tau}{1+\frac{\alpha b}{n}} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \frac{\frac{v_0^2 \tau^2}{2n^2 T^2}}{1+\frac{\alpha b}{n}} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} \left(1 - \frac{\alpha b}{n} \left(1 - \frac{1}{r\tau}\right)^2\right) = 0$$

of met de reeds ingevoerde notatie wordt dit:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - l_{d2} \bar{v} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} = 0 \quad (21)$$

waarin: $l_{d2} = \frac{1}{2} \frac{v_0 \tau}{n} \left(1 + \frac{\alpha b}{n} \left(1 - \frac{1}{r\tau}\right)^2\right)$

We zien dus dat voor geval II, waarin $1/r < \tau < 2/r$ een analoge situatie optreedt als in geval I met dit verschil dat nu de dispersielengte l_{d2} weer afneemt met $r\tau$. De informatie uit geval I en II samengevoegd is in onderstaande figuur weer-gegeven.

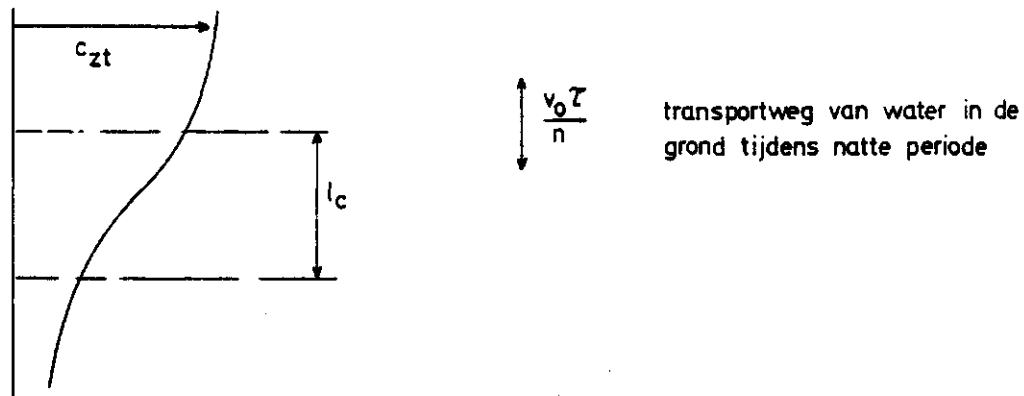


De conditie $\frac{v_0 \tau}{n}$ klein t.o.v. l_c is weinig algemeen. Immers $\frac{v_0 \tau}{n}$ kan in geval II niet kleiner worden dan $\frac{v_0}{nr}$.

Conclusie: Een zuivere dispersie wordt in geval II in het algemeen niet bereikt. Wel vertoont de oplossing een dispersieachtig karakter met een dispersie coëfficiënt die afneemt naarmate τ groter wordt. De maximale dispersiecoëfficiënt treedt op voor τ iets groter dan $1/r$ en heeft de orde grootte $\bar{v} \approx \frac{v_0}{nr}$.

4. SAMENVATTING EN CONCLUSIES

- A. Ondanks het verwaarlozen van de fysische dispersie is er in dit transportprobleem, waarin gekeken wordt naar gemiddelde transporten over perioden groot t.o.v. T , sprake van dispersieachtige kenmerken.
- B. Het dispersieachtig gedrag in het transport is te benaderen met een zuiver dispersief transport gedefinieerd als $D \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}$. De benadering is beter naarmate $\frac{v_0 \tau}{n}$ kleiner is t.o.v. l_c , d.w.z. naarmate de transportweg van het water in de grond tijdens de natte periode kleiner is t.o.v. de karakteristieke lengte l_c , waarover c verandert.



- C. De dispersiecoëfficiënt als hierboven bedoeld is te schrijven als \bar{v} maal l_d , waarbij \bar{v} de gemiddelde snelheid is in de periode $nT < t < (n+1)T$, waarmee het (tijdsgemiddelde) fosfaatprofiel zich naar beneden verplaatst. De dispersielengte l_d is bij benadering gelijk aan $\frac{1}{2} \frac{v_0 \tau}{n}$, indien $\tau < 1/r$ en bij benadering gelijk aan $\frac{1}{2} \frac{v_0 \tau}{n} \left(1 - \frac{ab}{n} \left(1 - \frac{1}{r\tau}\right)^2\right)$ voor $1/r < \tau < 2/r$. De dispersielengteschaal l_d is dus min of meer evenredig met de transportweg van het water in de grond tijdens de natte periode, althans wanneer τ niet te groot is.
- D. De fysische dispersiecoëfficiënt is eveneens te schrijven als $\bar{v}l$. De grootheid l is een lengtemaat voor de korrelstructuur in de grond. Een gebruikelijke waarde voor l is 2 à 3 cm. De chemisch/fysische dispersiecoëfficiënt is $\bar{v}l_d$. Voor de duur van de natte periode ongeveer gelijk aan $1/r$ is $l_d \approx \frac{1}{2} \frac{v_0}{nr}$. Nu is een gebruikelijke waarde van de adsorptie snelheid $r \approx 2/3$ dag⁻¹, terwijl v_0 in bijvoorbeeld een vloeiveld 10-30 cm/dag bedraagt. Bij een poriënvolume van 0,5 wordt l_d ca. 15-45 cm, hetgeen aanzienlijk groter is dan de fysische dispersielengte.
- E. Tenslotte kan nog geconcludeerd worden dat de gemiddelde snelheid \bar{v} onafhankelijk blijkt van de snelheid van de adsorptie reactie. De snelheid \bar{v} is gelijk aan de gemiddelde snelheid van het water in de grond $\frac{v_0 \tau}{nT}$ in een periode,

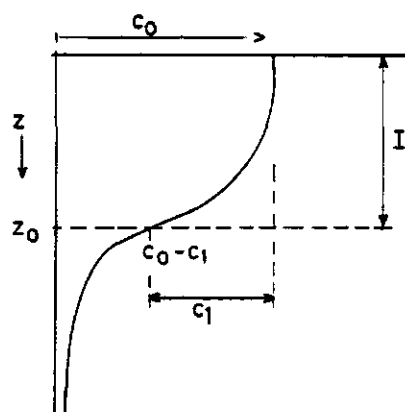
gedeeld door de retardatiefactor $(1 + \frac{\alpha b}{n})$. Zoals bekend is de retardatiefactor de verhouding tussen watertransportsnelheid en stoftransportsnelheid in de grond bij een oneindig grote reactiesnelheid.

