

Faculteit der Aardwetenschappen

NITG - TNO
Delft Bibliotheek

21H 1990-002

Natuurlijke grondwaterstroming in sedimentaire bekken

(De rol van grondwaterstroming in regionale
stromingsstelselanalyses)

September 1990

RIJKSUNIVERSITEIT TE UTRECHT



2617 023 7

21H
1990
-002

iversiteit

amsterdam



100-53
556.54.01:532.546

NATUURLIJKE GRONDWATERSTROMING
IN SEDIMENTAIRE BEKKENS

(De rol van grondwaterstroming in regionale stromingsstelselanalyses)

W. Zijl
TNO Dienst Grondwaterverkenning
Schoemakerstraat 97
Postbus 285, 2600 AG DELFT
tel. 015 - 69 71 13

September 1990

Instituut voor Aardwetenschappen
Vrije Universiteit - Amsterdam

BIBLIOTHEEK
Instituut voor Grondwater en Geo-Energie TNO (IGG)
Postbus 8012
2600 JA Delft

INHOUDSOPGAVE

1. INLEIDING

- 1.1. De "invalshoek" van dit collegedictaat
- 1.2. Het belang van waterstroming in de natuur
- 1.3. SI-eenheden en "gebruikelijke" eenheden
- 1.4. Classificatie van stromingstypen in de poreuze ondergrond
- 1.5. Stroming in de onverzadigde zone
- 1.6. Stroming in de verzadigde zone
- 1.7. De twee fundamentele probleemstellingen
- 1.8. De evolutie van de grondwaterspiegel
- 1.9. Stroming en transport in de ondergrond
- 1.10. Schaalafhankelijke interpretatie
- 1.11. De noodzaak tot het gebruik van wiskunde

2. BASISVERGELIJKINGEN

- 2.1. De "first principles"
- 2.2. Behoud van massa
- 2.3. De continuïteitsvergelijking voor incompressibele stroming
- 2.4. Behoud van impuls
- 2.5. Het begrip potentiaal
- 2.6. Het begrip stijghoogte
- 2.7. De doorlatendheidstensor
- 2.8. Vereenvoudiging tot twee doorlatendheden
- 2.9. De dynamische randvoorwaarde op de grondwaterspiegel
- 2.10. De kinematische randvoorwaarde op de grondwaterspiegel
- 2.11. Projectie en linearisatie van de toprandvoorwaarden
- 2.12. Samenvatting van de probleemformulering

3. PERFECT GELAAGDE EN NIET-PERFECT GELAAGDE BEKKENS

- 3.1. Vier Laplace-type vergelijkingen
- 3.2. Het karakter van stroming in een perfect gelaagd medium
- 3.3. Laterale heterogeniteiten
- 3.4. Het berekenen van snelheden m.b.v. de eigen vergelijkingen
- 3.5. Fourier-analyse van ruimtelijke variaties in de grondwaterspiegel
- 3.6. Damping met toenemende diepte

4. GROOTSCHALIGE KARAKTERISTIEKE DOORLATENDHEDEN

- 4.1. Karakteristieke en dimensieloze grootheden
- 4.2. De Dupuit-benadering
- 4.3. De Dupuit-Forchheimer benadering
- 4.4. Eerste-orde correcties
- 4.5. De gegeneraliseerde Dupuit-benadering
- 4.6. Hogere-orde correcties
- 4.7. De grootschalige "wet van Darcy"

5. KWANTITATIEVE ASPECTEN VAN DE STROMINGSSTELSELANALYSE

- 5.1. De homogene ondergrond als eenvoudig voorbeeld
- 5.2. De "ondoorlatende" basis in een gelaagd ondergrond
- 5.3. Nesting van stroombanen
- 5.4. Tijdsafhankelijkheid van stromingsstelsels

- 5.5. Netto kwel/infiltratie kaarten
- 5.6. De initiële fase van een stromingsstelselanalyse
- 6. TRANSPORT VAN OPGELOSTE STOFFEN
 - 6.1. Transportprocessen
 - 6.2. Behoud van massa voor opgeloste stof
 - 6.3. De dispersieve flux
 - 6.4. De stroomlijn-coördinaat
 - 6.5. Sorptie en afbraak
- 7. LITERATUUR

1. INLEIDING

1.1. De "invalshoek" van dit collegedictaat

Aardwetenschappers, en vooral hydrogeologen, verwachten in het algemeen niet zo veel van wiskunde. De geologische werkelijkheid is immers zo grillig en onvoorspelbaar dat geloof in exacte mathematische formuleringen als niet anders dan een dwaling beschouwd moet worden. Als je alleen maar te kiezen zou hebben tussen "waar" en "onwaar", dan is elke wiskundige schematisatie van de werkelijkheid onwaar. In aardwetenschappelijke discussies is het dan ook belangrijk om te beseffen dat er tussen "waar" en "onwaar" nog een groot gebied van "goed mogelijk" bestaat.

Een belangrijk gegeven waar aardwetenschappers nu eenmaal mee moeten leven, is dat er in het algemeen slechts weinig meetgegevens ter beschikking staan. Er is bijna altijd een chronisch gebrek aan data, en op grond van de spaarzame beschikbare gegevens moet een "meest waarschijnlijk" beeld van de ondergrondse structuren en processen worden opgesteld. Het leggen van wiskundige relaties, gebaseerd op in andere vakgebieden (fysica, chemie) goed gefundeerde natuurwetten, lijkt daarom een aantrekkelijke aanvulling op de onvoldoende meetgegevens. Met behulp van op natuurwetten gebaseerde wiskundig geformuleerde samenhangen kunnen de in slechts enkele ruimte-tijdpunten (x,t) bekende meetgegevens worden geïnterpoleerd. Bovendien kunnen analytisch-wiskundige uitdrukkingen het inzicht in de ondergrondse processen sterk vergroten en zo bijdragen aan een meer verantwoord conceptueel model van de ondergrondse processen. Zulke conceptuele modellen zijn dan weer van belang voor enerzijds globale grootte-orde schattingen, en anderzijds het construeren van meer gedetailleerde numeriek-wiskundige modellen, waarmee, met de nodige voorzichtigheid, enige in de toekomst te verwachten trends kunnen worden voorspeld.

Het belang van analytisch-wiskundige modelvorming en daarop gebaseerde grootte-orde schattingen zal in dit collegedictaat in hoofdzaak worden geïllustreerd aan de hand van grondwaterstroming, vooral op de grote, regionale schaal. Het transport van de in het water opgeloste stoffen zal slechts summier worden behandeld.

Het woord "water" moet hier echter niet al te letterlijk worden opgevat; we kijken niet alleen naar zuiver water, maar ook naar waterige mengsels, b.v. een water-zout mengsel. Vanuit dit standpunt bezien kunnen we beter spreken over "vloeistof" dan over "water". In dit collegedictaat zullen we de woorden "vloeistof" en "water" afwisselend gebruiken als synoniemen.

Bij het behandelen van de wiskundig-fysische begrippen wordt de stof van het bovenbouwcollege "Grondwaterhydraulica" (studie-onderdeel H-07, vak-code HD 390) [De Vries, 1987] bekend verondersteld.

Bovendien wordt belangstelling voor toegepaste wiskunde verondersteld, zoals behandeld op het tweedejaarscollege "Wiskunde voor de Aardwetenschappen" (studie-onderdeel 2.31, vak-code HD 384) [Van Veldhuizen, 1989].

Het gaat in dit college vooral om het belichten van de nauwe samenhang tussen wiskundige formulering en fysisch begrip. Ook het verkrijgen van getalsmatige grootte-ordes voor concrete situaties wordt in dit collegedictaat behandeld.

Het toepassen van op numerieke benaderingsmethoden gebaseerde modelcodes ter verkrijging van gedetailleerde numerieke uitkomsten voor situaties in het veld wordt hier niet behandeld; hiervoor verwijzen we naar het bovenbouwcolleges "Grondwatermodellering I en II" (studie-onderdelen H-10 en H-19, vak-codes HD 393 en HD 394) [De Ridder, 1982]. In de context van modelcodes is het goed om op de volgende citaten te wijzen:

"Soms droomt een methode er tijdelijk van de beide andere overbodig te maken; de numerieke mogelijkheden van het huidige rekentuig en de verwachtingen voor de toekomst hebben de beoefenaars van de numerieke stromingsleer soms in deze verleiding gebracht. Maar zelfs als alle verwachte rekenmogelijkheden zijn uitgekomen, zal tot ver in de een-en-twintigste eeuw deze droom geen werkelijkheid worden. De chaotische, turbulente, werkelijkheid staat daar borg voor."

"De contacten met andere vakgebieden zijn uitdagend, omdat zij tot nieuwe toepassingen kunnen leiden; zij zijn ook soms ontnuchterend en frustrerend, omdat men zo vaak de stromingsleer zeer ondeskundig ziet toepassen. Het huidige aanbod van rekenprogramma's verleidt gemakkelijk tot gebruik buiten de oorspronkelijke opzet, en dan komt er meestal onzin uit. Ik heb wel eens de stelling verkondigd dat vermoedelijk 50% van het rekenwerk op het gebied van de stromingsleer gewoon fout is, omdat men niet goed heeft nagedacht over de juiste probleemstelling of de behoudswetten; vermoedelijk zitten in de resterende 50% nog een aantal reken- en programmeerfouten. De toegepaste informatica is in dit opzicht geen zegen."

(prof.dr.ir. G. Vossers in zijn afscheidsrede van de Technische Universiteit Eindhoven op 8 september 1989)

Om niet in de door Vossers geconstateerde fouten te vervallen zal in dit dictaat vooral aandacht worden besteed aan de "behoudswetten", de consequenties van deze wetten en enige toepassingen ervan.

1.2. Het belang van waterstroming in de natuur

Bij het denken over "de natuur" (d.w.z. de kosmos met daarin in het bijzonder de aarde) wordt tegenwoordig vrij algemeen aanvaard dat de verschillende onderdelen van het natuurlijke systeem op dusdanige wijze geschakeld en gegroepeerd zijn, dat er nieuwe eigenschappen zoals terugkoppeling en zelfregulatie ontstaan. Sommigen gaan nog verder en beschouwen ook "de natuur", naar analogie met het menselijk lichaam, als een organisme met een zeker vermogen tot zelfschepping ("vrije wil"). In zo'n organische visie is het functioneren van "de natuur" dan ook niet herleidbaar tot het functioneren van de som van de afzonderlijke deelelementen. Om uit te drukken dat het geheel meer is dan de afzonderlijke delen, wordt in plaats van het woord organisch ook vaak het woord "holistisch" gebruikt.

Eén van de meer bekende "organische / holistische theorieën is de Gaia-Hypothese van Lovelock over de innige verwevenheid tussen het leven op aarde en de samenstelling van de aardse dampkring.

Ook de z.g. "filosofie van het organisme" van de wiskundige en filosoof Alfred North Whitehead en zijn geestverwanten benadrukt sterk de onderlinge samenhang in de kosmos. Deze laatste ontwikkeling is reeds in 1925 gestart bij de verschijning van het boek "Science and the Modern World" [Whitehead, 1967] en staat nu bekend onder de naam "procesfilosofie".

Ten slotte noemen we de "stromingsstelselanalyse", zoals deze gezamenlijk is ontwikkeld aan het Instituut voor Aardwetenschappen van de Vrije Universiteit en de TNO Dienst Grondwaterverkenning; dit is een organische theorie waarin de rol van het in de natuur bewegende water centraal staat. De terugkoppelingen maken dat "de natuur" een z.g. niet-lineair systeem is waarin chaotische verschijnselen kunnen voorkomen. Een voor de hydrologie belangrijk voorbeeld van zo'n chaotisch verschijnsel is het weer, en de daarin optredende regenval. De in de natuur voorkomende chaos kan beschouwd worden als een voortdurende bron van creativiteit waaruit zowel orde als nieuwheid voortkomt.

Echter, zoals een arts ook kennis moet hebben van het functioneren van de afzonderlijke organen in het menselijk lichaam, zo is het ook voor het begrip van "de natuur" noodzakelijk om kennis van de deelelementen en deelprocessen te hebben. Het water in de natuur, met alle daarin opgeloste stoffen, is zo'n deelelement, en stroming van water met daarin opgeloste stoffen is zo'n deelproces. Uiteraard is het bij de bestudering van de rol van het water in de natuur wel noodzakelijk om de relatie van het water met het geheel van de natuur in de gaten te houden.

Water neemt als transportmedium en als voorraad van een waardevolle grondstof een centrale plaats in bij de huidige aandacht voor de bedreigingen van natuur en milieu. De stroming van water met daarin opgeloste stoffen in de natuur is van vergelijkbaar belang als de bloedsomloop in het lichaam van dieren en mensen.

We zullen in dit college onze aandacht beperken tot de grondwaterstroming, d.w.z. tot het water in de vloeibare fase en de daarin opgeloste stoffen dat zich in de poriën van de met vloeibaar water verzadigde ondergrond bevindt. Maar om duidelijk te kunnen aangeven op welke diepte beneden maaiveld de met vloeibaar water verzadigde zone begint, kijken we ook even naar de stroming van het bodemvocht, d.w.z. naar het vloeibare water dat samen met lucht en waterdamp (gasvormig water) de poriën vult. Hoewel water in de vaste fase (ijs) een belangrijke rol kan spelen, zullen we er in dit college geen aandacht aan besteden. In het vervolg zullen we korthedshalve steeds water of grondwater zeggen in plaats van water in de vloeibare fase. Het ondiepe grondwater is een belangrijk transportmedium dat eventueel aanwezige vervuilingen naar andere gebieden of naar het oppervlaktewater kan transporteren. Het middeldiepe grondwater is van belang omdat het voor een groot deel zoet water is dat gebruikt kan worden als drinkwater en irrigatiewater. De stroming van het diepe grondwater met daarin opgelost CO_2 heeft invloed op de metamorfose van ondergrondse gesteenten; deze stroming is ook van belang bij de exploratie van olie & gas en van erts.

1.3. SI-eenheden en "gebruikelijke" eenheden

Grootheden, zoals b.v. lengte, tijd en druk, worden genoteerd als "getalwaarde $\times$ eenheid (dus $\text{grootheid} = \text{getalwaarde} / \text{eenheid}$). We zullen in het vervolg van SI-eenheden gebruik maken. De SI-eenheden vormen een coherent eenhedenstelsel, d.w.z. in de formules die de fysische samenhangen beschrijven komen geen nodeloze omrekeningsgetallen voor. Bovendien is het SI-eenhedenstelsel volledig, d.w.z. het is bruikbaar in alle vakdisciplines. We maken gebruik van het SI-eenhedenstelsel om de samenhang met andere fysische vakdisciplines te benadrukken. In deze context is het goed om een citaat uit Appelo [1988] te geven, hier toegepast op de fysica

in plaats van op de chemie:

"De basis-fysica stelt een kader voor dat u moet behoeden tegen het zondigen tegen principes die hun geldigheid hebben bewezen in een veel groter vakgebied dan het onze".

We zullen echter ook de relatie leggen met de in de geohydrologische praktijk gebruikelijke eenheden. Om de relatie tussen SI-eenheden en gebruikelijke eenheden overzichtelijk te houden wordt in dit college een iets andere presentatie gegeven dan in de geohydrologische literatuur gebruikelijk is. De opmerkingen over eenheden worden in de tekst tussen de symbolen ($\parallel$ $\parallel$) aangegeven. Bij voorbeeld:

$\parallel$ SI-eenheid van druk: pascal [Pa]; gebruikelijke eenheid van druk: meter waterkolom [mH_2O]; in het kort noteren we dit als: p [Pa; mH_2O] is de druk. Omrekening: $10^{-2} \text{ mH}_2\text{O} = 1 \text{ cmH}_2\text{O} = 98,15414 \text{ Pa} \approx 100 \text{ Pa} = 1 \text{ hPa} = 1 \text{ mbar}$; vroeger sprak men van millibar [mbar] in plaats van hectopascal [hPa]; $1 \text{ mbar} = 1 \text{ hPa}$ $\parallel$

$\parallel$ SI-eenheid van tijd: seconde [s]; gebruikelijke eenheid van tijd: dag [d]; in het kort noteren we dit als t [s; d] is de tijd. Omrekening: $1 \text{ d} = 86.400 \text{ s}$ $\parallel$

$\parallel$ SI-eenheid van lengte: meter [m]; dit is ook de gebruikelijke eenheid $\parallel$

Voor meer details over grootheden, eenheden en dimensie-analyse zie [Silberberg and McKetta, 1953].

1.4. Classificatie van stromingstypen in de poreuze ondergrond

De poreuze ondergrond, waarin de twee fasen vloeibaar water (met daarin opgeloste stoffen) en lucht (met waterdamp) voorkomen, kan wat betreft het stromingsgedrag worden onderscheiden in drie compartimenten. Wij noemen die hier: (1°) de atmosferische zone, (2°) de tweefasenzone en (3°) de verzadigde zone.

(1°) In de atmosferische zone stroomt de gasfase (de lucht en de waterdamp) en staat de vloeibare fase (het vloeibare water) stil.

(2°) In de tweefasenzone stromen zowel de gasfase (de lucht en de waterdamp) als de vloeibare fase (het vloeibare water).

(3°) In de verzadigde zone stroomt de vloeibare fase (het vloeibare water) en staat de gasfase (de lucht en de waterdamp) stil.

Onder het begrip water verstaan we niet alleen zuiver H_2O , maar H_2O met daarin opgeloste stoffen.

Zowel in de atmosferische zone, de tweefasenzone en de verzadigde zone komt het water zowel in de dampfase als in de vloeistoffase voor; beneden het vriespunt van water ook in de vaste fase. Wij zullen het voortaan echter uitsluitend over vloeibaar water hebben. Het zij opgemerkt dat in het gebruikelijke spraakgebruik de atmosferische zone en de tweefasenzone samen de onverzadigde worden genoemd.

1.5. Stroming in de onverzadigde zone

Zoals gezegd is de bovengenoemde indeling in drie compartimenten gebaseerd op het stromingsgedrag van de lucht en het (vloeibare) water. In de atmosferische zone kan alleen de lucht (en de waterdamp) stromen; het eventueel aanwezige (vloeibare) water staat stil; we hebben hier dus te maken met een eenfasestroming. De stromingsmechanica van de lucht in de atmosferische zone beschrijven we heel eenvoudig: de stroming van de lucht is zodanig dat de luchtdruk $p_1(x,t)$ overal gelijk is aan de atmosferische druk $p_{atm}(t)$ [Pa; mH₂O].