5. TOEPASSING VAN HET GEVONDEN RESULTAAT OP EEN PRAKTIJK VOORBEELD

Als praktijksituatie kiezen we het in de inleiding genoemde vloeiveld van Tilburg. Zie Beek [1]. Het fosfaatprofiel in de grond ziet er uit als weergegeven in nevenstaande figuur.

In het bovenste deel van het profiel is verzadiging in de fosfaatneerslag opgetreden. We duiden deze grondlaag aan als gebied I, gelegen tussen $0 < z < z_0$, waarbij z_0 het buigpunt in het fosfaatprofiel is.

In gebied I is er dus slechts een uitwisseling tussen opgelost en geadsorbeerd fosfaat zoals in deze notitie behandeld.



Alleen tijdsgemiddelde grootheden (over perioden $\geq T$) worden beschouwd. Na voldoende lange tijd vanaf het begin van de bevoeding (zeg na een aantal jaren) zal het fosfaatprofiel niet meer van vorm veranderen. Het profiel zal zich dan met een bepaalde snelheid u naar beneden verplaatsen. In een met het profiel meebewegend assenstelsel zal in gebied I, waarin immers geen fosfaat verdwijnt door neerslag, het fosfaattransport dus onafhankelijk zijn van de plaats $\zeta = z - ut$ en de tijd t . Er moet dus gelden in gebied I:

$$\bar{v} \cdot \bar{c}(\zeta, t) - \bar{D} \frac{\partial \bar{c}(\zeta, t)}{\partial \zeta} = \text{constant} = \bar{v} \cdot \bar{c}_0.$$

Hieruit volgt:

$$c = c_0 - c_1 e^{\frac{\bar{v}-u}{D}(z-z_0)} \quad (22)$$

waarbij gebruik gemaakt is van de randconditie $c = c_0 - c_1$ voor $z = z_0$.

De snelheid u , waarmee het profiel naar beneden zakt is voor het Tilburgse vloeiveld bijzonder klein. Dit volgt al direct uit het gegeven dat na een aantal decennia het fosfaatfront nog niet verder dan een 30 cm is gezakt. Uit een P-balans is u te berekenen en blijkt ongeveer $4 \cdot 10^{-3}$ cm/dag te bedragen.

De snelheid \bar{v} , waarmee het fosfaatprofiel in gebied I zich verplaatst, wanneer er geen dispersie was is volgens deze notitie gelijk aan:

$$\frac{v_0 \tau / nT}{1 + \alpha b / n}$$

Met de waarden voor de parameters als opgegeven door Beek [1] (te weten $v_0 \tau = 20$ cm/dag; $n = 0,525$ cc H_2O /cc grond; $T = 36,5$ dag; $\alpha = 16$ cc H_2O /gram grond; $b = 1,2$ gram grond/cc grond) wordt $\bar{v} = 0,03$ cm/dag.

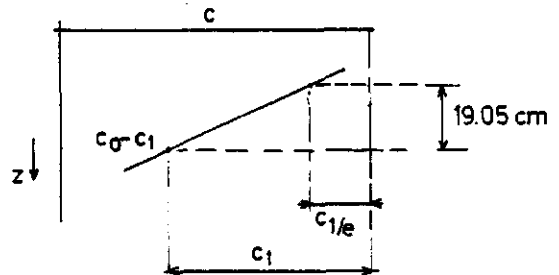
Verwaarlozen we u t.o.v. \bar{v} in vergelijking (22), dan wordt

$$c = c_0 - c_1 e^{-\frac{z-z_0}{l_d}}$$

waarbij voor D de waarde $\bar{v}l_d$ is gesubstitueerd.

Nu zou l_d volgens de voorgaande theorie afhankelijk zijn van τ en r . Voor $\tau = 1$ dag en $v_0 = 20$ cm/dag is $\tau < 1/r$ en daarmee l_d onafhankelijk van r en gelijk aan $l_d = \frac{1}{2} \frac{v_0 \tau}{n} = 19,05$ cm.

Nevenstaande figuur toont dit berekende resultaat in vergelijking met het meetgegeven. Het berekende fosfaat profiel heeft een minder sterke gradiënt dan het gemeten profiel. Het verschil is ca. een factor 2.