Hierin is t [s; d] de tijd en x [m] is de plaatsvector in de driedimensionale euclidische ruimte. Vectoren zijn in dit dictaat, zoals in de literatuur gebruikelijk, vet gedrukt. De plaatsvector x heeft in een door ons gekozen rechtsdraaiend orthogonaal cartesisch coördinatenstelsel de coördinaten $(x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$. Aangezien rijen en kolommen van orthogonale cartesische coördinaten dezelfde eigenschappen hebben als vectoren noteren we in het vervolg $x = (x, y, z) = x_i$ ($i = 1, 2, 3$).

Er is dus verondersteld dat de luchtdruk plaatsonafhankelijk is. De veronderstelling dat $p_1(x,t) = p_{atm}(t)$ kan worden gerechtvaardigd door in aanmerking te nemen dat de viscositeit van lucht veel kleiner is dan de viscositeit van water (een verhouding van ca. 5×10^{-5}) en dat de dichtheid van lucht veel kleiner is dan de dichtheid van water (een verhouding van ca. 10^{-3}). De atmosferische druk varieert in de tijd en heeft een gemiddelde waarde van ongeveer 1013 hPa = 1032 cmH₂O; variaties in de plaats kunnen in het algemeen worden verwaarloosd.

Onder de atmosferische zone bevindt zich de tweefasenzone. In de tweefasenzone kunnen zowel het water als de lucht stromen. Omdat er hier twee fasen (water en lucht) stromen spreken we van een tweefasestroming. Ook in de tweefasenzone veronderstellen we dat de luchtdruk gelijk is aan de atmosferische druk $p_{atm}(t)$. Door de oppervlaktespanning op de scheidingsvlakjes water-lucht in de poriën is in de tweefasenzone de waterdruk $p(x,t)$ lager dan de luchtdruk $p_{atm}(t)$ [$p(x,t) < p_{atm}(t)$].

De hier gedefinieerde atmosferische zone en tweefasenzone worden in de geohydrologie samen de onverzadigde zone genoemd.

1.6. Stroming in de verzadigde zone

Onder de onverzadigde zone bevindt zich de verzadigde zone. Bij een karakterisering van de zones op grond van het stromingsgedrag definiëren we de verzadigde zone als dat deel van de ondergrond waarin de lucht niet meer stroomt (niet stroomt als aparte fase; de in het water opgeloste lucht stroomt wel); uitsluitend het water stroomt (eenfasestroming). De luchtdruk van de eventueel nog aanwezige "pakketjes" lucht is hier hoger dan de atmosferische druk. Het grensvlak tussen onverzadigde en verzadigde zone heet de grondwaterspiegel ofwel het freatische vlak. Uit de theorie van stroming in de onverzadigde zone blijkt dat op dit vlak de oppervlaktespanning gelijk is aan nul, dus is de waterdruk daar atmosferisch. Onder het freatische vlak neemt de waterdruk toe tot waarden hoger dan de atmosferische druk.

Het belang van de voorafgaande beschouwing over de onverzadigde zone voor een beschrijving van stroming in de verzadigde zone is voor ons doel vooral

gelegen in de conclusie dat de grondwaterspiegel $z = -h_f(x,y,t)$ het vlak is waar de waterdruk atmosferisch is. Dit is de z.g. dynamische randvoorwaarde:

$$p(x,y,-h_f(x,y,t),t) = p_{atm}(t)$$

waarin $p(x,t) = p(x,y,z,t)$ de waterdruk is.

1.7. De twee fundamentele probleemstellingen

Wat betreft de verzadigde zone kunnen we twee probleemstellingen onderscheiden:

(1°) de vraag hoe de evolutie in de tijd van het ruimtelijk variërende freatische vlak plaatsvindt,

(2°) de vraag wat een gegeven, bekend veronderstelde, evolutie in de tijd van de ruimtelijk variërende grondwaterspiegel voor gevolgen heeft voor de grondwaterstroming en het daarmee samenhangende transport van opgeloste stoffen.

Een onderscheiding van complexe samenhangen in afzonderlijke, maar uiteraard gekoppelde, (conceptuele) modulen is in het algemeen een zinvolle procedure; men kan zich dan exclusief richten op het uitwerken van één deelprobleem, zonder zich te behoeven bekommeren om allerlei details uit een ander deelprobleem. Wel is het zo dat de manieren waarop de verschillende modulen met elkaar in communicatie staan, d.w.z. de grenzen (de "interfaces") tussen de verschillende modulen, verstandig moeten worden gekozen. De eerder beschreven opsplitsing van het ondergrondse stromingsveld in een onverzadigde en een verzadigde zone is een voorbeeld van modulair denken, en ook de hierboven gegeven onderscheiding in de twee deelproblemen (1°) en (2°) is zo'n voorbeeld. Het "interface" tussen beide conceptuele modulen is in dit laatste voorbeeld de in de ruimte variërende en in de tijd evoluerende grondwaterspiegel. De keuze van juist dit "interface" is om verschillende redenen zinvol. Eén reden is dat op deze manier de kinematische randvoorwaarde op het freatische vlak (de randvoorwaarde die de freatische berging beschrijft) correct in de beschrijving kan worden meegenomen. Andere redenen worden in paragraaf 4.6 gegeven. Probleemstelling (1e) is onderdeel van de klassieke geohydrologie, maar probleemstelling (2°) is pas actueel geworden binnen het kader van de in paragraaf 1.2 genoemde "stromingsstelselanalyse". Het begrip "stromingsstelselanalyse" wordt soms ook wel beperkt tot het bestuderen van probleem type (2°) om daarmee aan te geven dat probleemtype (1°) al lang bestond voordat de VU en TNO-DGV aan de nieuwere probleemstelling (2°) begonnen te werken.

1.8. De evolutie van de grondwaterspiegel

De eerstgenoemde probleemstelling, de evolutie in de tijd van de grondwaterspiegel, behoort tot het klassieke terrein van de geohydrologie en heeft te maken met stroming van water door de verzadigde zone, maar ook met neerslag, verdamping, relatie met oppervlaktewater en stroming in de onverzadigde zone. Zowel het meten van grondwaterstanden in peilbuizen, als het verrichten van fysische en stochastische modelstudies behoren tot de

middelen om inzicht te krijgen in de vraag: hoe komt de ruimtelijk variërende beweging van de grondwaterspiegel tot stand? Het beantwoorden van deze (moeilijke !) vraag behoort tot één van de hoofdactiviteiten van de TNO Dienst Grondwaterverkenning (TNO-DGV), die hiervoor een grondwatermeetnet onderhoudt en over een verscheidenheid aan modelmatige methoden en technieken beschikt. Studies m.b.t. verdroging, wateroverlast, natuur- en landbouwschade ten gevolge van vochttekort, enz. zijn hierop gebaseerd. Op deze probleemstelling zullen we in dit collegedictaat echter niet ingaan.

1.9. Stroming en transport in de ondergrond

We zullen ons in dit collegedictaat beperken tot de tweede probleemstelling: de vraag naar stroming en transport bij een gegeven, bekend veronderstelde, evolutie in de tijd van de ruimtelijke variaties in de grondwaterspiegel. Bij een voorgeschreven evolutie van de grondwaterspiegel (het freatisch vlak) $z = -h_f(x,y,t)$ in de tijd kunnen we op elk tijdstip berekenen hoe het ondergrondse potentiaalveld $\phi(x,t) = \phi(x,y,z,t)$ eruit ziet. Het potentiaalveld is weliswaar meetbaar (met behulp van stijghoogtemetingen in peilbuizen; zie paragraaf 2.6), maar alleen het stromingsveld $\mathbf{v}(x,t) = [v_x(x,y,z,t), v_y(x,y,z,t), v_z(x,y,z,t)]$ is van belang voor het transport. Daarom is onze probleemstelling vooral gericht op het beantwoorden van de vraag hoe het stromingsveld $\mathbf{v}(x,t)$ er ten gevolge van een bekend veronderstelde evolutie van de grondwaterspiegel uit ziet. Vooropgesteld dat we op elke plaats de doorlatendheid en de effectieve porositeit in de ondergrond kennen is dit snelheidsveld te bepalen. Op grond van dit in de ruimte-tijd bepaalde snelheidsveld kunnen dan weer stroombanen en verblijftijden worden bepaald, of kan de transportvergelijking worden opgelost. Op deze laatste aspecten zullen we in hoofdstuk 6 in het kort ingaan.

Als we het ruimtelijk driedimensionale snelheidsveld op elk tijdstip berekenen, bepalen we hiermee natuurlijk ook op elk tijdstip de verticale component van de grondwaterstroming ter plaatse van de grondwaterspiegel. Op deze manier kunnen we dus ook de evolutie in de tijd van de kwel- en infiltratiepatronen bepalen (strikt genomen zijn kwel en infiltratie gedefinieerd met behulp van de component van de grondwaterstroming loodrecht op de grondwaterspiegel, in plaats van met de verticale stromingscomponent ter plaatse van het freatisch vlak). Als er geen putonttrekkingen zijn zal er, bij verwaarlozing van niet-freatische berging, op elk tijdstip evenveel water opkwellen als infiltreren. In principe is het mogelijk dat een stroomlijn (een lijn waarvan op tijdstip t de richting in elk punt gelijk is aan de richting van het snelheidsvectorveld op tijdstip t) gesloten is in plaats van te lopen van infiltratie- naar kwelpunt. Dit verschijnsel kan optreden bij vrije convectorie (dichtheidsstroming), maar als we vrije convectorie verwaarlozen zal bijna elke stroomlijn in een infiltratiepunt beginnen en op een kwelpunt eindigen (enkele stroomlijnen eindigen of beginnen op een ondergronds stagnatiepunt). Voor een stationaire (tijdsafhankelijk) stroming zal dan bijna elk waterdeeltje dat infiltreert na een zekere tijd weer ergens opkwellen (enkele waterdeeltjes gaan naar ondergrondse stagnatiepunten). We gaan er echter van uit dat het stromingsveld in het algemeen instationair is, waardoor het in principe mogelijk is dat sommige geïnfiltreerde waterdeeltjes nooit meer aan de grondwaterspiegel geraken, en ook is het dan in principe mogelijk dat de plaats waar het deeltje

infiltrateert samenvalt met de plaats waar het deeltje opkwelt. Er vindt in het algemeen echter ook lateraal transport van infiltratie- naar kwelpunt plaats. Dit laterale transport is vooral van belang als het infiltrerende water verontreinigd is, b.v. door landbouwactiviteiten; in de buurt gelegen natuurgebieden kunnen op deze manier door opkwellend water verontreinigd worden. Door de toenemende belangstelling voor het milieu is ook de natuurlijke grondwaterstroming, naast de in het verleden veelvuldig bestudeerde kunstmatig veroorzaakte stroming naar putten, meer in de belangstelling geraakt.

1.10. Schaalafhankelijke interpretatie

De interpretatie van de betekenis van stroombanen lopend van infiltratie- naar kwelgebieden is echter niet zo eenvoudig als hierboven is voorgesteld. De interpretatie is complex, ten eerste omdat de doorlatendheid voor water in de ondergrond heterogeen is, ten tweede omdat de grondwaterspiegel in de tijd varieert, en ten derde omdat we nooit alle kleinschalige ruimtelijke variaties in de grondwaterspiegel kennen. Meestal kennen we alleen een grootschalig beeld waarin is gemiddeld over kleinschalige ruimtelijke variaties en over de fluctuaties in de tijd op korte tijdschalen. Voor de uit de grootschalige grondwaterspiegel (grootschalig zowel in de ruimte als in de tijd) berekende kwel-infiltratiegebieden, en nog meer voor de daaruit berekende stroombanen heeft dit buitengewoon grote gevolgen: lang niet alle berekende stroombanen en verblijftijden zullen samenvallen met de werkelijke stroombanen en verblijftijden, en er is veel inzicht nodig om tot een juiste interpretatie van de berekende kwel-infiltratiegebieden en stroombanen te geraken.

1.11. De noodzaak tot het gebruik van wiskunde

Om inzicht in het schaalgedrag van stromingsprocessen en de schaalafhankelijke interpretatie van berekeningen te verkrijgen is het noodzakelijk om zich een aantal begrippen eigen te maken die met behulp van wiskunde worden afgeleid uit de beginselen van de stromingsmechanica in poreuze media. In de aardwetenschappen is er altijd een chronisch gebrek aan gegevens. Toch moeten we ons een conceptueel model vormen van wat er aan processen plaatsvindt. Dit is nodig om interpolaties en eventueel zelfs extrapolaties van het hier en nu waarneembare te kunnen maken. Om deze interpolaties en extrapolaties zo betrouwbaar mogelijk te maken moeten we zoveel mogelijk gebruik maken van bekende, algemeen geldend veronderstelde, fysische en chemische wetmatigheden. Deze wetmatigheden worden i.h.a. uitgedrukt in wiskundige vorm en de erin gebruikte symbolen, b.v. de grootheden druk p , snelheid $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$, enz., hebben een nauwe relatie met de waarneembare werkelijkheid. In dit verband is het goed om de woorden (uit 1911) van de wiskundige en filosoof Alfred North Whitehead [An Introduction to Mathematics, Oxford University Press, London, 1982] te citeren:

"All science as it grows to perfection becomes mathematical in its ideas."

en

"By the aid of symbolism, we can make transitions in reasoning almost mechanically by the eye, which otherwise would call into play the higher

faculties of the brain."

Het belang van het wiskundig-fysische symboolsysteem wordt ook door deskundigen op het gebied van kennistechniek erkend. Raj Reddy, in 1988 voorzitter van de American Association of Artificial Intelligence (AAAI), vat de fundamentele principes van Artificial Intelligence (AI) als volgt samen:

1. Begrensde rationaliteit impliceert opportunistisch zoeken.
2. Fysische symboolsystemen zijn noodzakelijk en voldoende voor intelligente actie. (vet door W. Z)
3. Een expert weet 70.000 dingen, plus of min een binaire orde van grootte.
4. Zoeken compenseert gebrek aan kennis.
5. Kennis elimineert de behoefte aan zoeken.

(R. Reddy, Foundations and Grand Challenges of Artificial Intelligence, in: AI Magazine, pp. 9-19, 1988, vertaling uit Jaarboek Kennissystemen 1989)

In dit college wordt beslist niet geclaimd dat fysische symboolsystemen voldoende zijn voor intelligente actie; dat we bij het maken van een conceptueel model met behulp van mathematisch fysische symbolen ook aspecten van de werkelijkheid verloren laten gaan moet duidelijk beseft worden. Het (op fysische symboolsystemen gebaseerde) conceptuele model voor de werkelijkheid zelf houden noemt Whitehead de "fallacy of misplaced concreteness". Wel zal in dit college worden getracht om duidelijk te maken dat fysische symboolsystemen, zeker in deze tijd van computermodellen en kennissystemen, noodzakelijk zijn voor intelligente actie.

We zullen in dit college trachten het symbolische taalgebruik van de wiskunde te laten doordringen tot het conceptuele model dat we in ons bewustzijn van de werkelijkheid maken. Ook het definiëren van allerlei begrippen (b.v. netto-kwel, netto-infiltratie, enz.) kan niet zomaar plaatsvinden; zulke definities moeten passen, en kunnen alleen begrepen worden in het (wiskundig-symbolische) denksysteem waarbinnen die definities zinvol zijn.

2. BASISVERGELIJKINGEN

2.1. De "first principles"

We zullen nu eerst een samenvatting presenteren van de belangrijkste uitgangspunten waarop we ons in onze verdere beschouwingen baseren. Deze uitgangspunten zijn weer af te leiden uit meer fundamentele uitgangspunten, n.l. de Navier-Stokes vergelijkingen en de stationaire Stokes vergelijkingen als een bijzonder geval hiervan. Die meer fundamentele uitgangspunten zijn op hun beurt ook weer af te leiden uit nog meer fundamentele uitgangspunten, n.l. de kinetische theorie van vloeistoffen en gassen, enz. tot aan een metafysica die de "basiselementen" van de gehele kosmos beschrijft. Zulke afleidingen hoeven niet beschouwd te worden als bewijzen van de continuïteitsvergelijking en de wet van Darcy; deze wetten zijn n.l. heel goed experimenteel te bewijzen. De mogelijkheid van zulke afleidingen wijst ons veeleer op de "juistheid" van de meer fundamentele uitgangspunten en op de eenheid van de natuur op alle mogelijke niveaus. Zulke afleidingen geven bovendien belangrijke informatie over het bereik waarin onze uitgangspunten geldig zijn en over het bereik waarin correcties op deze uitgangspunten nodig zijn. We zullen ons hier echter niet verder in deze materie verdiepen; voor meer details van deze afleiding zie [Whitaker, 1986].

Een uitgebreide presentatie van de basisvergelijkingen, alsmede numerieke oplossingsmethoden en daarop gebaseerde computer-modelcodes, worden gegeven in het boek van Bear and Verruijt [1987]. Een op stochastische methoden gebaseerde behandeling van de basisvergelijkingen, rekening houdend met de heterogeniteit van de ondergrond op alle ruimtelijke schalen, wordt gepresenteerd door Dagan [1989]. In dit dictaat worden geen stochastische methoden gebruikt, maar er wordt wel ruim aandacht besteed aan de heterogeniteit van de ondergrond.

2.2. Behoud van massa

Het eerste fundamentele uitgangspunt is het behoud van massa, wiskundig uitgedrukt in de continuïteitsvergelijking:

$$\partial(\rho \theta)/\partial t + \text{div}(\rho \mathbf{q}) = 0$$

Hierin is ρ de dichtheid van de vloeistof (water met daarin opgeloste stoffen), θ is de effectieve porositeit voor het water in de poreuze ondergrond, en $\mathbf{q} = (q_x, q_y, q_z)$ is de volumestroomdichtheid van de stromende vloeistof (een vector), ook wel de Darcy-snelheid genoemd. De porositeit van het poreuze medium is de volumefractie aan poriën. De effectieve porositeit is de volumefractie van het poreuze medium die water bevat. Op plaatsen in de verzadigde zone waar er geen lucht als aparte (niet-stromende) fase voorkomt is de effectieve porositeit gelijk aan de porositeit van het poreuze medium.

De divergentie $\text{div}(\mathbf{a})$ is een scalaire functie van de vectorfunctie $\mathbf{a}(\mathbf{x}, t)$. In een orthogonaal cartesisch coördinatenstelsel worden de drie componenten van de vector $\mathbf{a}$ gegeven door $(a_1, a_2, a_3) = (a_x, a_y, a_z)$. Aangezien rijen en kolommen van orthogonale cartesische componenten dezelfde eigenschappen hebben als vectoren zullen we de vector $\mathbf{a}$ in het vervolg ook noteren als $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z) = a_i$ ($i = 1, 2, 3$). De divergentie is zodanig gedefinieerd dat:

$$\text{div}(\mathbf{a}) = \partial a_x / \partial x + \partial a_y / \partial y + \partial a_z / \partial z = \sum_{i=1}^3 \partial a_i / \partial x_i$$

Andere in de literatuur gebruikelijke notaties van de divergentie zijn:

$$\text{div}(\mathbf{a}) = \nabla \cdot \mathbf{a} = \partial_i a_i$$

($\partial_i = \partial / \partial x_i$; sommatie over de twee maal voorkomende index $i = 1, 2, 3$)

Voor een korte inleiding tot de vector- en tensoranalyse zie het bovenbouwcollege Oppervlaktewater Hydrologie (studie-onderdeel H-01, vak-code HD 402) [Van de Griend, 1989]; voor meer details zie b.v. [Morse and Feshbach, deel I, 1953].

‡ SI-eenheid dichtheid [$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$]; eenheid (effectieve) porositeit [-] (dimensieloos); SI-eenheid volumestroomdichtheid [$\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1} = \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$]; gebruikelijke eenheid volumestroomdichtheid [$\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{d}^{-1} = \text{m} \cdot \text{d}^{-1}$] ‡

We kunnen de continuïteitsvergelijking ook schrijven als:

$$(\theta/\rho) [\partial \rho / \partial t + \mathbf{v} \cdot \text{grad}(\rho)] + \partial \theta / \partial t + \text{div}(\mathbf{q}) = 0$$

waarin $\mathbf{v} = \mathbf{q}/\theta$ de gemiddelde vloeistofsnelheid in de poriënruimte is; deze snelheid wordt ook wel de transportsnelheid genoemd;

De gradiënt $\text{grad}(\alpha)$ is een vectorfunctie van de scalaire functie $\alpha(\mathbf{x}, t)$. De gradiënt is zodanig gedefinieerd dat zijn drie orthogonale cartesische componenten worden gegeven door:

$$\text{grad}(\alpha) = (\partial \alpha / \partial x, \partial \alpha / \partial y, \partial \alpha / \partial z) = \partial \alpha / \partial x_i \quad (i = 1, 2, 3)$$

Andere gebruikelijke notaties van de gradiënt zijn:

$$\text{grad}(\alpha) = \nabla \alpha = \partial_i \alpha \quad (i = 1, 2, 3)$$

Het scalaire produkt $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ van twee vectoren $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z) = a_i \quad (i = 1, 2, 3)$ en $\mathbf{b} = (b_x, b_y, b_z) = b_i \quad (i = 1, 2, 3)$ is gedefinieerd als de scalar:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = (a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z) = a_i b_i \quad (\text{sommatie over index } i)$$

Voor een korte inleiding tot de vector- en tensoranalyse zie [Van de Griend, 1989]; voor meer details zie b.v. [Morse and Feshbach, deel I, 1953].

We bekijken nu de situatie waarin de vloeistofdichtheid ρ alleen afhangt van de vloeistofdruk p [Pa; mH_2O] en de massafractie ω [-] aan opgeloste stof (b.v. zout); d.w.z. $\rho = \rho(p, \omega)$. De effectieve porositeit veronderstellen we uitsluitend afhankelijk van de druk p , d.w.z. $\theta = \theta(p)$. Op deze manier kunnen we de continuïteitsvergelijking schrijven als:

$$[(\theta/\rho) \partial \rho / \partial p + d\theta/dp] \partial p / \partial t + (\theta/\rho) \partial \rho / \partial p \mathbf{v} \cdot \text{grad}(p) +$$

$$+ (\theta/\rho) \partial \rho / \partial \omega [\partial \omega / \partial t + \mathbf{v} \cdot \text{grad}(\omega)] + \text{div}(\mathbf{q}) = 0$$

In het algemeen zijn de snelheid $\mathbf{v}$ en de daarbij behorende drukgradiënt

$\text{grad}(p)$ zodanig klein dat de term $(\theta/\rho) \partial\rho/\partial p \mathbf{v} \cdot \text{grad}(p)$ verwaarloosbaar klein ten opzichte van de overige termen. Voor het transport van een opgeloste stof geldt de convectie-dispersie vergelijking:

$$\partial\omega/\partial t + \mathbf{v} \cdot \text{grad}(\omega) = \text{div}[\underline{D} \cdot \text{grad}(\omega)] + b^*$$

waarin $\underline{D}$ de z.g. dispersietensor [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$; $\text{m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$] is en waarin b^* [s^{-1} ; d^{-1}] eventuele sorptie en afbraak voorstelt; zie de paragrafen 6.2 en 6.3. Voor een z.g. conservatieve stof als zout is $b^* = 0$. Indien ook dispersie verwaarloosbaar is, is het rechterlid van bovenstaande vergelijking gelijk aan nul. Op grond van deze overwegingen is het in het algemeen redelijk om te veronderstellen dat ook de term $(\theta/\rho) \partial\rho/\partial\omega [\partial\omega/\partial t + \mathbf{v} \cdot \text{grad}(\omega)]$ in de continuïteitsvergelijking verwaarloosbaar klein is. De continuïteitsvergelijking vereenvoudigt dan tot:

$$s \partial p/\partial t + \text{div}(\mathbf{q}) = 0$$

waarin

$$s = [(\theta/\rho) \partial\rho/\partial p + d\theta/dp]$$

de specifieke bergingscoëfficiënt [Pa^{-1} ; mH_2O^{-1}] is.

2.3. De continuïteitsvergelijking voor incompressibele stroming

De compressibiliteit $(1/\rho) \partial\rho/\partial p$ van water bij een temperatuur van 283 K (10°C) bedraagt $0,4789 \times 10^{-9} \text{ Pa}^{-1} \approx 0,5 \times 10^{-9} \text{ Pa}^{-1}$; zie [Weast, F-5, 1976]. Bij een effectieve porositeit van $\theta = 0,3$ vinden we hieruit dat $(\theta/\rho) \partial\rho/\partial p \approx 0,15 \times 10^{-9} \text{ Pa}^{-1}$. We hebben hier te maken met een volledig elastisch (d.w.z. omkeerbaar) proces van compressie en decompressie van het water. Indien de waterdruk toeneemt met een hoeveelheid dp zal, bij gelijkblijvende totale druk, de intergranulaire druk afnemen met een zelfde hoeveelheid dp . Deze afname heeft een vergroting van de porositeit θ ten gevolge. Er wordt veelal aangenomen dat ook dit proces elastisch verloopt en dat de term $d\theta/dp$ dezelfde grootte-orde heeft als de term $(\theta/\rho) \partial\rho/\partial p$; dus $d\theta/dp \approx 0,15 \times 10^{-9} \text{ Pa}^{-1}$ (b.v. zie [Todd, 1980]). Hieruit vinden we dat de specifieke elastische bergingscoëfficiënt s de volgende grootte-orde heeft:

$$s = (\theta/\rho) \partial\rho/\partial p + d\theta/dp \approx 0,3 \times 10^{-9} \text{ Pa}^{-1} \approx 3 \times 10^{-6} \text{ mH}_2\text{O}^{-1}$$

Deze laatste numerieke waarde wordt ook door Todd [1980] genoemd. Soms worden ook grotere waarden vermeld voor de term $d\theta/dp$. Grotere waarden treden op als er zich in de poriën ook gas als aparte fase bevindt. Ook voor slecht doorlatende (kleiige) gronden treden grotere specifieke elastische bergingscoëfficiënten op, zodanig dat een 100 maal grotere waarde dan de hier boven gepresenteerde waarde wordt gevonden; hierop gaan we in dit college niet verder in.

De elastische compressibiliteit van het "mengsel" vloeistof-poreus medium wordt in de geohydrologie altijd elastische berging genoemd. Elastische berging mag niet verward worden met de later te bespreken freatische berging, die te maken heeft met het fluctueren in de tijd van de grondwaterspiegel. Indien de compressibiliteit van de ondergrond niet elastisch, maar plastisch (onomkeerbaar) is spreekt men in de geohydrologie van niet-freatische berging.

Even vooruitlopend op hetgeen in de paragrafen 2.4 en 2.7 wordt gepresenteerd over de wet van Darcy kunnen we stellen dat uit een combinatie van de continuïteitsvergelijking met elastische berging en de wet van Darcy een relatie volgt tussen de voor elastische drukgolven karakteristieke lengte l_c en karakteristieke tijd t_c . Bij voorbeeld, voor een homogeen en isotroop poreus medium vinden we:

$$(s/k) \partial\phi/\partial t = \nabla^2\phi$$

waarin $\nabla^2\phi = \nabla \cdot \nabla\phi = \text{div}[\text{grad}(\phi)] = \partial^2\phi/\partial x^2 + \partial^2\phi/\partial y^2 + \partial^2\phi/\partial z^2$ de laplaciaan van de potentiaal ϕ voorstelt, en waarin $s = (\theta/\rho) \partial\rho/\partial p + d\theta/dp$ de specifieke elastische bergingscoëfficiënt is. Voor s/k constant zijn er voor allerlei situaties exacte oplossingen van bovenstaande vergelijkingen bekend; zie [Carslaw and Jaeger, 1959]. Van belang in deze oplossingen is de relatie tussen l_c en t_c , die gegeven wordt door:

$$t_c = (s/k) l_c^2$$

Kijken we als voorbeeld naar een goed doorlatende laag met dikte $l_c = 100$ m en met een verticale doorlatendheid van $k = 3 \text{ m}^2 \cdot \text{mH}_2\text{O}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$, dan is $s/k = 10^{-6} \text{ d} \cdot \text{m}^{-2}$ en $t_c = 10^{-2} \text{ d} \approx 15$ min. Dus de tijd die een drukgolf nodig heeft om zich over de dikte van deze goed doorlatende laag voort te planten is in de grootte-orde van kwartieren.

Kijken we als volgend voorbeeld naar een weliswaar dunnere, maar ook veel slechter doorlatende laag met een dikte van 1 m en een verticale doorlatendheid van $3 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{mH}_2\text{O}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$, dan is $s/k = 1 \text{ d} \cdot \text{m}^{-2}$ en $t_c = 1$ d. In dit laatste voorbeeld kost het de drukgolf een aantal dagen om zich door de slecht doorlatende laag voort te planten.

In het algemeen is het zo dat na een tijdsverloop van enige malen de karakteristieke tijd t_c de elastische bergingsterm $s \partial p/\partial t$ in de continuïteitsvergelijking mag worden verwaarloosd. We spreken dan van een incompressibele stroming. Wellicht ten overvloede, maar toch nog eens benadrukt voor alle duidelijkheid: deze verwaarlozing betekent uitdrukkelijk niet dat we stationaire stroming beschouwen; het verwaarlozen van de term $s \partial p/\partial t$ betekent alleen maar dat beschouwde veranderingen op een tijdschaal plaatsvinden die groot is ten opzichte van de tijdschaal t_c voor elastische berging.

Op de tijdschalen relevant voor het stoftransport, in het algemeen tijdschalen van enkele maanden tot tientallen jaren, mogen de elastische bergingstijden dus meestal wel verwaarloosd worden. Daarom zullen we in het vervolg elastische berging verwaarlozen. Ook zullen we compactie [veranderingen in de totale druk (= vloeistofdruk + intergranulaire druk)] en andere vormen van niet-freatische berging (plastische berging) verwaarlozen.

Wiskundig geformuleerd levert dit dan de welbekende vereenvoudigde continuïteitsvergelijking op:

$$\text{div}(\mathbf{q}) = \partial q_x/\partial x + \partial q_y/\partial y + \partial q_z/\partial z = 0$$

Bovenstaande vergelijking zegt dat op elk tijdstip het volume water dat per tijdseenheid in een stilstaand volume in de ondergrond binnenstroomt gelijk is aan het volume water dat per tijdseenheid uit dat volume wegstroomt. Indien zich in het ondergrondse volume putten bevinden gaat dit niet op. Echter, stroming ten gevolge van putonttrekkingen vormt een klassiek geohydrologisch probleem waarover reeds veel gepubliceerd is. Daarom zullen

we dit hier bekend veronderstellen en er niet verder naar kijken. In onze probleemstelling zijn er dus geen putten in de ondergrond en we beschouwen, zoals reeds gezegd, de evolutie in de tijd van de ruimtelijke variaties in het freatisch vlak als gegeven. We bestuderen dan hoe plaatselijke verschillen in de grondwaterspiegel de ondergrondse stroming van het water bepalen; m.a.w. we beschouwen de natuurlijke grondwaterstroming en niet de (door onttrekkingen) gedwongen stroming.

2.4. Behoud van impuls

Het tweede fundamentele uitgangspunt is de impulsbalans, wiskundig uitgedrukt door de wet van Darcy. Volgens de wet van Darcy is er in elk "punt" $\mathbf{x}$ van de ondergrond een lineair verband tussen de volumestroomdichtheid $\mathbf{q} = (q_x, q_y, q_z) = q_i$ ($i = 1, 2, 3$) (een vector) [m.s^{-1} ; m.d^{-1}] en de aandrijvende kracht per volume-eenheid $\text{grad}(\mathbf{p}) - \rho \mathbf{g} = (\partial p / \partial x - \rho g_x, \partial p / \partial y - \rho g_y, \partial p / \partial z - \rho g_z) = \partial_i p - \rho g_i$ ($i = 1, 2, 3$) (een vector) [N.m^{-3}].

Het begrip "punt" moeten we niet al te letterlijk opvatten; het gaat hier om een klein volume-elementje (zeg 1 cm^3) dat een groot aantal korrels (zeg 100) van de poreuze ondergrond bevat. Zo'n volume-elementje heet een representatief elementair volume (REV).

Het verband is lineair omdat de coëfficiënten die de componenten van de volumestroomdichtheid aan de componenten van de aandrijvende kracht per volume-eenheid koppelen onafhankelijk zijn van de volumestroomdichtheid en de aandrijvende kracht per volume-eenheid. De koppelingscoëfficiënten, de z.g. doorlatendheden (zie paragraaf 2.7) zijn in het algemeen wel van andere grootheden, zoals plaats, tijd, temperatuur, massafractie van opgeloste stof, afhankelijk. Alvorens de wet van Darcy in formulevorm uit te schrijven zullen we eerst ingaan op de begrippen potentiaal en stijghoogte.

2.5. Het begrip potentiaal

Alleen indien de aandrijvende kracht per volume-eenheid rotatievrij is kunnen we deze kracht schrijven als een potentiaalgradiënt $\text{grad}(\phi)$; d.w.z.:

$$\text{grad}(\mathbf{p}) - \rho \mathbf{g} = \text{grad}(\phi) = (\partial \phi / \partial x, \partial \phi / \partial y, \partial \phi / \partial z) = \partial_i \phi \quad (i = 1, 2, 3)$$

waarin $\phi(\mathbf{x}, t)$ de potentiaal is.

De betekenis van rotatievrijheid kan als volgt worden uitgelegd:

De rotatie $\text{curl}(\mathbf{a})$ is een vectorfunctie van de vectorfunctie $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z) = a_i$ ($i = 1, 2, 3$). In een rechtsdraaiend orthogonaal cartesisch coördinatenstelsel is de rotatie zo gedefinieerd dat:

$$\text{curl}(\mathbf{a}) = (\partial a_z / \partial y - \partial a_y / \partial z, \partial a_x / \partial z - \partial a_z / \partial x, \partial a_y / \partial x - \partial a_x / \partial y) =$$

$$= \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \partial a_k / \partial x_j$$

Hierin is ϵ_{ijk} de z.g. permutatie-tensor gedefinieerd als:

$$\epsilon_{ijk} = +1 \text{ als } ijk \text{ cyclisch zijn, d.w.z. } \epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = +1$$

$\epsilon_{ijk} = -1$ als ijk niet-cyclisch zijn, d.w.z. $\epsilon_{132} = \epsilon_{321} = \epsilon_{213} = -1$

$\epsilon_{ijk} = 0$ als er twee gelijke indices voorkomen.

Andere gebruikelijke notaties van de rotatie zijn:

$$\text{curl}(\mathbf{a}) = \text{rot}(\mathbf{a}) = \nabla \times \mathbf{a} = \epsilon_{ijk} \partial_j a_k$$

(sommatie over over de twee maal voorkomende indices j en k).

De rotatie ontleent haar praktische gebruikswaarde aan de volgende twee identiteiten:

1^o) $\text{div}[\text{curl}(\mathbf{a})] = 0$ voor elke (voldoende gladde) vectorfunctie $\mathbf{a}$

2^o) $\text{curl}[\text{grad}(\alpha)] = 0$ voor elke (voldoende gladde) scalaire functie α .

Het omgekeerde geldt ook:

1^o) elke divergentievrije vectorfunctie kan geschreven worden als de rotatie van een andere vectorfunctie

2^o) elke rotatievrije vectorfunctie kan geschreven worden als de gradiënt van een vectorfunctie.

Van deze laatste stelling (2^o) maken we gebruik bij het invoeren van de potentiaal ϕ : d.w.z. als $\text{curl}[\text{grad}(p) - \rho \mathbf{g}] = \mathbf{g} \times \text{grad}(\rho) = 0$, dan is $\text{grad}(p) - \rho \mathbf{g} = \text{grad}(\phi)$.

In een rechtsdraaiend orthogonaal cartesisch coördinatenstelsel is het vectorprodukt $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ van twee vectoren $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z) = a_i$ ($i = 1, 2, 3$) en $\mathbf{b} = (b_x, b_y, b_z) = b_i$ ($i = 1, 2, 3$) gedefinieerd als de vector:

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = (a_y b_z - a_z b_y, a_z b_x - a_x b_z, a_x b_y - a_y b_x) = \epsilon_{ijk} a_j b_k$$

(sommatie over over de twee maal voorkomende indices j en k).

Deze vector staat loodrecht op de vectoren $\mathbf{a}$ en $\mathbf{b}$. Voor meer details over vector- en tensoranalyse zie b.v. [Morse and Feshbach, deel I [1953].