J. Beek berekende in zijn proefschrift

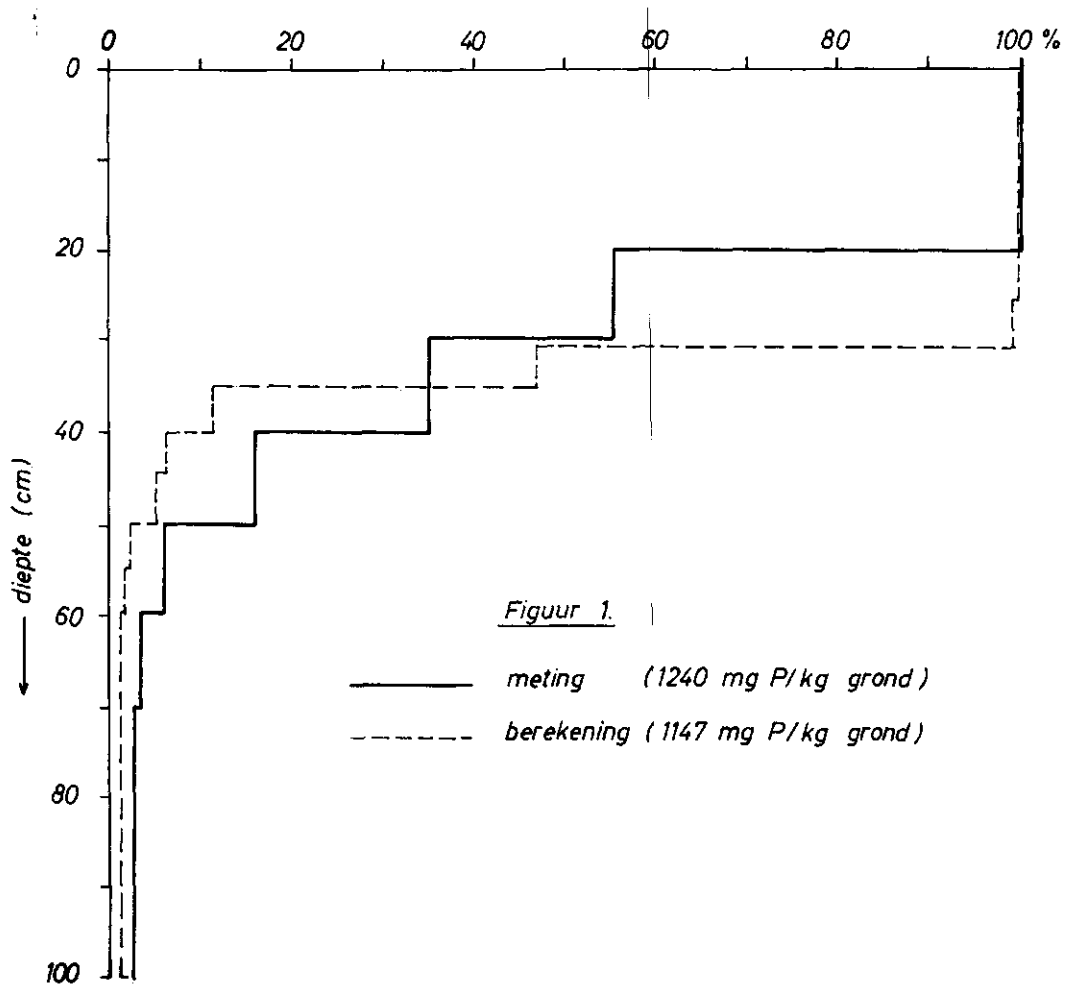
juist een steilere fosfaatgradiënt dan gemeten (ca. 3 maal te steil). Het verschil zit erin dat Beek naast een langzame P-adsorptie ook nog een snelle P-adsorptie introduceerde. Wat uit dit vergelijk tussen theorie en meetgegeven blijkt is dat de gemeten P gradiënt niet alleen verklaart kan worden door een hogere hydrodynamische dispersie t.g.v. bodeminhomogeniteiten, zoals Beek deed, maar ook door een geringere bijdrage van de snel-adsorberende fractie in P_{totaal} (Niet alle opgeloste P adsorbeert even snel als ortho-P).

De in deze notitie geschetste benaderingsmethode kan ook worden toegepast op het meer uitgebreide model als door Beek ontwikkeld. De methode is bijzonder geschikt als voorbereiding bij een numerieke probleemoplossing. Immers via deze benadering wordt een gediscretiseerd model verkregen, waarbij de keuze van plaats en tijdstip niet vrij is maar bepaald wordt door fysische overwegingen (zie vergelijkingen 13 en 20).

Omdat de fysische overwegingen als startpunt de bestudering van lange termijn effecten hebben, zijn de daaruit voortvloeiende criteria over stapgrootte aangepast aan deze schaal.

De rekentijd van een programma van een op de geschetste wijze voorbereikt probleem zal een fractie bedragen van een overeenkomstig niet voorbereikt probleem.

1. INLEIDING



Figuur 1 (uit Beek [1]) toont de verdeling van fosfaat over de diepte in de grond van een vloeiveld bij Tilburg, dat al een jaar of vijftig in gebruik is bij een rioolwaterbehandeling. Uitgezet is het percentage gebonden fosfaat ten opzichte van die in de bovenste laag.

J. Beek heeft in zijn proefschrift getiteld "Phosphate retention by soil in relation to waste disposal" in 1979 getracht genoemde verdeling te berekenen via een procesbeschrijvend transportmodel. Het resultaat van die berekening is eveneens weergegeven in figuur 1.

Het verschil tussen meting en berekening zit voornamelijk in de steilheid van het fosfaatprofiel. De meting vertoont een veel vlakker verloop dan het rekenresultaat. De grotere dispersie in de natuur werd door Beek [1] toegeschreven aan in-homogeniteiten in de grond (scheuren, bioperforatie, drains).

3. PROBLEEMSTELLING

Als processen in dit probleem worden uitsluitend beschouwd het fosfaattransportproces en het adsorptie/desorptie proces van fosfaat uit de oplossing aan de grond en omgekeerd.

De verandering per tijdseenheid in geadsorbeerd fosfaat wordt evenredig gesteld aan de afwijking uit het adsorptie evenwicht $A-\alpha c$, dus:

$$\frac{dA}{dt} = r(\alpha c - A) \quad (1)$$

waarin: A = adsorptie van P aan grond [mg P/kg grond]
 c = concentratie van opgelost P [mg P/liter H_2O]
 α = adsorptiecoëfficiënt. [$cm^3 H_2O/gr$ grond]
 r = snelheid van adsorptie/desorptie reactie [dag^{-1}]
 t = tijd [dag]

Daar de toename van gebonden fosfaat per volume- en tijdseenheid gelijk is aan de onttrekking van opgelost fosfaat uit het bodemvocht per volume- en tijdseenheid kan de behoudswet van fosfaat voor een elementair volumedeeltje grond worden geschreven als:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{v}{n} \frac{\partial c}{\partial z} + \frac{b}{n} \frac{dA}{dt} = 0 \quad (2)$$

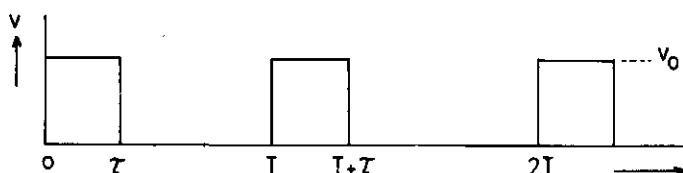
waarin: v = transportsnelheid van het water boven de grond [cm/dag]
 n = poriën volume -
 b = bulkdensity [gr grond/ cm^3 grond]
 z = verticale coördinaat [cm]

Merk op dat in bovenstaande formulering de hydrodynamische dispersie is verwaarloosd.