‡ SI-eenheid potentiaalgradiënt [$\text{Pa} \cdot \text{m}^{-1}$]; gebruikelijke eenheid potentiaalgradiënt [$\text{mH}_2\text{O} \cdot \text{m}^{-1}$]; omrekening: $1 \text{ mH}_2\text{O} \cdot \text{m}^{-1} \approx 1 \text{ hPa} \cdot \text{cm}^{-1}$ ‡

‡ SI-eenheid potentiaal [Pa]; gebruikelijke eenheid potentiaal [mH_2O]; de potentiaal is ook op te vatten als een energie per volume-eenheid, $1 \text{ Pa} = 1 \text{ J} \cdot \text{m}^{-3}$ ‡

Voor water met een ruimtelijk constante dichtheid $\rho_0(t)$ [$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$] is de potentiaal gedefinieerd door de bekende uitdrukking:

$$\phi(x_h, y_h, z_v, t) = p(x_h, y_h, z_v, t) - \rho_0(t) g z_v$$

hierin is $p(x_h, y_h, z_v, t)$ de waterdruk [Pa ; mH_2O], $g = |\mathbf{g}| = \sqrt{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{g})}$ is de absolute waarde van de versnelling van de zwaartekracht [$\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$], $\rho_0(t) g$ is

het soortelijk gewicht [$\text{Pa} \cdot \text{m}^{-1}$; $\text{mH}_2\text{O} \cdot \text{m}^{-1}$], x_h en y_h zijn de exact horizontale coördinaten en z_v is de exact verticale coördinaat, positief naar beneden gericht [m]. De term $\rho_0 g z_v$ [$\text{Pa} = \text{J} \cdot \text{m}^{-3}$; mH_2O] wordt soms wel de potentiële energie (per volume-eenheid) genoemd.

¶ $\rho_0 \approx 1000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, op aarde is $g \approx 10 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$ waaruit volgt dat $\rho_0 g \approx 1 \text{ hPa} \cdot \text{cm}^{-1}$, $\rho_0 g = 1 \text{ mH}_2\text{O} \cdot \text{m}^{-1}$ (exact bij 10°C op aarde op 52°NB op zeeniveau) ¶

Indien de dichtheid van het water uitsluitend afhangt van de verticale coördinaat (en de tijd), d.w.z. als $\rho = \rho(z_v, t)$, bestaat er een generalisatie van de boven gegeven formule voor de potentiaal:

$$\phi(x_h, y_h, z_v, t) = p(x_h, y_h, z_v, t) - g \int_0^{z_v} \rho(z_v', t) dz_v'$$

Indien de waterdichtheid ook van de horizontale coördinaten x_h en y_h afhangt, d.w.z. als $\rho = \rho(x_h, y_h, z_v, t)$, is de aandrijvende kracht per volume-eenheid niet rotatievrij. In dit laatste geval is het invoeren van een potentiaal onmogelijk en kunnen we beter direct met de waterdruk p rekenen. Afhankelijkheid van de dichtheid van de horizontale coördinaten x_h en y_h veroorzaakt z.g. dichtheidsstroming ofwel vrije convectie. Vrije convectie zullen we in het vervolg niet verder in beschouwing nemen.

2.6. Het begrip stijghoogte

In een peilbuis op de horizontale lokatie (x_h, y_h) met filterdiepte z_v stijgt het water met dichtheid $\rho(z_v)$ op tot een hoogte $h(x_h, y_h, z_v, t)$ gemeten ten opzichte van het horizontale vlak $z_v = 0$. Evenwicht van het gewicht van de waterkolom en de daarop werkende atmosferische druk met de waterdruk levert:

$$p(x_h, y_h, z_v, t) = \rho(z_v, t) g [h(x_h, y_h, z_v, t) + z_v] + p_{\text{atm}}(t)$$

Voor de potentiaal op de horizontale lokatie (x_h, y_h) en filterdiepte z_v geldt dan:

$$\begin{aligned} \phi(x_h, y_h, z_v, t) = & p_{\text{atm}}(t) + \rho(z_v, t) g h(x_h, y_h, z_v, t) + \\ & + \rho(z_v, t) g z_v - \int_0^{z_v} \rho(z_v', t) g dz_v' \end{aligned}$$

Bovenstaande formule wordt vaak gebruikt om in problemen met zowel zoet als zout water stijghoogten $h(x_h, y_h, z_v, t)$, die meetbaar zijn in peilbuizen, om te rekenen naar potentialen, die benodigd zijn in de wet van Darcy.

Indien de dichtheid van het water overal constant is, d.w.z. als $\rho(z_v, t) = \rho_0(t)$, vereenvoudigt de uitdrukking voor de potentiaal tot de bekende formule:

$$\phi(x, y, z, t) = p_{\text{atm}}(t) + \rho_0(t) g h(x, y, z, t)$$

In deze laatste formule zijn x , y , en z niet noodzakelijkerwijze de exact horizontale en verticale coördinaten van de plaatsvector $\mathbf{x} = (x, y, z)$, maar

mogen x , y en z coördinaten zijn van een coördinatenstelsel dat ten opzichte van het exact horizontale-verticale coördinatenstelsel gedraaid is.

2.7. De doorlatendheidstensor

Het meest algemene lineaire verband tussen de volumestroomdichtheid q en de aandrijvende kracht per volume-eenheid $\text{grad}(p) - \rho g$ wordt gegeven door:

$$q = - \underline{k} \cdot [\text{grad}(p) - \rho g]$$

waarin $\underline{k}$ een tweede-orde tensor is (tensoren zullen we aangeven door vette onderliggende symbolen). In de rotatievrije benadering wordt dit:

$$q = - \underline{k} \cdot \text{grad}(\phi)$$

Uitgeschreven in orthogonale cartesische componenten vinden we:

$$q_x = - k_{xx} \partial\phi/\partial x - k_{xy} \partial\phi/\partial y - k_{xz} \partial\phi/\partial z$$

$$q_y = - k_{yx} \partial\phi/\partial x - k_{yy} \partial\phi/\partial y - k_{yz} \partial\phi/\partial z$$

$$q_z = - k_{zx} \partial\phi/\partial x - k_{zy} \partial\phi/\partial y - k_{zz} \partial\phi/\partial z$$

of, kortweg:

$$q_i = - \sum_{j=1}^3 k_{ij} \partial\phi/\partial x_j = k_{ij} \partial\phi/\partial x_j \text{ (sommatie over } j) \text{ (} i = 1, 2, 3)$$

Op dezelfde manier als bij vectoren mogen we de tensor $\underline{k}$ met orthogonale cartesische componenten k_{ij} ($i, j = 1, 2, 3$) ook noteren als:

$$\underline{k} = \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{bmatrix} = k_{ij} \text{ (} i, j = 1, 2, 3)$$

Bovenstaande vorm van de wet van Darcy kan worden afgeleid uit de stationaire vergelijkingen van Stokes die stroming in de poriënruimte beschrijven. Uit deze afleiding volgt ook dat de tensor $\underline{k} = k_{ij}$ ($i, j = 1, 2, 3$) symmetrisch ($k_{ij} = k_{ji}$) en positief definit [$a_i k_{ij} a_j > 0$ (sommatie over i en j) voor a_i en a_j ongelijk 0] is. Het zij opgemerkt dat het symmetrisch zijn van de doorlatendheidstensor $\underline{k}(\mathbf{x})$ alleen geldt op de schaal van ruimtelijke "punten" $\mathbf{x}$ (beter gezegd, representatieve elementaire volume-elementjes $\delta x \delta y \delta z$). Bij het "middelen" van $\underline{k}(\mathbf{x})$ over grotere volumes met daarin een heterogene verdeling van $\underline{k}(\mathbf{x})$ -waarden gaat de symmetrie-eigenschap in het algemeen verloren; zie de paragrafen 4.5, 4.6 en 4.7.

De zes componenten $k_{xx}(x, y, z, t)$, $k_{yy}(x, y, z, t)$, $k_{zz}(x, y, z, t)$, $k_{xy}(x, y, z, t) = k_{yx}(x, y, z, t)$, $k_{xz}(x, y, z, t) = k_{zx}(x, y, z, t)$, $k_{yz}(x, y, z, t) = k_{zy}(x, y, z, t)$ in de wet van Darcy zijn de zogenaamde doorlatendheden.

|| SI-eenheid doorlatendheid [$\text{m}^2 \cdot \text{Pa}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$]; gebruikelijke eenheid doorlatendheid [$\text{m}^2 \cdot \text{mH}_2\text{O}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$]; omrekening $1 \text{ cm}^2 \cdot \text{cmH}_2\text{O}^{-1} \cdot \text{d}^{-1} \approx 1 \text{ cm}^2 \cdot \text{hPa}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$

$$= 1/86400 \text{ cm}^2 \cdot \text{hPa}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \parallel$$

Bij afwezigheid van (stilstaande) lucht als aparte fase in de poriënruimte is de doorlatendheid gelijk aan de intrinsieke permeabiliteit κ [m^2 ; $\mu\text{m}^2 = \text{darcy}$] (een tensor) van het poreuze medium gedeeld door de dynamische viscositeit μ [$\text{Pa} \cdot \text{s}$; $\text{mH}_2\text{O} \cdot \text{d}$] (een scalar) van het water. Indien er zich ook nog (stilstaande) lucht als aparte fase in de poriënruimte bevindt moet deze waarde nog worden vermenigvuldigd met de z.g. relatieve permeabiliteit κ_r [-], een getal kleiner dan één. De intrinsieke permeabiliteit kan in de tijd veranderen door compactie/decompactie en metamorfose. Deze veranderingen zijn echter heel langzaam, zodat voor de meeste praktische toepassingen de tijdsafhankelijkheid van k_{ij} wel verwaarloosd mag worden. De ruimtelijke variabiliteit blijft echter in alle praktische omstandigheden een grote rol spelen.

De dynamische viscositeit van water is sterk temperatuurafhankelijk; de doorlatendheid neemt in het temperatuurtraject van 10°C tot 26°C toe met 50%.

De hier gegeven definitie van doorlatendheid is onafhankelijk van de versnelling van de zwaartekracht g (belangrijk in geocentrifuges waar zwaartekrachtsvergroting plaatsvindt en in valtorens en ruimtevaartuigen waar zwaartekrachtsreductie plaatsvindt). In de meeste tekstboeken over geohydrologie wordt echter een zwaartekrachtsafhankelijke definitie gegeven; daar wordt de gebruikelijke eenheid van potentiaal mH_2O gelijkgesteld aan de stijghoogte in meters in een peilbuis, hetgeen exact is bij 10°C op aarde op 52°NB op zeeniveau en hetgeen voldoende nauwkeurig is onder de meeste andere aardse omstandigheden.

$\parallel$ In dat laatste geval wordt de gebruikelijke eenheid van doorlatendheid $\text{m}^2 \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{d}^{-1} = \text{m} \cdot \text{d}^{-1}$ en de gebruikelijke eenheid van potentiaalgradient $\text{m} \cdot \text{m}^{-1} = 1$ is dimensieloos geworden. In deze context is het goed om de woorden van de beroemde fysicus Lord Rayleigh in herinnering te brengen:

"On the other hand, engineers, who might make much more use of it (it - de regels van de dimensie-analyse) than they have done, employ a notation which tends to obscure it. I refer to the manner in which gravity is treated. When the question under consideration depends essentially upon gravity, the symbol of gravity (g) makes no appearance, but when gravity does not enter into the question at all, g obtrudes itself conspicuously."

(uit: [Silberberg and McKetta, Part II, 1953]) $\parallel$

2.8. Vereenvoudiging tot twee doorlatendheden

Het is praktisch onmogelijk om alle zes de waarden van k_{ij} van punt tot punt in de ondergrond te kennen. In de praktijk wordt er altijd overgegaan tot datareductie met behulp van plausibele aannamen. Aangezien k_{ij} in elk punt symmetrisch is bestaan er in elk punt van de ondergrond drie onderling loodrechte hoofdrichtingen (de richtingen 1, 2 en 3 met curvilineaire orthogonale coördinaten μ_1 , μ_2 en μ_3) waarin de wet van Darcy geschreven kan worden als:

$$q_1 = - k_1 \partial \phi / \partial \mu_1$$

$$q_2 = - k_2 \partial \phi / \partial \mu_2$$

$$q_3 = -k_3 \partial\phi/\partial\mu_3$$

Voor een uitleg van het begrip curvilineair orthogonaal coördinatenstelsel zie [Morse and Feshbach, 1953].

Een veelgebruikte aanname is nu dat de hoofdrichtingen van de doorlatendheidstensor samenvallen met de richtingen van een Cartesisch coördinatenstelsel (met coördinaten $\mu_1 = x$, $\mu_2 = y$ en $\mu_3 = z$; niet noodzakelijkerwijs exact horizontale en verticale coördinaten). Deze richtingen worden geacht samen te vallen met de richtingen langs het stratigrafische patroon (de richtingen x en y) en loodrecht op het stratigrafische patroon (de richting z). Voorts is het in het algemeen gebruikelijk om te veronderstellen dat de twee doorlatendheden in de richting van de stratigrafie aan elkaar gelijk zijn, d.w.z. $k_1 = k_2 = k_h$. De twee overblijvende doorlatendheden $k_h(x,y,z,t)$ en $k_z(x,y,z,t)$ zijn wel afhankelijk van de positie (x,y,z) in de ondergrond en, eventueel, van de tijd t . In het vervolg zullen we dus steeds de volgende vereenvoudigde Darcy-vergelijkingen beschouwen:

$$q_x(x,y,z,t) = -k_h(x,y,z,t) \partial\phi(x,y,z,t)/\partial x$$

$$q_y(x,y,z,t) = -k_h(x,y,z,t) \partial\phi(x,y,z,t)/\partial y$$

$$q_z(x,y,z,t) = -k_z(x,y,z,t) \partial\phi(x,y,z,t)/\partial z$$

Ook zullen we, als inzichtgevend voorbeeld, vooral kijken naar het nog verder vereenvoudigde probleem van de perfect gelaagde ondergrond. Onder een perfect gelaagde ondergrond verstaan we een ondergrond waarin de doorlatendheden niet in de laterale, maar wel in de "verticale" richting veranderen (verticaal in de betekenis van loodrecht op de laterale, niet exact horizontale richting). De doorlatendheden worden dan gegeven door: $k_h = k_h(z,t)$, $k_z = k_z(z,t)$. In werkelijkheid is de ondergrond nooit perfect gelaagd; er blijft altijd wel afhankelijkheid van de laterale positie (x,y) . Maar vaak heeft de ondergrond, met name de ondergrond ontstaan in sedimentaire bekken, wel een gelaagd karakter. Echter, zoals zal worden aangetoond, is stroming in een perfect gelaagde ondergrond relatief gemakkelijk wiskundig te beschrijven en geeft derhalve veel kwalitatief inzicht in het karakter van de stroming.

2.9. De dynamische randvoorwaarde op de grondwaterspiegel

De bovenrand van het gebied wordt gegeven door de grondwaterspiegel $z = -h_f(x,y,t)$. Wegens de eerder besproken dynamische randvoorwaarde $p[x,y,-h_f(x,y,t),t] = p_{atm}(t)$ geldt de volgende randvoorwaarde voor de potentiaal geldt:

$$\phi[x,y,-h_f(x,y,t),t] = p_{atm}(t) + g \int_0^{-h_{fv}(x_h,y_h,t)} \rho(z_v',t) dz_v'$$

waarin h_{fv} gegeven wordt in een exact horizontaal-verticaal coördinatenstelsel met exact horizontale coördinaten x_h , y_h en met exact verticale coördinaat z_v , d.w.z. $z_v = -h_{fv}(x_h,y_h,t)$. Omrekenen van coördinatenstelsel (x,y,z) naar coördinatenstelsel (x_h,y_h,z_v) is altijd mogelijk maar zal hier niet verder worden uitgewerkt.

‡ Let wel, de zwaartekracht g speelt een rol in bovenstaande randvoorwaarde. In de gebruikelijke eenheden, waarin de eenheid van ρ $g = mH_2O.m^{-1}$ en waarin bovendien $mH_2O = m$ wordt gesteld, is de afhankelijkheid van de zwaartekracht "onzichtbaar" gemaakt ‡

In het algemeen kunnen we veronderstellen dat in het interval tussen $z_v = 0$ en $z_v = -h_{fv}(x_h, y_h, t)$ de dichtheid van het water ruimtelijk constant is, d.w.z. $\rho(z_v, t) = \rho_0(t)$. In dat geval vereenvoudigt de dynamische randvoorwaarde tot:

$$\phi[x, y, -h_f(x, y, t), t] = p_{atm}(t) + \rho_0(t) g h_{fv}(x_h, y_h, t)$$

2.10. De kinematische randvoorwaarde op de grondwaterspiegel

We zullen de coördinaten $(x, t) = (x, y, z, t)$ van de ruimtelijk variabele en in de tijd fluctuerende grondwaterspiegel geven door de algemene relatie $F(x, t) = F(x, y, z, t) = 0$. Zo'n relatie beschrijft op elk tijdstip t een vlak in de driedimensionale ruimte. De eenheidsrichtingvector n loodrecht op dit vlak wordt gegeven door:

$$\begin{aligned} n &= \text{grad}(F) / |\text{grad}(F)| = (n_x, n_y, n_z) = \\ &= (\partial F / \partial x, \partial F / \partial y, \partial F / \partial z) / \\ &\quad / [(\partial F / \partial x)^2 + (\partial F / \partial y)^2 + (\partial F / \partial z)^2]^{1/2} \end{aligned}$$

De vergelijking $F(x, t) = 0$ geeft in het algemeen een meerwaardige relatie tussen de laterale lokatie (x, y) en de "verticale" (niet noodzakelijkerwijs exact verticale) diepte z . Op fysische gronden weten we dat er ten minste één relatie bestaat. Deze relatie schrijven we als:

$$z = -h_f(x, y, t)$$

De index f geeft de keuze van de oplossing voor het geval dat $F(x, t)$ meer waarden van z bij dezelfde lokatie (x, y) geeft; zo bestaan er mogelijk ook oplossingen $z = -h_g(x, y, t)$, $z = -h_h(x, y, t)$ enz. bij dezelfde lokatie (x, y) . Deze laatste twee oplossingen, met de indices g en h , zijn b.v. de twee schijnspiegels van een verzadigde regenlens boven het freatisch vlak, terwijl de eerste waarde, met index f , het freatische vlak zelf beschrijft. De uitdrukking $z = -h_f(x, y, t)$ kan natuurlijk ook geschreven worden als:

$$F_f(x, y, z, t) = F[x, y, -h_f(x, y, t), t] = z + h_f(x, y, t) = 0$$

Uit bovenstaande formulering volgt dan de volgende uitdrukking voor de eenheidsnormaalvector n_f op het freatisch vlak:

$$n_f = (\partial h_f / \partial x, \partial h_f / \partial y, 1) / [(\partial h_f / \partial x)^2 + (\partial h_f / \partial y)^2 + 1]^{1/2}$$

Op een vaste, d.w.z. niet bewegende lokatie (x, y) wordt de bewegingssnelheid van de plaatsvector $x_f(t)$ van het freatisch vlak gegeven door:

$$\partial x_f / \partial t = (0, 0, -\partial h_f / \partial t)$$

Dus de normale component van de bewegingssnelheid van het freatische vlak $n_f \cdot \partial \mathbf{x}_f / \partial t$ wordt gegeven door:

$$n_f \cdot \partial \mathbf{x}_f / \partial t = - (\partial h_f / \partial t) / [(\partial h_f / \partial x)^2 + (\partial h_f / \partial y)^2 + 1]^{1/2}$$

Deze bovenstaande verplaatsingssnelheid loodrecht op de grondwaterspiegel is gelijk aan de normale component van de transportsnelheid van het grondwater ter plaatse van de grondwaterspiegel $n_f \cdot \mathbf{v}$, verminderd met de normale component van de grondwateraanvulling vanuit de onverzadigde zone. Met behulp van:

$$n_f \cdot \mathbf{v} = (v_x \partial h_f / \partial x + v_y \partial h_f / \partial y + v_z) / \\ / [(\partial h_f / \partial x)^2 + (\partial h_f / \partial y)^2 + 1]^{1/2}$$

volgt hieruit de zogenaamde kinematische randvoorwaarde:

$$\partial h_f / \partial t + v_x \partial h_f / \partial x + v_y \partial h_f / \partial y + v_z = P_e / \theta$$

Hierin is de vector $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z) = \mathbf{q} / \theta = (q_x / \theta, q_y / \theta, q_z / \theta)$ [m.s^{-1} ; m.d^{-1}] de transportsnelheid ter plaatse van het freatisch vlak; θ [-] is de effectieve porositeit ter plaatse van de grondwaterspiegel; en P_e [m.s^{-1} ; m.d^{-1}] is de component van de grondwateraanvulling vanuit de onverzadigde zone loodrecht op de grondwaterspiegel maal de term $\sqrt{[1 + (\partial h_f / \partial x)^2 + (\partial h_f / \partial y)^2]}$. Aangezien we in het vervolg naar bijna vlakke grondwaterspiegels zullen kijken, mogen we in goede benadering zeggen dat P_e de verticale component van de grondwateraanvulling (de "nuttige neerslag") is. Juist omdat de grondwaterspiegel aan de onverzadigde zone grenst kunnen we verwachten dat de effectieve porositeit hier aanzienlijk afwijkt van de porositeit van de poreuze ondergrond.