De transportsnelheid V wordt gedefinieerd als een periodieke functie van de tijd en wel als volgt:

$$\begin{aligned} v &= v_0 & \text{voor} & & nT \leq t < nT + \tau & & n = 0, 1, 2, \dots \\ v &= 0 & \text{voor} & & nT + \tau \leq t < (n+1)T & & n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (3)$$

Of grafisch voorgesteld:



We stellen $\tau = 0(1/r)$, d.w.z. de duur van de natte periode is van dezelfde grootte-orde als de tijdschaal van de adsorptie/desorptie reactie. We denken hierbij aan de orde-grootte van één dag. De periode T daarentegen is groot t.o.v.

Dit gesubstitueerd in (1) geeft:

$$\begin{aligned} \frac{dA(z,t)}{dt} &= r(\alpha c(z,t) - A(z,t+1/r)) - \frac{dA(z,t)}{dt} + O\left(\frac{1}{rt}\right)^2 \\ \text{of } A(z,t+1/r) &= \alpha c(z,t) + O\left(\frac{1}{rt}\right)^2 \\ \text{dus: } A(z,t) &= \alpha c(z,t-1/r) + O\left(\frac{z}{rt}\right)^2 \end{aligned} \quad (7)$$

(N.B.: Formeel geldt bovenstaande benadering slechts wanneer de variatiesnelheid in c , gedefinieerd als $\frac{1}{c} \frac{\partial c}{\partial t}$, klein is t.o.v. de reactiesnelheid r).

We maken nu de volgende benadering in de probleemstelling.

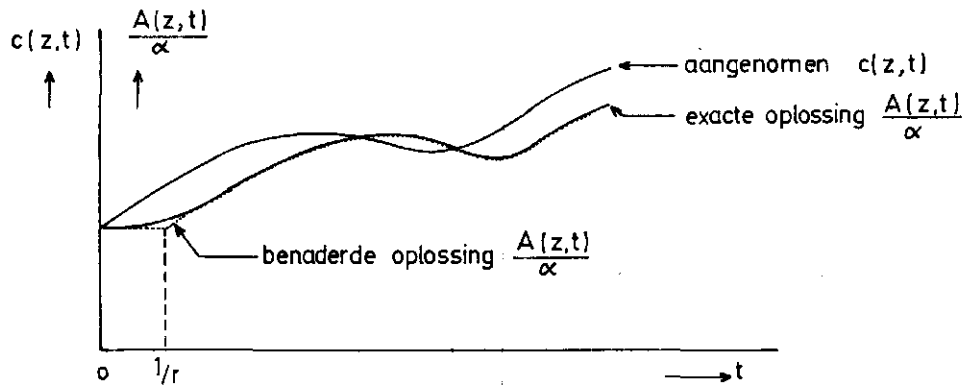
In plaats van vergelijking (1) schrijven we voor $0 < t < 1/r$:

$$A(z,t) = \alpha c(z,0)$$

en voor $t > 1/r$:

$$A(z,t) = \alpha c(z,t-1/r)$$

Zoals uit onderstaande grafiek is te zien is het verschil tussen benaderde en oorspronkelijke formulering niet groot.



Omdat $v(t)$ gedefinieerd is als een periodieke functie van t met periode T , geldt bovenstaande benadering voor iedere periode T , dus:

$$\begin{aligned} \text{voor } nT < t < nT+1/r \quad (n = 0, 1, 2, \dots) & \quad A(z,t) = \alpha c(z,nT) \\ \text{en voor } nT+1/r < t < (n+1)T & \quad A(z,t) = \alpha c(z,t-1/r) \end{aligned} \quad (8)$$

Vergelijking (8) en (2) vormen tezamen de benaderde probleemstelling die nu analytisch oplosbaar is.

3.3. De analytische oplossing

Beschouw twee gevallen:

Geval I : de duur van de natte periode τ is kleiner dan $1/r$

Geval II: de duur van de natte periode τ is groter dan $1/r$, maar kleiner dan $2/r$

dus, $1/r < \tau < 2/r$.

Uitbreiding van het aantal gevallen voor nog grotere waarden van τ is mogelijk maar niet nodig voor het doel van deze notitie.

A. Geval I

De duur van de natte periode korter dan de tijdschaal van de adsorptie-reactie:

$$0 < \tau < 1/r \quad \text{of} \quad 0 < r\tau < 1.$$

Beschouw de eerste bevoelingscyclus $0 < t < T$. Volgens (8) geldt in de eerste natte periode:

$$A(z,t) = \alpha c(z,0), \quad \text{dus} \quad \frac{dA(z,t)}{dt} = 0$$

en vergelijking (2) wordt:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{v_0}{n} \frac{\partial c}{\partial z} = 0$$

met als oplossing: $c(z,t) = c(z - \frac{v_0}{n}t)$.

Met een gegeven beginwaarde $c(z,0) = F(z)$ is dus de oplossing voor $0 < t < \tau$:

$$c(z,t) = F(z - \frac{v_0}{n}t) \quad (9)$$

In de daaropvolgende droge periode $\tau < t < T$ is $v = 0$ en reduceert vergelijking (2) tot:

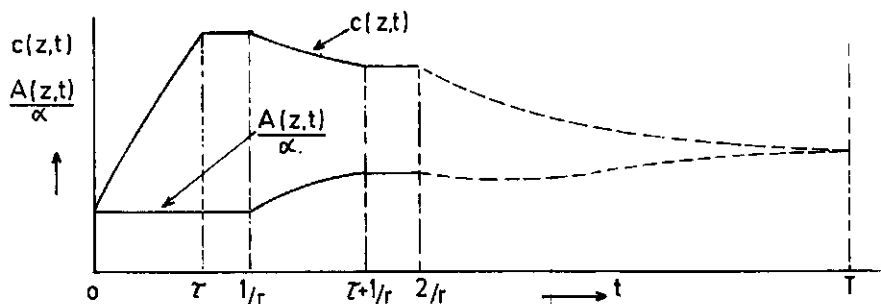
$$\frac{\partial}{\partial t} (c + \frac{b}{n} A) = 0.$$