Zoals we zien beschrijft de kinematische randvoorwaarde de evolutie in de tijd van de grondwaterspiegel, m.a.w. ze beschrijft de freatische berging. Het oplossen van de kinematische randvoorwaarde, gecombineerd met een model voor stroming in de ondergrond en een model voor P_e , is verre van triviaal; op de eerste plaats maken de termen $v_x \partial h_f / \partial x$ en $v_y \partial h_f / \partial y$ het probleem niet-lineair, en op de tweede plaats is het opstellen van een goed en toch nog praktisch hanteerbaar model voor de "nuttige neerslag" een moeilijke zaak.

De opgave van het bepalen van de evolutie in de tijd van de ruimtelijke variaties in de grondwaterspiegel $h_f(x, y, t)$ is een klassiek probleem uit de geohydrologie, waarover zeer veel gepubliceerd is. Het zij hier opgemerkt dat het probleem drastisch vereenvoudigt door combinatie van de kinematische randvoorwaarde met de z.g. Dupuit-benadering (zie paragraaf 4.2). Deze combinatie resulteert in de Dupuit-Forchheimer benadering (zie paragraaf 4.3). In numerieke modellen met beschrijving van de freatische berging wordt (zo goed als) altijd van de Dupuit-Forchheimer benadering gebruik gemaakt, en claims dat er "volledig driedimensionaal" wordt gerekend (veelgehoord bij Modflow-gebruikers) moeten wat dit aspect betreft "met een korrel zout" worden genomen.

We zullen ons in dit college echter niet met de beschrijving van de evolutie van $h_f(x, y, t)$ bezighouden en dit betekent dat termen als $\partial h_f / \partial t$ of $\partial \phi / \partial t$ niet in onze wiskundige formulering voorkomen. Maar dit betekent niet dat ons stromingsprobleem stationair is, immers, de dynamische

randvoorwaarde voor $\phi[x,y,-h_f(x,y,t),t]$ op het bovenvlak, alsmede de positie van het bovenvlak $z = -h_f(x,y,t)$ vormen een tijdsafhankelijke randvoorwaarde voor het door ons gestelde probleem.

2.11. Projectie en linearisatie van de toprandvoorwaarden

Als vereenvoudiging, nodig om met analytisch-wiskundige methoden verder te komen, projecteren we de dynamische en kinematische randvoorwaarden op het vlak $z = 0$. De dynamische randvoorwaarde wordt dan:

$$\phi(x,y,0,t) = P_{atm}(t) + g \int_0^{-h_{fv}(x_h,y_h,t)} \rho(z_v',t) dz_v'$$

en de kinematische randvoorwaarde:

$$\partial h_f / \partial t + v_x \partial h_f / \partial x + v_y \partial h_f / \partial y + v_z = P_e / \theta$$

geldt dan op $z = 0$; dus in bovenstaande formule is $v_x = v_x(x,y,0,t)$, enz. Deze vereenvoudiging is geoorloofd als $d \gg |h_f|$.

Opmerking: bij het berekenen van $h_f(x,y,t)$ met behulp van de geprojecteerde kinematische randvoorwaarde wordt soms ook wel gebruik gemaakt van de gelineariseerde vorm ervan:

$$\partial h_f(x,y,t) / \partial t + v_z(x,y,0,t) = P_e(x,y,t) / \theta(x,y,0,t)$$

Op deze manier wordt een in wezen niet-lineaire beschrijving van de evolutie van de grondwaterspiegel gelineariseerd. In de bekende Dupuit-Forchheimer benadering komt deze linearisatie neer op het veronderstellen van een van de grondwaterspiegel onafhankelijke transmissiviteit (zie paragraaf 4.3).

2.12. Samenvatting van de probleemformulering

De onderrand van het gebied wordt gekozen op het vlak $z = d$, waar de randvoorwaarde $q_z(x,y,d,t) = 0$ is; de keuze van de diepte d , de zogenaamde "ondoortalende" basis is verre van triviaal en in de paragrafen 5.1 en 5.2 zal er een criterium voor de bepaling van d worden afgeleid.

Het stromingsprobleem, bestaande uit veldvergelijkingen (continuïteit en Darcy), de dynamische randvoorwaarde op $z = 0$ en de randvoorwaarde aan de ondoorlatende basis is lineair, hetgeen tot relatief eenvoudige wiskundige analyse leidt. Deze analyse is relatief eenvoudig, omdat voor lineaire problemen het superpositieprincipe geldt.

N.B. het bepalen van de evolutie in de tijd van de ruimtelijke variaties in de grondwaterspiegel is een niet-lineair probleem, waarvoor het superpositieprincipe dus niet geldt.

Na deze gedetailleerde uiteenzetting van de grondslagen zullen we nu een verdere uitwerking presenteren.

3. PERFECT GELAAGDE EN NIET-PERFECT GELAAGDE BEKKENS

3.1. Vier Laplace-type vergelijkingen

Invullen van de wet van Darcy in de continuïteitsvergelijking leidt tot de welbekende Laplace-type vergelijking voor de potentiaal ϕ :

$$\partial(k_h \partial\phi/\partial x)/\partial x + \partial(k_h \partial\phi/\partial y)/\partial y + \partial(k_z \partial\phi/\partial z)/\partial z = 0$$

Deze vergelijking zegt dat de vector $(k_h \partial\phi/\partial x, k_h \partial\phi/\partial y, k_z \partial\phi/\partial z)$ divergentievrij is.

Iets minder bekend is het dat voor een perfect gelaagde ondergrond ook drie Laplace-type vergelijkingen kunnen worden afgeleid voor $e_x = q_x/k_h = -\partial\phi/\partial x$, $e_y = q_y/k_h = -\partial\phi/\partial y$ en $q_z = -k_z \partial\phi/\partial z$:

$$\partial(k_h \partial e_x/\partial x)/\partial x + \partial(k_h \partial e_x/\partial y)/\partial y + \partial(k_z \partial e_x/\partial z)/\partial z = 0$$

$$\partial(k_h \partial e_y/\partial x)/\partial x + \partial(k_h \partial e_y/\partial y)/\partial y + \partial(k_z \partial e_y/\partial z)/\partial z = 0$$

$$\partial(k_z^{-1} \partial q_z/\partial x)/\partial x + \partial(k_z^{-1} \partial q_z/\partial y)/\partial y + \partial(k_h^{-1} \partial q_z/\partial z)/\partial z = 0$$

Deze vergelijkingen zeggen dat in een perfect gelaagde ondergrond de drie vectoren $(k_h \partial e_x/\partial x, k_h \partial e_x/\partial y, k_z \partial e_x/\partial z)$, $(k_h \partial e_y/\partial x, k_h \partial e_y/\partial y, k_z \partial e_y/\partial z)$ en $(k_z^{-1} \partial q_z/\partial x, k_z^{-1} \partial q_z/\partial y, k_h^{-1} \partial q_z/\partial z)$ divergentievrij zijn.

De randvoorwaarden voor een perfect gelaagde ondergrond zijn:

$$\text{op } z = 0: \begin{cases} \phi = f, & e_x = -\partial f/\partial x, & e_y = -\partial f/\partial y \\ \partial q_z/\partial z = k_h(0) (\partial^2 f/\partial x^2 + \partial^2 f/\partial y^2) \end{cases}$$

$$\text{op } z = d: \quad \partial\phi/\partial z = 0, \quad \partial e_x/\partial z = 0, \quad \partial e_y/\partial z = 0, \quad q_z = 0$$

Hierin is $f = f(x, y, t)$ de voorgeschreven potentiaal op het bovenvlak. We hebben bij een perfect gelaagd bekken dus te maken met vier ontkoppelde Laplace-type problemen, voor de vier grootheden ϕ , e_x , e_y en q_z . Voor elk van de vier Laplace-type problemen bestaat er een oplossing, de oplossing is eenduidig en de oplossing is continu in de randvoorwaarden en de parameters; met andere woorden, we hebben te maken met vier welgestelde problemen.

In deze vier Laplace-type problemen komt de tijd niet expliciet voor, maar wel impliciet als parameter in de freatische randvoorwaarde voor de (door ons beschouwde Fourier-component van de) potentiaal, en eventueel in de tijdsafhankelijkheid van de doorlatendheden. We kunnen het stromingsveld dus op elk gewenst tijdstip t oplossen, onafhankelijk van de oplossingen op andere tijdstippen.

Perfect gelaagde ondergronden spelen vaak een rol in de analyse van omwentelingssymmetrische problemen rond een put. In dat geval worden de vergelijkingen:

$$\partial[(k_h r) \partial\phi/\partial r]/\partial r + \partial[(k_z r) \partial\phi/\partial z]/\partial z = 0$$

$$\partial[(k_h r^{-1}) \partial(e_r r)/\partial r]/\partial r + \partial[(k_z r^{-1}) \partial(e_r r)/\partial z]/\partial z = 0$$

$$\partial[(k_z^{-1} r) \partial q_z/\partial r]/\partial r + \partial[(k_h^{-1} r) \partial q_z/\partial z]/\partial z = 0$$

waarin r en z de laterale en verticale cilindrische coördinaten zijn, en waarin e_r de component van (e_x, e_y) is in de radiële richting. De randvoorwaarden zijn:

$$\text{op } z = 0: \begin{cases} \phi = f, e_r = -\partial f / \partial r \\ \partial q_z / \partial z = k_h(0) r^{-1} \partial(r \partial f / \partial r) / \partial r \end{cases}$$

$$\text{op } z = d: [\partial \phi / \partial z = 0, \partial e_r / \partial z = 0, q_z = 0]$$

in combinatie met vrije convectie, ofwel dichtheidsstroming (vrije convectie leidt tot extra termen die hier niet worden behandeld) lijkt deze formulering zeker voordelen te bieden.

3.2. Het karakter van stroming in een perfect gelaagd medium

Het feit dat de vier bovengenoemde stelsels vergelijkingen met randvoorwaarden onderling ontkoppeld zijn betekent dat q_z kan worden berekend onafhankelijk van ϕ , e_x en e_y ; en hetzelfde geldt voor de andere drie grootheden. Deze ont koppeling zegt veel over het karakter van stroming in een perfect gelaagde ondergrond.

Zo zien we hieruit aan de randvoorwaarden dat q_z uitsluitend aangedreven wordt door de som van de tweede afgeleiden in de grondwaterspiegel $\partial^2 h_f / \partial x^2 + \partial^2 h_f / \partial y^2$ [$= r^{-1} \partial(r \partial h_f / \partial r) / \partial r$ in cilindersymmetrie]. Dus indien deze som overal op $z = 0$ gelijk aan nul is, dan is in het gehele stromingsveld $q_z(x, y, z, t)$ gelijk aan nul. Een grondwaterspiegel waarvoor geldt dat $\partial^2 h_f / \partial x^2 + \partial^2 h_f / \partial y^2 = 0$ noemen we een harmonische grondwaterspiegel. Enkele voorbeelden van een harmonische grondwaterspiegel zijn:

$$h_f(x, y) = h_0 + c_1 x + c_2 y \text{ (vlakke grondwaterspiegel)}$$

$$h_f(x, y) = c_3 \ln(r) = c_3 \ln[\{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2\}], (x, y) \neq (x_0, y_0)$$

$$h_f(x, y) = c_4 \exp(-x) \sin(y) \text{ (en varianten hierop)}$$

waarin h_0 , c_1 , c_2 , c_3 , x_0 en y_0 constanten zijn (eventueel wel afhankelijk van t). Ook alle lineaire combinaties van bovenbeschreven harmonische functies zijn harmonisch. Uit deze voorbeelden zien we dat kwel/infiltratie patronen samenhangen met afwijkingen van het harmonisch karakter van de grondwaterspiegel en niet zonder meer afhangen van het gekromd zijn van het freatisch vlak (zoals tweedimensionale doorsneden suggereren). Op grond hiervan zien we ook dat het misleidend is om $q_z(x, y, 0)$ (de kwel/infiltratie patronen) uit het verloop van h_f behorende bij een tweedimensionale doorsnede van de ondergrond te berekenen.

Uit de ont koppeling van de vergelijking voor $q_z(x, y, z, t)$ volgt ook dat bij ruimtelijk constante voeding $q_z(x, y, 0, t) = N(t)$ de verticale transportsnelheid $v_z(x, y, z, t)$ niet in de laterale richtingen verandert, terwijl de laterale snelheden uiteraard wel in laterale richting veranderen. We vinden dat:

$$q_z(x, y, z, t) = [N(t)/\theta] \int_z^d k_h(z') dz' / [\int_0^d k_h(z') dz']$$

Dit betekent dus dat het water zich in perfect gelaagde bekkens met ruimtelijk constante voeding in laterale vlakken van gelijke ouderdom van het water bevindt. Ook uniforme verspreide verontreinigingen, zoals tritium afkomstig van nucleaire explosies in de atmosfeer in het begin van de jaren 1960, zijn in zulke bekkens in laterale vlakken in de diepte verdeeld.

Aan de andere kant worden e_x en e_y aangedreven door de eerste afgeleiden in de grondwaterspiegel, $\partial h_f/\partial x$ en $\partial h_f/\partial y$ respectievelijk. Het zal, o.a. uit de hierboven gegeven voorbeelden van harmonische grondwaterspiegels, duidelijk zijn dat de laterale snelheden groot kunnen zijn (grote $\partial h_f/\partial x$, $\partial h_f/\partial y$) terwijl tegelijkertijd de verticale snelheid klein is (kleine $\partial^2 h_f/\partial x^2 + \partial^2 h_f/\partial y^2$). Vaak wordt daarom de kleine verticale snelheid verwaarloosd t.o.v. de grote laterale snelheid, maar toch is in sommige gevallen kennis van de verticale snelheid van belang, b.v. als we willen weten hoe diep een verontreiniging in de ondergrond is doorgedrongen, of hoeveel een zoet-zout grensvlak in de loop der eeuwen omhoog is gekomen.

De doorlatendheden $k_h(z)$ en $k_z(z)$ mogen discontinu zijn. Op de scheidingsvlakken $z = \delta$ waar k_h en k_z verspringen van $k_h(\delta-)$ en $k_z(\delta-)$ naar $k_h(\delta+)$ en $k_z(\delta+)$ zijn de vier grootheden ϕ , e_x , e_y en q_z continu, d.w.z. $\phi(\delta-) = \phi(\delta+)$, $e_x(\delta-) = e_x(\delta+)$, $e_y(\delta-) = e_y(\delta+)$ en $q_z(\delta-) = q_z(\delta+)$. Omdat de vier vectoren $(k_h \partial \phi/\partial x, k_h \partial \phi/\partial y, k_z \partial \phi/\partial z)$, $(k_h \partial e_x/\partial x, k_h \partial e_x/\partial y, k_z \partial e_x/\partial z)$, $(k_h \partial e_y/\partial x, k_h \partial e_y/\partial y, k_z \partial e_y/\partial z)$ en $(k_z^{-1} \partial q_z/\partial x, k_z^{-1} \partial q_z/\partial y, k_h^{-1} \partial q_z/\partial z)$ divergentievrij zijn, zijn ook $k_z \partial \phi/\partial z$, $k_z \partial e_x/\partial z$, $k_z \partial e_y/\partial z$ en $k_h^{-1} \partial q_z/\partial z$ continu. Dus, bij voorbeeld, $k_h(\delta-)^{-1} (\partial q_z/\partial z)_{(\delta-)} = k_h(\delta+)^{-1} (\partial q_z/\partial z)_{(\delta+)}$, waaruit volgt dat $(\partial q_z/\partial z)_{(\delta+)} = [k_h(\delta+)/k_h(\delta-)] (\partial q_z/\partial z)_{(\delta-)}$. Indien nu $[k_h(\delta+)/k_h(\delta-)] \rightarrow 0$, d.w.z. boven $z = \delta$, op $z = \delta-$, bevindt zich een goed doorlatende laag (een aquifer) en onder $z = \delta$, op $z = \delta+$, bevindt zich een slecht doorlatende laag (een aquitard), vinden we het bekende resultaat dat $(\partial q_z/\partial z)_{(\delta+)} \rightarrow 0$. Bij een voldoende dunne aquitard betekent dit dat q_z constant blijft over de dikte van de aquitard. Omgekeerd geldt dat q_z sterk verandert (uitdempt) over de dikte van een aquifer. Een soortgelijke redenering voor ϕ , e_x en e_y geeft het bekende resultaat dat ϕ , e_x en e_y weinig veranderen over de diepte van een aquifer en we zien ook dat ϕ , e_x en e_y veel veranderen (sterk uitdempen) over de dikte van een aquitard.

3.3. Laterale heterogeniteiten

Op plaatsen waar laterale heterogeniteiten in de doorlatendheden optreden krijgt het stromingsgedrag een geheel ander karakter; daar zijn e_x , e_y en q_z wel met elkaar gekoppeld en gaan de in paragraaf 3.2 gegeven redeneringen over kwel/infiltratie patronen veroorzaakt door afwijkingen van harmonische grondwaterspiegels, e.d. dus niet meer op. Het bestuderen van het gekoppelde stromingsgedrag in de nabijheid van laterale heterogeniteiten in de doorlatendheid kan interessante inzichten opleveren en is ook praktisch van belang. We zullen er in dit college echter slechts zeer kort op ingaan.

Indien we met een lateraal stuksgewijs perfect gelaagde ondergrond te maken hebben, gelden in elk perfect gelaagd stuk van de ondergrond de eerder beschreven Laplace-type vergelijkingen voor e_x , e_y en q_z . Met behulp van continuïteitscondities op de vlakken die twee verschillende perfect gelaagde gebieden van elkaar scheiden, kunnen we dan de oplossingen in beide gebieden aan elkaar koppelen. Op deze methodiek, die in principe op alle

vormen van heterogeniteit is toe te passen, zullen we hier echter niet verder ingaan.

Voor een meer beperkte klasse van heterogene ondergrondse doorlatendheidsverdelingen kunnen we een stelsel gekoppelde vergelijkingen opschrijven voor e_x , e_y en q_z (wegens de koppeling zijn het geen Laplace-type vergelijkingen meer). De doorlatendheden moeten dan voldoen aan:

$$k_h(x,y,z) = k_{h0}(z) \exp[\lambda_h(x,y,z)]$$

$$k_z(x,y,z) = k_{z0}(z) \exp[\lambda_z(x,y,z)]$$

waarbij $k_{h0}(z)$ en $k_{z0}(z)$ de in de vorige paragrafen beschreven discontinue functies $k_h(z)$ en $k_z(z)$ van z voor perfect gelaagde media zijn. De functies $\lambda_h(x,y,z)$ en $\lambda_z(x,y,z)$ mogen echter niet discontinu zijn; zij moeten voldoende "glad" zijn (d.w.z. voldoende vaak differentieerbaar). De gevallen waarin $\lambda_h = \lambda_z = 0$ komen uiteraard overeen met de in dit dictaat uitvoerig beschreven perfect gelaagde bekkens.

De in de volgende paragrafen voor perfect gelaagde bekkens beschreven methode van reeksontwikkeling (storingsreeksen) is niet toepasbaar op heterogene poreuze media met discontinue laterale heterogeniteiten, maar is wel uitbreidbaar naar bekkens met de hierboven gepresenteerde voldoende "glad" verlopende laterale heterogeniteiten in de doorlatendheden. Wel zij opgemerkt dat sommige (niet alle) eindresultaten met ingewikkelder formules worden beschreven dan met de formules voor perfect gelaagde media. Het in de volgende paragrafen meer diepgaand behandelen van perfect gelaagde bekkens hoeft dus niet als een doodlopend pad te worden beschouwd, maar dient als inzichtgevend voorbeeld; uitbreiding van de gevolgde methodiek naar bekkens met voldoende "gladde" laterale heterogeniteiten in de doorlatendheden is in principe altijd mogelijk. En er is een grote klasse van praktische geohydrologische problemen waarvoor de bovengegeven voldoende "gladde" laterale heterogeniteiten een goede benadering van de werkelijkheid geeft.

De gekoppelde veldvergelijkingen zijn:

$$\begin{aligned} & \partial(k_h \partial e_x / \partial x) / \partial x + \partial(k_h \partial e_x / \partial y) / \partial y + \partial(k_z \partial e_x / \partial z) / \partial z + \\ & + k_h e_x \partial^2 \lambda_h / \partial x^2 + k_h e_y \partial^2 \lambda_h / \partial y \partial x + q_z \partial^2 \lambda_z / \partial z \partial x \\ & - \partial \xi / \partial x \partial q_z / \partial z = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \partial(k_h \partial e_y / \partial x) / \partial x + \partial(k_h \partial e_y / \partial y) / \partial y + \partial(k_z \partial e_y / \partial z) / \partial z + \\ & + k_h e_x \partial^2 \lambda_h / \partial x \partial y + k_h e_y \partial^2 \lambda_h / \partial y^2 + q_z \partial^2 \lambda_z / \partial z \partial y \\ & - \partial \xi / \partial y \partial q_z / \partial z = 0 \end{aligned}$$

$$\partial(k_z^{-1} \partial q_z / \partial x) / \partial x + \partial(k_z^{-1} \partial q_z / \partial y) / \partial y + \partial(k_h^{-1} \partial q_z / \partial z) / \partial z +$$

$$\begin{aligned}
& + e_x \partial^2 \lambda_h / \partial z \partial x + e_y \partial^2 \lambda_h / \partial z \partial y \\
& - k_h^{-1} q_z [\partial(\alpha \partial \lambda_z / \partial x) / \partial x + \partial(\alpha \partial \lambda_z / \partial y) / \partial y] + \\
& + k_z^{-1} (\partial \xi / \partial x \partial q_z / \partial x + \partial \xi / \partial y \partial q_z / \partial y) = 0
\end{aligned}$$

waarin:

$$\begin{aligned}
\alpha(x, y, z) &= k_h(x, y, z) / k_z(x, y, z) = \\
&= [k_{h0}(z) / k_{z0}(z)] \exp[\lambda_h(x, y, z) - \lambda_z(x, y, z)]
\end{aligned}$$

de anisotropiefactor is, en waarin:

$$\xi(x, y, z) = \lambda_h(x, y, z) - \lambda_z(x, y, z)$$

In veel praktische problemen wordt, om redenen van datareductie, de anisotropiefactor α alleen als functie van z , of zelfs constant, genomen. In dat geval vereenvoudigen de drie bovengegeven vergelijkingen omdat dan de laatste termen dan wegvallen en de voorlaatste term in de laatste vergelijking vereenvoudigt.

De randvoorwaarden zijn:

$$\text{op } z = 0: \begin{cases} \phi = f, e_x = -\partial f / \partial x, e_y = -\partial f / \partial y \\ \partial q_z / \partial z = \partial(k_h \partial f / \partial x) / \partial x + \partial(k_h \partial f / \partial y) / \partial y \end{cases}$$

$$\text{op } z = d: [\partial \phi / \partial z = 0, \partial e_x / \partial z = 0, \partial e_y / \partial z = 0, q_z = 0]$$

Op deze manier zien we wat voldoende glad betekent: alle in de vergelijkingen voorkomende afgeleiden van de doorlatendheden moeten bestaan.

3.4. Berekenen van snelheden m.b.v. de eigen vergelijkingen

Juist om de onafhankelijkheid en het daarmee gepaard gaande schaal- en karakterverschil en tussen laterale en verticale snelheidscomponenten in perfect gelaagde bekkens niet met elkaar te verwarren is het goed om elke snelheidscomponent met behulp van zijn eigen Laplace-type vergelijking en zijn eigen randvoorwaarden te beschouwen. We zullen in de volgende paragrafen zien dat dit tot een systematische opbouw van de analytisch wiskundige uitwerking leidt, maar het heeft soms ook voordelen als we de stroming met numerieke methoden willen bepalen.

Eén voordeel is dat op deze manier de snelheid van convergentie bij roosterverfijning een orde hoger is dan wanneer de snelheid uit de eerst berekende potentiaal wordt gehaald. Bij voorbeeld, indien de potentiaal met convergentie-orde $h^{3/2}$ wordt bepaald wordt de uit deze potentiaal berekende snelheid orde $h^{1/2}$, terwijl bij het oplossen van de vergelijkingen voor e_x , e_y en q_z de orde van convergentie $h^{3/2}$ is (h is hier de grootte van de ruimtelijke discretisatie). Indien gebruik moet worden gemaakt van roosterverfijning is dit een groot voordeel.

Een ander voordeel ligt in het nauwkeurig bepalen van kleine verticale snelheidscomponenten in perfect gelaagde ondergronden. Bij bepaling van deze componenten uit het verschil tussen op twee nabij gelegen punten

numeriek berekende potentialen kunnen door kleine numerieke fouten in de potentialen (b.v. veroorzaakt door het te vroeg afbreken van iteraties) grote fouten in deze snelheidscomponenten optreden. Bij het direct uitrekenen van q_z spelen deze fouten geen rol (zie ook paragraaf 4.2).

Weer een ander voordeel is dat vergelijking van de numerieke oplossingen voor $\text{div}(\mathbf{q})$ en $\text{curl}(\mathbf{e})$ (de z.g. residuen) met de vier exacte oplossingen $\text{div}(\mathbf{q}) = \partial q_x/\partial x + \partial q_y/\partial y + \partial q_z/\partial z = 0$, $\text{curl}(\mathbf{e}) = (\partial e_z/\partial y - \partial e_y/\partial z, \partial e_x/\partial z - \partial e_z/\partial x, \partial e_y/\partial x - \partial e_x/\partial y) = (0,0,0) = 0$ gebruikt kan worden om een indruk van de, bij een bepaalde discretisatie behorende, nauwkeurigheid van de numerieke benaderingsmethode te verkrijgen. Bedenk wel dat een numerieke methode nooit exacte oplossingen, maar slechts benaderde oplossingen geeft, en het zou goed zijn om op zijn minst achteraf, na een numerieke berekening, informatie over de grootte van de afwijking der benaderde oplossing ten opzichte van de exacte oplossing te kennen. Op grond van deze informatie kan eventueel besloten worden tot (lokale) roosterverfijning. Bij het berekenen van snelheden uit numeriek berekende potentialen is zo'n eenvoudige afschatting niet mogelijk.

Bij toepassing van de gebruikelijke conforme eindige-elementenmethode verkrijgen we een snelheidsveld dat overal continu is; bij het berekenen van het snelheidsveld uit de berekende potentialen is het snelheidsveld discontinu op de elementranden, hetgeen een betrouwbare berekening van stroombanen bemoeilijkt. Ook zijn er voordelen in situaties waarin dichtheidsstroming optreedt (hier niet behandeld).

Concluderend kunnen we zeggen dat het direct berekenen van e_x , e_y en q_z perfect werkt voor perfect gelaagde bekkens, maar dat er bij aanwezigheid van laterale heterogeniteiten ook nadelen optreden.

Eén nadeel is dat de laterale heterogeniteiten voldoende glad moeten verlopen (dus geen laterale sprongen in de doorlatendheden).

Een ander nadeel is dat bij aanwezigheid van laterale heterogeniteiten de resulterende matrix niet positief definit is. Dit laatste heeft tot gevolg dat bekende iteratieve technieken om stelsels lineaire vergelijkingen op te lossen (b.v. successieve overrelaxatie of gepreconditioneerde geconjugeerde gradiënten) niet toepasbaar zijn. Dit laatste bezwaar is overigens te omzeilen door de termen die de matrix niet-positief definit maken op voorhand te berekenen m.b.v. berekening van de potentiaal; in dat geval daalt de orde van de convergentiesnelheid bij roosterverfijning iets.

Concluderend kunnen we zeggen dat het direct berekenen van e_x , e_y en q_z toepasbaar is voor "bijna"-gelaagde, of laag-geöriënteerde ondergronden.

De bij de TNO Dienst Grondwaterverkenning ontwikkelde modelcodes Flosa (driedimensionale stroming) en Tdflow (tweedimensionale stroming) bieden zowel de mogelijkheid van berekening van de potentiaal en daaruit berekening van de snelheden (voor volledig heterogene ondergronden), als ook de mogelijkheid van directe berekening van e_x , e_y en q_z (voor laag-geöriënteerde ondergronden).

Ten slotte zij nog vermeld dat het direct berekenen van $\mathbf{q} = (q_x, q_y, q_z)$ m.b.v. de vector-vergelijking:

$$\nabla^2 \mathbf{q} - \text{grad}(\lambda) \cdot \text{grad}(\mathbf{q}) = \mathbf{q} \nabla^2 \lambda - \mathbf{q} \cdot \text{grad}[\text{grad}(\lambda)]$$

een belangrijke rol speelt bij de theorie van stroming in stochastische poreuze media. In bovenstaande formule, die hier gemakshalve is gegeven voor een isotrope ondergrond met doorlatendheid $k(\mathbf{x}) = k_0 \exp[\lambda(\mathbf{x})]$, is $\text{grad}(\mathbf{a}) = \partial_i a_j$ ($i, j = 1, 2, 3$) een tensor; de vector-laplaciaan $\nabla^2 \mathbf{a} = \text{div}[\text{grad}(\mathbf{a})]$ is een vector; en $\text{div}(\mathbf{b}) = \partial_i b_{ij}$ (sommatie over de twee maal voorkomende index i) ($j = 1, 2, 3$) is een vector. Bovenstaande vergelijking

is lineair in de logaritme van de doorlatendheid. Voor deze logaritme wordt een zekere ruimtelijke verdeling, b.v. een normale verdeling, aangenomen en de z.g. spectraaloplossingen voor de volumestroomdichtheidsvector zijn op bovenstaande "lineaire" vergelijking gebaseerd; zie [Ababou, Gelhar and McLaughlin, 1988]. Wij zullen in dit dictaat echter niet ingaan op stochastische methoden.

3.5. Fourier-analyse van ruimtelijke variaties in de grondwaterspiegel

Op de eerste plaats is het voor het inzicht belangrijk om de ruimtelijke variaties van de ruimtelijk tweedimensionale grondwaterspiegel $h_f(x,y,t)$ (op elk tijdstip t) te schrijven als de dubbele integraal van de Fourier-getransformeerde $h_f^*(w_x, w_y, t)$ (zie b.v. [Rikitake, Sato and Hagiwara, pp. 3-19, 1987]):

$$h_f(x,y,t) = \int_{-\infty-\infty}^{\infty \infty} h_f^*(w_x, w_y, t) \exp[-i(w_x x + w_y y)] dw_x dw_y$$

Hierin is $i = \sqrt{-1}$; $h_f^*(w_x, w_y, t)$ is de (in het algemeen complexe) Fourier-getransformeerde van $h_f(x,y,t)$; $w_x = 1/l_x$ [m^{-1}] en $w_y = 1/l_y$ [m^{-1}] zijn de golfgetallen ($-\infty < w_x, w_y < +\infty$); de lengtes $2\pi|l_x| = 2\pi/|w_x|$ [m] en $2\pi|l_y| = 2\pi/|w_y|$ [m] zijn de golflengten in respectievelijk de x- en de y-richting.

Voor de in de hydrogeologische praktijk voorkomende ruimtelijke variaties in de grondwaterspiegel bestaat zo'n Fourier-getransformeerde.

Met behulp van de bekende formule $\exp[-i(w_x x + w_y y)] = \cos(w_x x + w_y y) - i \sin(w_x x + w_y y)$ en met $h_f^*(w_x, w_y, t) = a(w_x, w_y, t) + i b(w_x, w_y, t)$, a en b reëel, vinden we uit de bovengegeven formule de volgende uitdrukking:

$$h_f(x,y,t) = \int_{-\infty-\infty}^{\infty \infty} [a(w_x, w_y, t) \cos(w_x x + w_y y) + b(w_x, w_y, t) \sin(w_x x + w_y y)] dw_x dw_y$$

Omdat ons stromingsprobleem lineair is kunnen we de vier oplossingen, d.w.z. het scalaire potentiaalveld en het vectoriële snelheidsveld, afzonderlijk bepalen voor elke Fourier-component h_{fw} :

$$h_{fw}(x,y,t) = a(w_x, w_y, t) \cos(w_x x + w_y y) + b(w_x, w_y, t) \sin(w_x x + w_y y)$$

Daarna kunnen we al deze oplossingen integreren over $w = (w_x, w_y)$ om zo de volledige oplossing te verkrijgen. Dit is een toepassing van het superpositieprincipe. In het vervolg van de discussie kijken we daarom steeds naar één bepaalde Fourier-component, waarbij we uiteindelijk zullen constateren dat Fourier-componenten met lange golven, d.w.z. met grote waarden van $2\pi l_c$, $l_c = 1/\sqrt{(w_x^2 + w_y^2)}$, op veel grotere diepte z invloed hebben op de stroming dan Fourier-componenten met korte golven.

3.6. Damping met toenemende diepte

Uit de bovengenoemde vier Laplace-type vergelijkingen voor ϕ , e_x , e_y en q_z voor een perfect gelaagd bekken, hebben we al het één en ander ingezien over het gedrag van de oplossingen; vooral over het uitdempen van de potentiaal en de stromingssnelheden met toenemende diepte (hier wordt geen uitdempen in de tijd bedoeld, maar uitsluitend uitdempen met toenemende diepte) en over het gedrag op de overgang tussen goed doorlatende lagen (aquifers) en slecht doorlatende lagen (aquitards). Nadere analyse leert dat stroming veroorzaakt door kleinschalige ruimtelijke variaties in de grondwaterspiegel (de Fourier-componenten met korte golflengtes) bij toenemende diepte veel sterker uitdempt dan stroming veroorzaakt door grootschalige ruimtelijke variaties (de Fourier-componenten met lange golflengtes) (ten overvloede, het woord golven slaat op het ruimtelijk gedrag van de grondwaterspiegel en niet op het gedrag in de tijd). We hebben al gezien dat ϕ , e_x en e_y vooral uitdempen bij toenemende diepte in aquitards en dat q_z vooral uitdempt bij toenemende diepte in aquifers. Dit heeft gevolgen voor de diepte waarop de invloed van ruimtelijke variaties in de grondwaterspiegel, variaties met verschillende golflengten, in de ondergrond doordringt. De indringingsdiepte is afhankelijk van de beschouwde ruimtelijke golflengte, hetgeen betekent dat een verantwoorde keuze van de minimumdiepte van de "ondoorlatende basis" d ook golflengteafhankelijk moet zijn (de theoretisch beste keuze is $d \rightarrow \infty$, maar dit is in praktische modelstudies natuurlijk niet haalbaar).