Uiteraard is dit allemaal gemakkelijk op te lossen, maar de volledige oplossing van het probleem is voor ons doel niet interessant. Wat ons in een praktisch probleem in de eerste plaats interesseert is de oplossing gemiddeld over lange termijn, d.w.z. lang ten opzichte van de periode T . Het enige belangrijke aspect van de oplossing in de droge periode is dan dat aan het eind van de droge periode volgens (4) geldt:

$$A(z,T) = \alpha c(z,T),$$

omdat immers gegeven was dat $T \gg 1/r$.

Het gedrag van de oplossing voor een bepaalde waarde van z zou er dus in geval I als volgt uit kunnen zien:

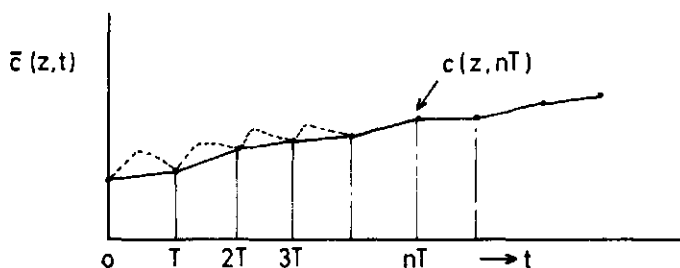


Zoals gezegd zijn we slechts geïnteresseerd in het verloop van $c(z,t)$ op een tijdschaal groot t.o.v. T . In feite zijn we dus geïnteresseerd in een andere

functie $\bar{c}(z,t)$ waarvan de kermerken zijn, dat die gaat door de punten $c(z,nT)$ met $n = 0, 1, 2, \dots$ en daar tussen in een glad, bijvoorbeeld lineair verloop heeft. Dus de functie $\bar{c}(z,t)$ is gedefinieerd als:

$$\bar{c}(z,t) = c(z,nT) + \frac{t-nT}{T} [c(z,(n+1)T) - c(z,nT)] \quad (10)$$

voor $nT < t < (n+1)T$ en $n = 0, 1, \dots$



We proberen nu uit het gestelde probleem een vergelijking af te leiden die geldt voor de functie $\bar{c}(z,t)$, waarnaar onze interesse uitgaat.

Daartoe integreren we vergelijking (2) over de tijd gedurende één bevoelingscyclus T . Nemen we gemakshalve de eerste cyclus, dan krijgen we gebruikmakend van de conditie $v = 0$ voor $\tau < t < T$

$$\int_0^T \left(\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{b}{n} \frac{dA}{dt} \right) dt + \frac{v_0}{n} \int_0^T \frac{\partial c}{\partial x} dt = 0$$

$$c(z,T) - c(z,0) + \frac{b}{n} (A(z,T) - A(z,0)) + \frac{v_0}{n} \int_0^T \frac{\partial c}{\partial x} dt = 0$$

Met het gegeven dat $A(z,nT)$ gelijk is aan $\alpha c(z,nT)$ wordt dit:

$$\left(1 + \frac{\alpha b}{n}\right) \{c(z,T) - c(z,0)\} + \frac{v_0}{n} \int_0^T \frac{\partial c}{\partial x} dt = 0 \quad (11)$$

Substitutie van (10) in (11) geeft:

$$\frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial t} + \frac{v_0}{nT} \frac{1}{1 + \frac{\alpha b}{n}} \int_0^T \frac{c}{z} dt = 0 \quad (12)$$

De integraal in de tweede term is:

$$\begin{aligned} \int_0^T \frac{\partial c}{\partial z} dt &= \int_0^T \frac{d}{dz} F\left(z - \frac{v_0}{n} t\right) dt = -\frac{n}{v_0} \int_z^{z - \frac{v_0}{n} T} \frac{d}{dz} F\left(z - \frac{v_0}{n} t\right) d\left(z - \frac{v_0}{n} t\right) = \\ &= -\frac{n}{v_0} \left\{ F\left(z - \frac{v_0}{n} T\right) - F(z) \right\} \end{aligned}$$

dus (12) wordt:

$$\frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial t} + \frac{1/T}{1 + \frac{\alpha b}{n}} \left\{ F(z) - F\left(z - \frac{v_0}{n} T\right) \right\} = 0.$$

Nu is $F(z) - F\left(z - \frac{v_0}{n} T\right) = c(z,0) - c\left(z - \frac{v_0}{n} T, 0\right) = \bar{c}(z,0) - \bar{c}\left(z - \frac{v_0}{n} T, 0\right)$

Algemeen geldt dan voor de gezochte functie $\bar{c}(z,t)$:

$$\frac{\partial \bar{c}(z, t)}{\partial t} + \frac{1/T}{1 + \frac{\alpha b}{n}} \left\{ \bar{c}(z, nT) - \bar{c}\left(z - \frac{v_0}{n} \tau, nT\right) \right\} = 0 \quad (13)$$

voor $nT < t < (n+1)T$

De vraag in deze notitie gesteld is: bezit deze oplossing een dispersief karakter te beschrijven met behulp van een dispersiecoëfficiënt en zo ja, hoe groot is dan die dispersiecoëfficiënt?