4. GROOTSCHALIGE KARAKTERISTIEKE DOORLATENDHEDEN

4.1. Karakteristieke en dimensieloze grootheden

Om de in paragraaf 3.6 gegeven redenering om te zetten in een kwantitatief criterium voeren we z.g. karakteristieke grootheden in. In paragraaf 2.3 hebben we reeds kennis gemaakt met karakteristieke lengtes en tijden en de relatie hiertussen bij het proces van elastische berging. We kijken hier nu naar de karakteristieke amplitude $\phi^0 = \rho_0 g \sqrt{(a^2 + b^2)}$ (voor de definities van a en b zie paragraaf 3.5), de laterale karakteristieke lengte $l_c = 1/\sqrt{(1/l_x^2 + 1/l_y^2)}$, de verticale karakteristieke lengte d , de karakteristieke laterale doorlatendheid k_{hc} en de karakteristieke verticale doorlatendheid k_{zc} . Een zinvolle definitie van karakteristieke doorlatendheden is voor heterogene poreuze media niet zo gemakkelijk te geven, we komen er later uitgebreid op terug (zie paragraaf 4.4).

Met behulp van de karakteristieke grootheden kunnen we alle grootheden dimensieloos maken: $X = x/l_c$ en $Y = y/l_c$ zijn de dimensieloze laterale coördinaten; $Z = z/d$ is de dimensieloze verticale coördinaat; $K_h = k_h/k_{hc}$ en $K_z = k_z/k_{zc}$ zijn respectievelijk de dimensieloze laterale en verticale doorlatendheid; $F = f/\phi^0$ en $\Phi = \phi/\phi^0$ zijn dimensieloze potentialen; en $E_x = e_x l_c/\phi^0$, $E_y = e_y l_c/\phi^0$ en $Q_z = q_z l_c^2/(\phi^0 d k_{hc})$ zijn de dimensieloze "fluxen". Op deze manier kunnen we de vergelijkingen in dimensieloze vorm schrijven. In deze dimensieloze vergelijkingen speelt het dimensieloze getal $\sigma = (d/l_c)^2 (k_{hc}/k_{zc})$ een belangrijke rol (voorstel: we noemen dit het getal van Tóth).

De dimensieloze Poisson-type vergelijkingen zijn:

$$\sigma \partial(K_h \partial\Phi/\partial X)/\partial X + \sigma \partial(K_h \partial\Phi/\partial Y)/\partial Y + \partial(K_z \partial\Phi/\partial Z)/\partial Z = 0$$

$$\begin{aligned} & \sigma \partial(K_h \partial E_x/\partial X)/\partial X + \sigma \partial(K_h \partial E_x/\partial Y)/\partial Y + \partial(K_z \partial E_x/\partial Z)/\partial Z + \\ & + \sigma K_h E_x \partial^2 \lambda_h/\partial X^2 + \sigma K_h E_y \partial^2 \lambda_h/\partial Y \partial X + \sigma Q_z \partial^2 \lambda_z/\partial Z \partial X \\ & - \sigma \partial \xi/\partial X \partial Q_z/\partial Z = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \sigma \partial(K_h \partial E_y/\partial X)/\partial X + \sigma \partial(K_h \partial E_y/\partial Y)/\partial Y + \partial(K_z \partial E_y/\partial Z)/\partial Z + \\ & + \sigma K_h E_x \partial^2 \lambda_h/\partial X \partial Y + \sigma K_h E_y \partial^2 \lambda_h/\partial Y^2 + \sigma Q_z \partial^2 \lambda_z/\partial Z \partial Y \\ & - \sigma \partial \xi/\partial Y \partial Q_z/\partial Z = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \sigma \partial(K_z^{-1} \partial Q_z/\partial X)/\partial X + \sigma \partial(K_z^{-1} \partial Q_z/\partial Y)/\partial Y + \partial(K_h^{-1} \partial Q_z/\partial Z)/\partial Z + \\ & + E_x \partial^2 \lambda_h/\partial Z \partial X + E_y \partial^2 \lambda_h/\partial Z \partial Y \\ & - \sigma K_h^{-1} Q_z [\partial(A \partial \lambda_z/\partial X)/\partial X + \partial(A \partial \lambda_z/\partial Y)/\partial Y] + \\ & + \sigma K_z^{-1} (\partial \xi/\partial X \partial Q_z/\partial X + \partial \xi/\partial Y \partial Q_z/\partial Y) = 0 \end{aligned}$$

waarin:

$$A(x,y,z) = K_h(X,Y,Z)/K_z(X,Y,Z) = \\ = [K_{h0}(Z)/K_{z0}(Z)] \exp[\lambda_h(X,Y,Z) - \lambda_z(X,Y,Z)]$$

en waarin:

$$\xi(X,Y,Z) = \lambda_h(X,Y,Z) - \lambda_z(X,Y,Z)$$

De randvoorwaarden zijn:

$$\text{op } Z = 0: \begin{cases} \Phi = F, E_x = -\partial F/\partial X, E_y = -\partial F/\partial Y \\ \partial Q_z/\partial Z = \partial(K_h \partial F/\partial X)/\partial X + \partial(K_h \partial F/\partial Y)/\partial Y \end{cases}$$

$$\text{op } Z = 1: [\partial \Phi/\partial Z = 0, \partial E_x/\partial Z = 0, \partial E_y/\partial Z = 0, Q_z = 0]$$

Een noodzakelijke voorwaarde voor het gelijkvormig zijn van meerdere stromingsproblemen is dat voor al deze problemen het getal σ (het getal van Tóth) hetzelfde is (dit is geen voldoende voorwaarde), maar, zoals later zal blijken, speelt het getal σ (het getal van Tóth) nog een andere belangrijke rol. Het zal namelijk blijken dat de voorwaarde $\sqrt{\sigma} \approx 1$ de grootteorde aangeeft van de diepte van de "ondoorlatende basis". Dit is vooral van belang bij numerieke modelstudies, waarbij de dimensies van het te modelleren driedimensionale gebied moeten worden gekozen.

4.2. De Dupuit-benadering

Laat ons beginnen met een citaat van de bekende transportfysicus Morris Muskat:

"Although the assumptions of the Dupuit-Forchheimer theory of gravity-flow systems now appear to be so questionable as to make the whole theory untrustworthy unless applied with great care, its widespread and indiscriminate use even at present demands at least a brief outline of its fundamental features."

(uit: M. Muskat, The Flow of Homogeneous Fluids through Porous Media, pp. 359-365, New York, 1937)

De oplossing van het stromingsprobleem kan worden gevonden door middel van een reeksontwikkeling van de dimensieloze Φ , E_x , E_y en Q_z in machten van σ :

$$\Phi = \Phi_0 + \sigma \Phi_1 + \sigma^2 \Phi_2 + \dots + \sigma^n \Phi_n + \dots$$

$$E_x = E_{x0} + \sigma E_{x1} + \sigma^2 E_{x2} + \dots + \sigma^n E_{xn} + \dots$$

$$E_y = E_{y0} + \sigma E_{y1} + \sigma^2 E_{y2} + \dots + \sigma^n E_{yn} + \dots$$

$$Q_z = Q_{z0} + \sigma Q_{z1} + \sigma^2 Q_{z2} + \dots + \sigma^n Q_{zn} + \dots$$

Bovenstaande reeksontwikkelingen worden gesubstitueerd in de dimensieloze vergelijkingen. Op deze manier worden de vergelijkingen ook machtreksen van σ met som nul. Aangezien σ elke waarde mag hebben moeten alle

afzonderlijke termen in de machtreeks gelijk aan nul zijn. Deze analytisch wiskundige methode staat bekend onder de naam "storingsrekening"; voor meer details zie b.v. [Van Dyke, 1975].

De termen in de vergelijkingen behorende bij de nulde macht van σ resulteren in vergelijkingen met als oplossingen de welbekende Dupuit-benadering (het woord "benadering" gebruiken we hier in de betekenis van het engelse woord "approximation"; voor het woord "benadering" in de betekenis van het engelse woord "approach" zullen we het woord "aanpak" gebruiken). Teruggerekend naar dimensievolle grootheden worden de nulde-orde vergelijkingen (ook voor het in paragraaf 3.3 gepresenteerde lateraal heterogene bekken) gegeven door:

$$\partial(k_z \partial\phi_0/\partial z)/\partial z = 0$$

$$\partial(k_z \partial e_{x0}/\partial z)/\partial z = 0$$

$$\partial(k_z \partial e_{y0}/\partial z)/\partial z = 0$$

$$\partial(k_h^{-1} \partial q_{z0}/\partial z)/\partial z + e_{x0} \partial^2 \alpha_h / \partial z \partial x + e_{y0} \partial^2 \alpha_h / \partial z \partial y = 0$$

Uit bovenstaande vergelijkingen en de randvoorwaarden zoals gegeven in paragraaf 3.3 volgt dat de Dupuit-benadering gegeven wordt door de volgende welbekende vergelijkingen:

$$\phi_0(x,y,z,t) = f(x,y,t)$$

$$e_{x0}(x,y,z,t) = - \partial f(x,y,t) / \partial x$$

$$e_{y0}(x,y,z,t) = - \partial f(x,y,t) / \partial y$$

$$q_{z0}(x,y,z,t) = - \partial [t_0(x,y,z) \partial f(x,y,t) / \partial x] / \partial x + \\ - \partial [t_0(x,y,z) \partial f(x,y,t) / \partial y] / \partial y$$

waarin $t_0(x,y,z)$ [$\text{m}^3 \cdot \text{Pa}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$; $\text{m}^3 \cdot \text{mH}_2\text{O}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$] de z.g. driedimensionale transmissiviteit is:

$$t_0(x,y,z) = \int_z^d k_h(x,y,z') dz'$$

We noemen deze transmissiviteit driedimensionaal omdat zij zowel een functie is van de twee laterale coördinaten x en y , als ook van de verticale coördinaat z . De in de hydrologie meer gebruikelijke transmissiviteit $T(x,y)$ of $kD(x,y)$ is gelijk aan $t_0(x,y,0)$; dit is een tweedimensionale transmissiviteit omdat zij alleen een functie is van de twee laterale coördinaten x en y . Het zij opgemerkt dat de Dupuit-benaderingen voor e_x , e_y en q_z wel exact aan de continuïteitsvergelijking voldoen, maar niet aan de wet van Darcy.

Indien we de fluxen e_x en e_y met behulp van $e_x = - \partial \phi / \partial x$, $e_y = - \partial \phi / \partial y$ zouden bepalen uit de Dupuit-benadering voor de potentiaal ϕ_0 , dan zouden we de correcte nulde-orde benaderingen e_{x0} en e_{y0} verkrijgen. Echter, het bepalen van q_z m.b.v. $q_z = - k_z \partial \phi / \partial z$ zou $q_z = 0$ in plaats van q_{z0} opleveren. Hieruit volgt ook een waarschuwing voor numerieke oplossingsmethoden. In situaties waarin $\sigma \ll 1$ kunnen we de potentiaal

m.b.v. een numerieke methode uitrekenen. Echter, door afrondfouten (b.v. bij het "te snel" afbreken van iteraties benodigd voor het oplossen van het stelsel lineaire vergelijkingen) is het mogelijk dat de hogere-orde termen in de potentiaal (de termen ϕ_1 enz.) niet voldoende nauwkeurig worden berekend. De verticale snelheidscomponent q_z wordt daardoor als "ruis" rond de waarde nul berekend. Het direct berekenen van q_z met de daarvoor afgeleide vergelijking ondervangt dit bezwaar. Ook het met behulp van de continuïteitsvergelijking berekenen van q_z uit e_x en e_y levert het correcte resultaat; zie ook paragraaf 4.6.

Uit $q_x = k_h e_x$ en $q_y = k_h e_y$ en uit de definities van de over de diepte van de ondergrond geïntegreerde fluxen J_x en J_y [$\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$; $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$]:

$$J_x(x,y,t) = \int_0^d q_x(x,y,z,t) dz$$

$$J_y(x,y,t) = \int_0^d q_y(x,y,z,t) dz$$

volgen met behulp van bovengenoemde Dupuit-benaderingen de volgende welbekende uitdrukkingen:

$$J_{x0}(x,y,t) = - T(x,y) \partial f(x,y,t) / \partial x$$

$$J_{y0}(x,y,t) = - T(x,y) \partial f(x,y,t) / \partial y$$

waarin $T(x,y) = t_0(x,y,0)$ de (tweedimensionale) transmissiviteit is. Helaas worden in het dagelijkse spraakgebruik bovenvermelde vergelijkingen ook vaak "de wet van Darcy" genoemd. Dit slordige taalgebruik kan aanleiding geven tot misverstanden. Wat bijvoorbeeld te denken van de paradox: "de wet van Darcy" voldoet niet exact aan de wet van Darcy. Het ware beter om in dit geval te spreken van de Dupuit-benadering.

We moeten goed bedenken dat de hierboven gepresenteerd Dupuit-benadering tot grote fouten aanleiding kan geven. Als extreem, maar illustratief voorbeeld waarin de hierboven gegeven Dupuit-benadering beslist niet opgaat beschouwen we de volgende doorlatendheidsverdeling in een tweedimensionale doorsnede van de ondergrond:

voor $x < 0$:

$$k_h = k_z = 0,1 \text{ m}^2 \cdot \text{mH}_2\text{O}^{-1} \cdot \text{d}^{-1} \quad \text{voor } 0 < z < d/2$$

$$k_h = k_z = 0,9 \text{ m}^2 \cdot \text{mH}_2\text{O}^{-1} \cdot \text{d}^{-1} \quad \text{voor } d/2 < z < d$$

voor $x \geq 0$:

$$k_h = k_z = 0,9 \text{ m}^2 \cdot \text{mH}_2\text{O}^{-1} \cdot \text{d}^{-1} \quad \text{voor } 0 < z < d/2$$

$$k_h = k_z = 0,1 \text{ m}^2 \cdot \text{mH}_2\text{O}^{-1} \cdot \text{d}^{-1} \quad \text{voor } d/2 < z < d$$

In dit voorbeeld is de hierboven gedefinieerde transmissiviteit $T(x)$ voor alle waarden van x gelijk aan $T = 0,5 \text{ m}^3 \cdot \text{mH}_2\text{O}^{-1} \cdot \text{d}^{-1}$; er is dus continuïteit (geen sprong) in de transmissiviteit op $x = 0$. Op grond van de

Dupuit-benadering vinden we dan, bij een op het bovenvlak aangelegd lineair potentiaalverloop met een gradiënt van $0,01 \text{ mH}_2\text{O.d}^{-1}$, een uniforme laterale flux van $0,005 \text{ m}^2.\text{d}^{-1}$ en geen verticale stroming. Zoals we echter onmiddellijk uit het plaatje van bovenstaande doorlatendheidsverdeling kunnen zien, vormt de doorlatendheidsverdeling in de ondergrond op $x = 0$ een slecht doorlatende barrière, hetgeen aanleiding geeft tot een totaal ander stromingsbeeld dan berekend met de Dupuit-benadering. De Dupuit-benadering geldt hier niet omdat op $x = 0$ de laterale afgeleiden van de doorlatendheden zeer groot zijn, waardoor de hogere-orde termen niet verwaarloosbaar zijn.

In de paragrafen 4.4 en 4.6 zullen we daarom de hogere-orde termen nader bekijken. Het blijkt dan in sommige situaties mogelijk om de Dupuit-benadering te generaliseren door invoering van een gegeneraliseerde transmissiviteit die rekening houdt met laterale afgeleiden in de doorlatendheden.

4.3. De Dupuit-Forchheimer benadering

Combinatie van de Dupuit-benadering $q_{z0}(x,y,0,t)$ als benadering voor $q_z(x,y,0,t)$ en de eerder besproken geprojecteerde dynamische en kinematische randvoorwaarden levert de welbekende, in de hydrologie zeer populaire Dupuit-Forchheimer benadering die de evolutie in de tijd van $h_f(x,y,t)$ beschrijft:

$$\begin{aligned} [\theta(0)/\rho(0) \text{ g}] \partial h_f / \partial t = & \partial \{ [t_0(0) + k_h(0) h_f] \partial h_f / \partial x \} / \partial x + \\ & + \partial \{ [t_0(0) + k_h(0) h_f] \partial h_f / \partial y \} / \partial y + \\ & + P_a / [\rho(0) \text{ g}] \\ & - k_h(0) h_f (\partial^2 h_f / \partial x^2 + \partial^2 h_f / \partial y^2) \end{aligned}$$

hierin is alleen de afhankelijkheid van z genoteerd en zijn de afhankelijkheden van x , y en t kortheidshalve weggelaten, dus b.v. $h_f = h_f(x,y,t)$, $k_h(0) = k_h(x,y,0)$ enz. Gemakshalve hebben we hier ook verondersteld dat $h_f = h_{fv}$, dat wil zeggen dat we in een exact horizontaal-verticaal coördinatenstelsel werken. Correcties voor ten opzichte van de horizontaal hellende bekkens zijn uiteraard mogelijk; dit zullen we hier echter niet behandelen.

De laatste term van het rechterlid van deze vergelijking is het gevolg van projectie op $z = 0$ van de dynamische randvoorwaarde. De conditie waaronder we projectie van de randvoorwaarden mochten toepassen is dat $d \gg |h_f|$, ofwel dat $t_0(0) \gg k_h(0) |h_f|$, en dus mogen we deze laatste term verwaarlozen. Het resultaat is een niet-lineaire vergelijking ter bepaling van de evolutie van de grondwaterspiegel $h_f(x,y,t)$ met een van h_f afhankelijke transmissiviteit $T(x,y,t) = t_0(x,y,0) + k_h(x,y,0) h_f(x,y,t)$. Als we de termen $v_x \partial h_f / \partial x$ en $v_y \partial h_f / \partial y$ in de kinematische randvoorwaarde hadden verwaarloosd zou de term $k_h(0) h_f$ in de uitdrukking voor de transmissiviteit zijn weggefallen en zou de beschrijving van de evolutie van $h_f(x,y,t)$ lineair zijn geweest.

We gaan, zoals al eerder is gezegd, niet verder in op de beschrijving van de evolutie van de grondwaterspiegel; we beschouwen de positie van de grondwaterspiegel als gegeven en bestuderen de consequenties van deze gegeven grondwaterspiegel op de ondergrondse stroming en de daarbij

behorende transportverschijnselen.