Om deze vraag te kunnen beantwoorden beschouwen we het geval dat $\frac{v_0 \tau}{n}$ klein is t.o.v. de karakteristieke lengteschaal l_c , waarover c varieert. Dan geldt:

$$\bar{c}(z, nT) - \bar{c}\left(z - \frac{v_0}{n} \tau, nT\right) = \frac{v_0 \tau}{n} \frac{\partial \bar{c}(z, nT)}{\partial z} - \frac{1}{2} \left(\frac{v_0}{n} \tau\right)^2 \frac{\partial^2 \bar{c}(z, nT)}{\partial z^2}$$

Dit ingevuld in (13) geeft:

$$\frac{\partial \tau}{\partial t} + \frac{v_0 \tau / nT}{1 + \alpha b / n} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \frac{\frac{1}{2} v_0 \tau / n \cdot v_0 \tau / nT}{1 + \alpha b / n} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} = 0$$

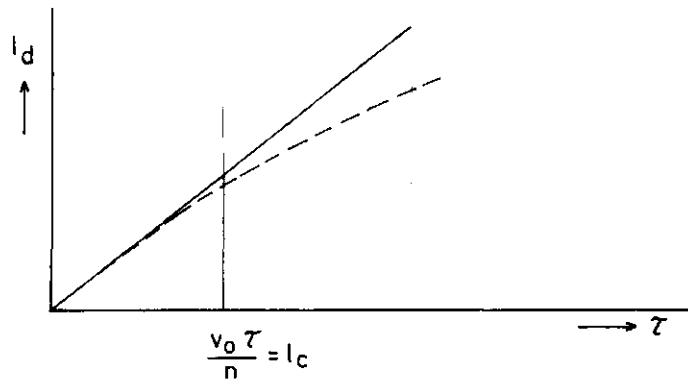
of met de notatie:

$$\bar{v} = \frac{v_0 \tau / nT}{1 + \alpha b / n} \quad \text{en} \quad \frac{1}{2} \frac{v_0 \tau}{n} = l_d \quad \text{wordt dit:}$$

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - l_d \bar{v} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} = 0 \quad (14)$$

We zien dus dat het tijdsgemiddelde fosfaatprofiel $\bar{c}(z, t)$ zich verplaatst in z -richting met een snelheid \bar{v} en afvlakt door dispersie, waarbij de dispersiecoëfficiënt D gelijk is aan $\bar{v} \cdot l_d$. Hierbij is l_d op te vatten als een lengteschaal waarover de verticale uitwisseling plaatsvindt. De grootte van l_d is:

$$l_d = \frac{1}{2} \frac{v_0 \tau}{n} \quad \text{zolang} \quad \frac{v_0 \tau}{n} < l_c \quad \text{en} \quad 0 < \tau < 1/r \quad (15)$$



Conclusie:

De oplossing vertoont dus inderdaad een dispersief karakter, dat voor kleine waarde van τ ($\tau < \frac{n l_c}{v_0}$) overgaat in een zuivere dispersie met dispersiecoëfficiënt $\bar{v} l_d$, waarin $l_d = \frac{1}{2} \frac{v_0 \tau}{n}$.

B. Geval II

De duur van de natte periode ligt tussen $1/r$ en $2/r$, dus $1 < r\tau < 2$.

In dit geval wordt de oplossing van het probleem in de natte periode voor twee tijdsintervallen afzonderlijk bekeken en wel voor: $0 < t < 1/r$ en voor $1/r < t < \tau$. Voor $0 < t < 1/r$ geldt volgens (8):

$$A(z, t) = \alpha c(z, t)$$

De oplossing is analoog aan geval I, dus:

$$c(z, t) = F\left(z - \frac{v_0 t}{n}\right) \text{ voor } 0 < t < 1/r, \text{ met in het bijzonder:} \quad (16)$$

$$c(z, 1/r) = F\left(z - \frac{v_0}{nr}\right).$$

In het tijdsinterval $1/r < \tau < 2/r$ geldt volgens (8):

$$A(z, t) = \alpha c(z, t - 1/r), \text{ dus:}$$

$$\frac{dA(z, t)}{dt} = \alpha \frac{d}{dt} F\left(z - \frac{v_0 t}{n} + \frac{v_0}{nr}\right) = -\frac{\alpha v_0}{n} \left(\frac{dF}{dz}\right)_{z - \frac{v_0 t}{n} + \frac{v_0}{nr}}$$

Vergelijking (2) wordt daarmee:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{v_0}{n} \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\alpha b}{n} \frac{v_0}{n} \left(\frac{dF}{dz}\right)_{z - \frac{v_0 t}{n} + \frac{v_0}{nr}} \quad (17)$$

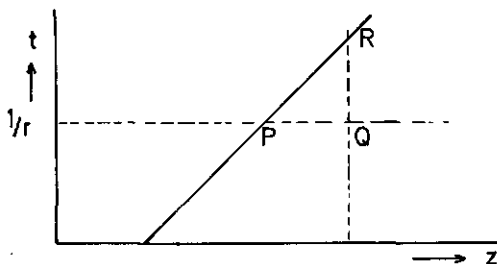
Dit is een hyperbolische differentiaalvergelijking. De karakteristieken hebben de richtingscoëfficiënt $\frac{dz}{dt} = \frac{v_0}{n}$

Langs die karakteristieken geldt:

$$\frac{dc}{k} = \frac{dz}{v_0/n} = dt \quad (18)$$

waarin:

$$k = \frac{\alpha b}{n} \frac{v_0}{n} \left(\frac{dF}{dz}\right)_{z - \frac{v_0 t}{n} + \frac{v_0}{nr}}$$



Integratie van (18) langs de karakteristiek van P tot R geeft:

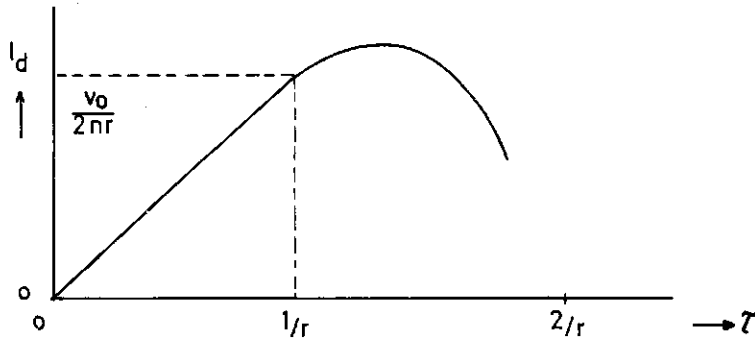
$$\int_P^R dc = \frac{n}{v_0} \int_P^Q k dz = \frac{\alpha b}{n} \int_P^Q \left(\frac{dF}{dz}\right)_P dz$$

$$\text{dus: } c_R - c_P = \frac{\alpha b}{n} \left(\frac{dF}{dz}\right)_P (z_Q - z_P) = \frac{\alpha b}{n} \left(\frac{dF}{dz}\right)_P \frac{v_0}{n} (t - 1/r)$$

waarin: $c_P = c\left(z - \frac{v_0 t}{n} + \frac{v_0}{nr}, 1/r\right)$ hetgeen volgens (16) ook te schrijven is als:

$$c_P = F\left(z - \frac{v_0 t}{n}\right),$$

We zien dus dat voor geval II, waarin $1/r < \tau < 2/r$ een analoge situatie optreedt als in geval I met dit verschil dat nu de dispersielengte l_{d2} weer afneemt met $r\tau$. De informatie uit geval I en II samengevoegd is in onderstaande figuur weer-gegeven.

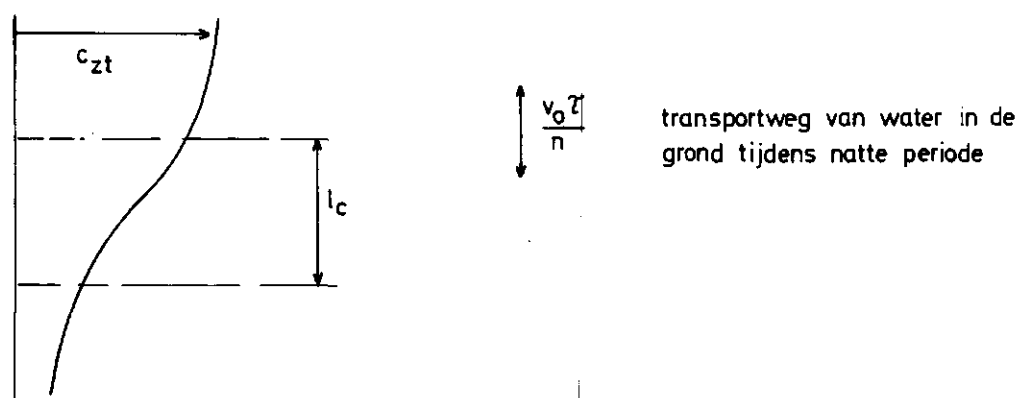


De conditie $\frac{v_0 \tau}{n}$ klein t.o.v. l_c is weinig algemeen. Immers $\frac{v_0 \tau}{n}$ kan in geval II niet kleiner worden dan $\frac{v_0}{nr}$.

Conclusie: Een zuivere dispersie wordt in geval II in het algemeen niet bereikt. Wel vertoont de oplossing een dispersieachtig karakter met een dispersie coëfficiënt die afneemt naarmate τ groter wordt. De maximale dispersiecoëfficiënt treedt op voor τ iets groter dan $1/r$ en heeft de orde grootte $\bar{v} \approx \frac{v_0}{nr}$.

4. SAMENVATTING EN CONCLUSIES

- A. Ondanks het verwaarlozen van de fysische dispersie is er in dit transportprobleem, waarin gekeken wordt naar gemiddelde transporten over perioden groot t.o.v. T , sprake van dispersieachtige kenmerken.
- B. Het dispersieachtig gedrag in het transport is te benaderen met een zuiver dispersief transport gedefinieerd als $D \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}$. De benadering is beter naarmate $\frac{v_0 \tau}{n}$ kleiner is t.o.v. l_c , d.w.z. naarmate de transportweg van het water in de grond tijdens de natte periode kleiner is t.o.v. de karakteristieke lengte l_c , waarover c verandert.



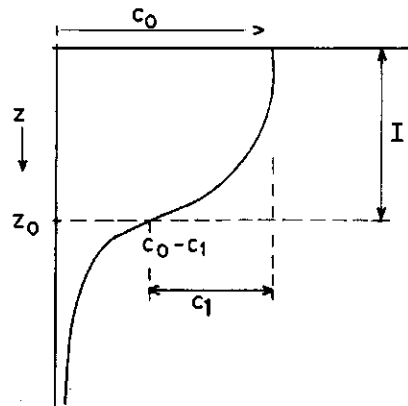
- C. De dispersiecoëfficiënt als hierboven bedoeld is te schrijven als $\bar{v} l_d$, waarbij \bar{v} de gemiddelde snelheid is in de periode $nT < t < (n+1)T$, waarmee het (tijdsgemiddelde) fosfaatprofiel zich naar beneden verplaatst. De dispersielengte l_d is bij benadering gelijk aan $\frac{1}{2} \frac{v_0 \tau}{n}$, indien $\tau < 1/r$ en bij benadering gelijk aan $\frac{1}{2} \frac{v_0 \tau}{n} \left(1 - \frac{ab}{n} \left(1 - \frac{1}{r\tau}\right)^2\right)$ voor $1/r < \tau < 2/r$. De dispersielengteschaal l_d is dus min of meer evenredig met de transportweg van het water in de grond tijdens de natte periode, althans wanneer τ niet te groot is.
- D. De fysische dispersiecoëfficiënt is eveneens te schrijven als $\bar{v} l$. De grootte l is een lengtemaat voor de korrelstructuur in de grond. Een gebruikelijke waarde voor l is 2 à 3 cm. De chemisch/fysische dispersiecoëfficiënt is $\bar{v} l_d$. Voor de duur van de natte periode ongeveer gelijk aan $1/r$ is $l_d \approx \frac{1}{2} \frac{v_0}{nr}$. Nu is een gebruikelijke waarde van de adsorptie snelheid $r \approx 2/3$ dag⁻¹, terwijl v_0 in bijvoorbeeld een vloeiveld 10-30 cm/dag bedraagt. Bij een poriënvolume van 0,5 wordt l_d ca. 15-45 cm, hetgeen aanzienlijk groter is dan de fysische dispersielengte.
- E. Tenslotte kan nog geconcludeerd worden dat de gemiddelde snelheid \bar{v} onafhankelijk blijkt van de snelheid van de adsorptie reactie. De snelheid \bar{v} is gelijk aan de gemiddelde snelheid van het water in de grond $\frac{v_0 \tau}{nT}$ in een periode,

5. TOEPASSING VAN HET GEVONDEN RESULTAAT OP EEN PRAKTIJK VOORBEELD

Als praktijksituatie kiezen we het in de inleiding genoemde vloeiveld van Tilburg. Zie Beek [1]. Het fosfaatprofiel in de grond ziet er uit als weergegeven in nevenstaande figuur.

In het bovenste deel van het profiel is verzadiging in de fosfaatneerslag opgetreden. We duiden deze grondlaag aan als gebied I, gelegen tussen $0 < z < z_0$, waarbij z_0 het buigpunt in het fosfaatprofiel is.

In gebied I is er dus slechts een uitwisseling tussen opgelost en geadsorbeerd fosfaat zoals in deze notitie behandeld.



Alleen tijdsgemiddelde grootheden (over perioden $\geq T$) worden beschouwd. Na voldoende lange tijd vanaf het begin van de bevoeiing (zeg na een aantal jaren) zal het fosfaatprofiel niet meer van vorm veranderen. Het profiel zal zich dan met een bepaalde snelheid u naar beneden verplaatsen. In een met het profiel meebewegend assenstelsel zal in gebied I, waarin immers geen fosfaat verdwijnt door neerslag, het fosfaattransport dus onafhankelijk zijn van de plaats $\zeta = z - ut$ en de tijd t . Er moet dus gelden in gebied I:

$$\bar{v} \cdot \bar{c}(\zeta, t) - \bar{D} \frac{\partial \bar{c}(\zeta, t)}{\partial \zeta} = \text{constant} = \bar{v} \cdot \bar{c}_0.$$

Hieruit volgt:

$$c = c_0 - c_1 e^{\frac{\bar{v}-u}{\bar{D}}(z-z_0)} \quad (22)$$

waarbij gebruik gemaakt is van de randconditie $c = c_0 - c_1$ voor $z = z_0$.

De snelheid u , waarmee het profiel naar beneden zakt is voor het Tilburgse vloeiveld bijzonder klein. Dit volgt al direct uit het gegeven dat na een aantal decennia het fosfaatfront nog niet verder dan een 30 cm is gezakt. Uit een P-balans is u te berekenen en blijkt ongeveer $4 \cdot 10^{-3}$ cm/dag te bedragen.

De snelheid \bar{v} , waarmee het fosfaatprofiel in gebied I zich verplaatst, wanneer er geen dispersie was is volgens deze notitie gelijk aan:

$$\frac{v_0 \tau / nT}{1 + \alpha b / n}$$

Met de waarden voor de parameters als opgegeven door Beek [1] (te weten $v_0 \tau = 20$ cm/dag; $n = 0,525$ cc H_2O /cc grond; $T = 36,5$ dag; $\alpha = 16$ cc H_2O /gram grond; $b = 1,2$ gram grond/cc grond) wordt $\bar{v} = 0,03$ cm/dag.

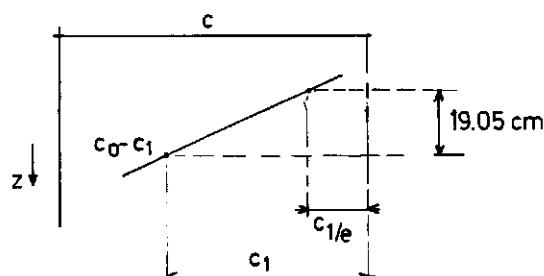
Verwaarlozen we u t.o.v. \bar{v} in vergelijking (22), dan wordt

$$c = c_0 - c_1 e^{-\frac{z-z_0}{l_d}}$$

waarbij voor D de waarde $\bar{v}l_d$ is gesubstitueerd.

Nu zou l_d volgens de voorgaande theorie afhankelijk zijn van τ en r . Voor $\tau = 1$ dag en $v_0 = 20$ cm/dag is $\tau < 1/r$ en daarmee l_d onafhankelijk van r en gelijk aan $l_d = \frac{1}{2} \frac{v_0 \tau}{n} = 19,05$ cm.

Nevenstaande figuur toont dit berekende resultaat in vergelijking met het meetgegeven. Het berekende fosfaat profiel heeft een minder sterke gradiënt dan het gemeten profiel. Het verschil is ca. een factor 2.



J. Beek berekende in zijn proefschrift

juist een steilere fosfaatgradiënt dan gemeten (ca. 3 maal te steil). Het verschil zit erin dat Beek naast een langzame P-adsorptie ook nog een snelle P-adsorptie introduceerde. Wat uit dit vergelijk tussen theorie en meetgegeven blijkt is dat de gemeten P gradiënt niet alleen verklaart kan worden door een hogere hydrodynamische dispersie t.g.v. bodeminhomogeniteiten, zoals Beek deed, maar ook door een geringere bijdrage van de snel-adsorberende fractie in P_{totaal} (Niet alle opgeloste P adsorbeert even snel als ortho-P).

De in deze notitie geschetste benaderingsmethode kan ook worden toegepast op het meer uitgebreide model als door Beek ontwikkeld. De methode is bijzonder geschikt als voorbereiding bij een numerieke probleemoplossing. Immers via deze benadering wordt een gediscretiseerd model verkregen, waarbij de keuze van plaats en tijdstip niet vrij is maar bepaald wordt door fysische overwegingen (zie vergelijkingen 13 en 20).

Omdat de fysische overwegingen als startpunt de bestudering van lange termijn effecten hebben, zijn de daaruit voortvloeiende criteria over stapgrootte aangepast aan deze schaal.

De rekentijd van een programma van een op de geschetste wijze voorbereikt probleem zal een fractie bedragen van een overeenkomstig niet voorbereikt probleem.

6. LITERATUUR

- [1] Beek, J.: "Phosphate retention by soil in relation to waste disposal",
Proefschrift Landbouwhoogeschool, 1979.