Uiteraard hangt de nauwkeurigheid van de Dupuit-benaderingen en van de daarop gebaseerde Dupuit-Forchheimer-benadering sterk af van de grootte van de eerste-orde en hogere-orde correcties. We eindigen de behandeling van de Dupuit- en Dupuit-Forchheimer benadering met het volgende citaat van Morris Muskat:

"It seems better to await the development of a more satisfactory theory than present in the implications of the Dupuit-Forchheimer equation which will involve errors of unknown magnitude."

(uit: M. Muskat, The Flow of Homogeneous Fluids through Porous Media, pp. 359-365, New York, 1937)

4.4. Eerste-orde correcties

Termen behorende bij hogere machten van σ zijn te beschouwen als correcties op de Dupuit-benadering. De in eerste orde correcte oplossing in dimensievolle vorm wordt, voor perfect gelaagde bekkens, gegeven door:

$$\phi = f + r_1(z) (\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2)f + O(\sigma^2)$$

$$e_x = -\partial f/\partial x - r_1(z) \partial[(\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2)f]/\partial x + O(\sigma^2)$$

$$e_y = -\partial f/\partial y - r_1(z) \partial[(\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2)f]/\partial y + O(\sigma^2)$$

$$q_z = -t_0(z) (\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2)f \\ - t_1(z) (\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2)^2 f + O(\sigma^2)$$

Hierin is:

$$r_1(z) = \int_0^z t_0(z')/k_z(z') dz' \quad [m^2]$$

$$t_1(z) = \int_z^d r_1(z') k_h(z') dz' \quad [m^5 \cdot Pa^{-1} \cdot s^{-1}; m^5 \cdot mH_2O^{-1} \cdot d^{-1}]$$

De Dupuit-benadering en de eerste-orde correctie daarop kunnen worden gebruikt om een zinvolle definitie van de laterale en verticale karakteristieke doorlatendheden voor perfect gelaagde bekkens te geven:

$$k_{hc} = t_0(0)/d = kD/d = T/d$$

$$k_{zc} = k_{hc}^2 d^3/[3 t_1(0)]$$

Bij deze keuze vinden we voor een homogene ondergrond met doorlatendheden k_h^0 en k_z^0 dat $k_{hc} = k_h^0$ en $k_{zc} = k_z^0$. De uitdrukking voor de laterale karakteristieke doorlatendheid komt overeen met de bekende uitdrukking verkregen door parallelschakeling van weerstanden. Echter, de uitdrukking voor de verticale karakteristieke doorlatendheid blijkt af te wijken van de meer gebruikelijke waarde verkregen door serieschakeling van weerstanden. Het verschil is dat in de hier gegeven definitie het gedeelte van de ondergrond dat zich dicht bij de top bevindt een veel grotere invloed heeft

op k_{zc} dan het gedeelte dat zich in de buurt van de ondoorlatende basis bevindt. Bij de seriesschakeling van weerstanden heeft elke grondlaag een even zwaar gewicht.

Voor bekkens met laterale heterogeniteiten moeten we een over de laterale dimensies gemiddelde waarde van bovenstaande uitdrukkingen voor de karakteristieke doorlatendheden nemen. Een aanzet tot een geschikte middelingsprocedure wordt beschreven in paragraaf 4.7. Het bepalen van karakteristieke doorlatendheden heeft raakvlakken met het numeriek modelleren, waarbij per roosterblok of element één karakteristieke waarde voor elk van de doorlatendheden moet worden ingevoerd; zie paragraaf 4.7.

Ook de eerste-orde correcte oplossingen voldoen wel exact aan de continuïteitsvergelijking, maar niet exact aan de wet van Darcy. Nauwkeuriger oplossingen kunnen worden verkregen door hogere-orde termen in de berekening mee te nemen.

Ook voor een bekken met laterale heterogeniteiten kunnen eerste-orde benaderingen worden gegeven. We vinden:

$$\phi = f + a_j \partial f / \partial x_j + r_1 \partial^2 f / \partial x_j^2 + O(\sigma^2)$$

$$\begin{aligned} e_i = & - (\delta_{ij} + \partial a_j / \partial x_i) \partial f / \partial x_j \\ & - [(\partial r_1 / \partial x_i) \delta_{ij} + a_j] \partial^2 f / \partial x_j \partial x_i \\ & - r_1 \partial (\partial^2 f / \partial x_j^2) / \partial x_i + O(\sigma^2) \end{aligned}$$

$$q_z = \frac{d}{dz} \left[\int k_h(x_i, z') e_j(x_i, z') dz' \right] / \partial x_j + O(\sigma^2)$$

waarin $x_1 = (x_1, x_2) = (x, y)$ en waarin het tweemaal voorkomen van dezelfde index sommatie over die index betekent (de z.g. Einsteinconventie), d.w.z.: $a_j b_j = a_1 b_1 + a_2 b_2$; δ_{ij} is de z.g. Kronecker delta, $\delta_{ij} = 0$ als $i \neq j$ en $\delta_{ij} = 1$ als $i = j$; t_0 en r_1 zijn op dezelfde manier gedefinieerd als voor een perfect gelaagd bekken, maar zijn nu natuurlijk een functie van x_1 en z [$t_0 = t_0(x_1, z)$ en $r_1 = r_1(x_1, z)$]; $a_i(x_1, z)$ is gedefinieerd als:

$$a_i(x_j, z) = \int_0^z [\partial t_0(x_j, z') / \partial x_i] / k_z(x_j, z') dz'$$

Indien we nu heel zwakke laterale heterogeniteiten hebben, waarvoor geldt dat $|\partial k_h / \partial x_i| = O(k_{hc}/l_c)$ en $|\partial k_z / \partial x_i| = O(k_{zc}/l_c)$, dan zien we uit bovenstaande formules dat alle eerste-orde termen van de grootte-orde $\sigma = (d/l_c)^2 (k_{hc}/k_{zc})$ zijn. Dus voor $\sigma \ll 1$ mogen we dan alle eerste-orde termen verwaarlozen. Concluderend kunnen we dus zeggen dat alleen voor zulke zwakke laterale heterogeniteiten de in paragraaf 4.2 besproken Dupuit-benadering geldt. Dit is natuurlijk een bijzonder sterke beperking van de geldigheid van de zo populaire Dupuit-benadering, en daarom zullen we in paragraaf 4.5 kijken of de de Dupuit-benadering gegeneraliseerd kan worden tot een groter geldigheidsbereik.

4.5. De gegeneraliseerde Dupuit-benadering

Laat ons, als voorbeeld, iets sterkere laterale heterogeniteiten toestaan, n.l. $|\partial k_h/\partial x_1| = 0[k_{hc}/\sqrt{(d l_c)}]$ en $|\partial k_z/\partial x_1| = 0[k_{zc}/\sqrt{(d l_c)}]$. Dan volgt uit bovenstaande vergelijkingen dat de term $(\partial a_j/\partial x_1) (\partial f/\partial x_j)$ grootte-orde $\sigma l_c/d$ heeft; de term $[(\partial r_1/\partial x_1) \delta_{ij} + a_j] \partial^2 f/\partial x_j \partial x_i$ heeft grootte-orde $\sigma \sqrt{(l_c/d)}$; en de term $r_1 \partial(\partial^2 f/\partial x_j^2)/\partial x_i$ heeft grootte-orde σ . Laat ons nu een situatie bekijken waarin termen van de grootte-orde σ en $\sigma \sqrt{(l_c/d)}$ verwaarloosbaar zijn, maar waarin termen van de grootte-orde $\sigma l_c/d$ moeten worden meegenomen. B.v. $k_{hc}/k_{zc} = 10$ en $d/l_c = 1/32$ geeft $\sigma = 0,01$ (verwaarloosbaar), $\sigma \sqrt{(l_c/d)} = 0,056$ (verwaarloosbaar) en $\sigma l_c/d = 0,32$ (niet verwaarloosbaar). Onder deze condities vereenvoudigen de eerste-orde nauwkeurige oplossingen tot:

$$e_i(x_k, z, t) = - [\delta_{ij} + \partial a_j(x_k, z)/\partial x_i] \partial f(x_k, t)/\partial x_j$$

$$q_z(x_k, z, t) = - \partial [t_{ij}^*(x_k, z) \partial f(x_k, t)/\partial x_j] / \partial x_i$$

waarin:

$$t_{ij}^*(x_k, z) = \int_z^d [k_h(x_k, z') (\delta_{ij} + \partial a_j(x_k, z')/\partial x_i)] dz'$$

de gegeneraliseerde driedimensionale transmissiviteit voorstelt.

Bovenstaande vergelijkingen geven een generalisatie van de Dupuit-benadering voor wat sterkere laterale heterogeniteiten. We zien dat vanwege de heterogeniteit de gegeneraliseerde driedimensionale transmissiviteit een tensor $\underline{t}^*(x)$ is met de vier componenten $t_{ij}^*(x, y, z)$:

$$\underline{t}^*(x) = \begin{bmatrix} t_{xx}^*(x, y, z) & t_{xy}^*(x, y, z) \\ t_{yx}^*(x, y, z) & t_{yy}^*(x, y, z) \end{bmatrix}$$

De gegeneraliseerde transmissiviteitstensor is in het algemeen niet symmetrisch. Er zijn echter doorlatendheidsverdelingen waarvoor de gegeneraliseerde transmissiviteit symmetrisch is. Bij voorbeeld, indien $k_h(x, y)$ en $k_z(x, y)$ onafhankelijk zijn van z , en indien de anisotropiefactor $k_h(x, y)/k_z(x, y) = \alpha$ constant is, geldt dat de transmissiviteitstensor symmetrisch is (d.w.z. $t_{ij}^* = t_{ji}^*$). In dat laatste geval geldt voor de (tweedimensionale) gegeneraliseerde transmissiviteit:

$$T_{xy}^*(x, y) = [\alpha k_h(x, y)/3] \partial^2 \lambda_h / \partial x \partial y$$

$$T_{yx}^*(x, y) = [\alpha k_h(x, y)/3] \partial^2 \lambda_h / \partial y \partial x$$

$$T_{xx}^*(x, y) = k_h(x, y) d + [\alpha k_h(x, y)/3] \partial^2 \lambda_h / \partial x^2$$

$$T_{yy}^*(x, y) = k_h(x, y) d + [\alpha k_h(x, y)/3] \partial^2 \lambda_h / \partial y^2$$

Alleen indien de gegeneraliseerde transmissiviteit symmetrisch is kunnen we twee loodrecht op elkaar staande z.g. hoofdrichtingen vinden; zie paragraaf 2.8.

Ook voor nog sterkere laterale afgeleiden van de doorlatendheden kunnen we, onder bepaalde stromingscondities, een gegeneraliseerde Dupuit-benadering met gegeneraliseerde transmissiviteit vinden; zie paragraaf 4.6.

4.6. Hogere-orde correcties

De exacte oplossing voor een perfect gelaagde ondergrond wordt gegeven door de volgende reeksontwikkeling:

$$e_x = - \sum_{n=0}^{\infty} r_n(z) \partial[(\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2)^n f]/\partial x$$

$$e_y = - \sum_{n=0}^{\infty} r_n(z) \partial[(\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2)^n f]/\partial y$$

$$q_z = - \sum_{n=0}^{\infty} t_n(z) (\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2)^{(n+1)} f$$

Hierin is:

$$r_n(z) = \int_0^z t_{n-1}(z')/k_z(z') dz' \quad [m^{2n}]$$

$$t_n(z) = \int_z^d r_n(z') k_h(z') dz' \quad [m^{2n+3} \cdot Pa^{-1} \cdot s^{-1}]$$

met

$$r_0(z) = 1$$

$$t_0(z) = \int_z^d k_h(z') dz'$$

Uit deze oplossing is te zien dat de n° -orde correcte oplossingen (d.w.z. de benaderde oplossingen verkregen door weglating van alle $(n+1)$ ste termen) exact aan de continuïteitsvergelijking $\text{div}(\mathbf{q}) = 0$ voldoen. Aan de wet van Darcy wordt echter niet exact voldaan. We vinden als residu in de wet van Darcy dat:

$$\partial e_x / \partial z - \partial(q_z/k_z) / \partial x = t_n(z) \partial[(\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2)^{(n+1)} f] / \partial x$$

$$\partial e_y / \partial z - \partial(q_z/k_z) / \partial y = t_n(z) \partial[(\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2)^{(n+1)} f] / \partial y$$

Bovenstaande uitdrukkingen worden gelijk aan nul als de rechterleden (de residuen) voldoende klein worden voor $n \rightarrow \infty$.

In het volgende zullen we bovenstaande bewering toelichten. In het algemeen, d.w.z. voor volledig heterogene ondergronden geldt:

$$[\text{curl}(\mathbf{e})]_x = \partial(q_z/k_z) / \partial y - \partial e_y / \partial z = 0$$

$$[\text{curl}(\mathbf{e})]_y = \partial e_x / \partial z - \partial(q_z/k_z) / \partial x = 0$$

$$[\text{curl}(\mathbf{e})]_z = \partial e_y / \partial x - \partial e_x / \partial y = 0$$

Bovenstaande uitdrukkingen voor de drie componenten van de rotatie van $\mathbf{e}$ zijn equivalent met de wet van Darcy; immers, elke vector $\mathbf{e}$ die rotatievrij is $[\text{curl}(\mathbf{e}) = 0]$ kan geschreven worden als de gradiënt van een scalar ϕ [$\mathbf{e} = -\text{grad}(\phi)$; zie paragraaf 2.5]. Aan de laatste vergelijking is automatisch

voldaan door de keuze van de toprandvoorwaarde $e_x(x,y,0) = -\partial f(x,y)/\partial x$, $e_y(x,y,0) = -\partial f(x,y)/\partial y$.

De twee bovenste vergelijkingen worden in dimensieloze vorm geschreven als:

$$\sigma \partial(Q_z/K_z)/\partial Y - \partial E_y/\partial Z = 0$$

$$\partial E_x/\partial Z - \sigma \partial(Q_z/K_z)/\partial X = 0$$

Merk op dat in bovenstaande twee dimensieloze vergelijkingen het getal van Tóth σ voorkomt, hetgeen betekent dat termen van de orde $n+1$ ($E_{xn+1}, E_{yn+1}, Q_{zn+1}$) in deze vergelijkingen gekoppeld worden aan termen van de orde n (E_{xn}, E_{yn}, Q_{zn}). Bovenstaande twee vergelijkingen moeten worden aangevuld door de continuïteitsvergelijking in dimensieloze vorm:

$$\partial(K_h E_x)/\partial X + \partial(K_h E_y)/\partial Y + \partial Q_z/\partial Z = 0$$

In deze laatste vergelijking komt het getal van Tóth σ niet voor, hetgeen betekent dat in deze vergelijking alleen termen van de orde n aan elkaar gerelateerd worden.

De drie hierboven gepresenteerde dimensieloze vergelijkingen voor E_x , E_y en Q_z zijn equivalent met de in paragraaf 4.1 gepresenteerde dimensieloze Poisson-type vergelijkingen met randvoorwaarden voor E_x , E_y en Q_z . Alle na paragraaf 4.1 verkregen oplossingen zouden we dus ook uit bovenstaande drie dimensieloze vergelijkingen kunnen verkrijgen. Zolang we puur analytisch rekenen is dat ook eigenlijk gemakkelijker; alleen als we numeriek willen rekenen leiden de Poisson-type vergelijkingen (de Laplace-type vergelijkingen voor een perfect gelaagd bekken) tot een beter hanteerbaar stelsel. We kunnen nu echter onze eerder verkregen analytische oplossingen controleren met behulp van de drie bovenstaande vergelijkingen.

Indien we de hogere-orde correcties bepalen voor ondergronden met laterale heterogeniteiten vinden we, naast de bovenbeschreven residuen, nog extra termen waarin laterale afgeleiden van integralen over de verticaal van de doorlatendheden voorkomen.

Zoals reeds is aangetoond in paragraaf 4.5 geldt de in paragraaf 4.2 beschreven Dupuit-benadering alleen als de hogere-orde correcties verwaarloosbaar klein zijn t.o.v. de nulde-orde termen. Voor een perfect gelaagde ondergrond is dit het geval als $\sigma \ll 1$, maar voor een lateraal heterogene ondergrond komt hier nog de extra eis bij dat ook de laterale afgeleiden van de doorlatendheden voldoende klein zijn ($|\partial k_h/\partial x| \approx k_{hc}/l_c$, $|\partial^2 k_h/\partial x^2| \approx k_{hc}/l_c^2$, enz.). De Dupuit-benadering is dus een benadering voor "bijna-gelaagde" ondergronden.

In paragraaf 4.5 is er ook een generalisatie van de Dupuit-benadering gegeven voor een wat minder zwak lateraal heterogene ondergrond. Deze laatste generalisatie geldt onder de voorwaarde dat $|\partial k_h/\partial x_i| \approx k_{hc}/\sqrt{(d l_c)}$ en $|\partial k_z/\partial x_i| \approx k_{zc}/\sqrt{(d l_c)}$, waarbij termen van de grootte-orde σ en $\sigma/\sqrt{(l_c/d)}$ verwaarloosbaar zijn, maar waarin termen van de grootte-orde $\sigma l_c/d$ moeten worden meegenomen [b.v. $k_{hc}/k_{zc} = 10$, $d/l_c = 1/32$ geeft $\sigma = 0,01$ (verwaarloosbaar), $\sigma/\sqrt{l_c/d} = 0,056$ (verwaarloosbaar) en $\sigma l_c/d = 0,32$ (niet verwaarloosbaar)]. De termen met orde hoger dan de eerste-orde zijn dan verwaarloosbaar, zodat de gegeneraliseerde Dupuit-benadering van paragraaf 4.5 geldt voor $\sigma/\sqrt{(l_c d)} \ll 1$.

We kunnen echter nog sterkere laterale heterogeniteiten beschouwen. Bij voorbeeld, indien $|\partial k_h/\partial x_i| = O(k_{hc}/d)$ en $|\partial k_z/\partial x_i| = O(k_{zc}/d)$, dan zijn alle termen in de reeksonwikkeling met afgeleiden van de doorlatendheden

van de grootte-orde (k_{hc}/k_{zc}) . Hogere afgeleiden van $\partial f/\partial x_i$ hebben op zijn hoogst grootte-orde $\sigma l_c/d$. Dus als we nu termen van de grootte-orde $\sigma l_c/d = (d/l_c) (k_{hc}/k_{zc})$ verwaarlozen vinden we weer een gegeneraliseerde Dupuit-benadering, echter met een gegeneraliseerde transmissiviteit waarin ook hogere afgeleiden van de doorlatendheden voorkomen dan in de gegeneraliseerde transmissiviteit van paragraaf 4.5. De conclusie is dus dat de Dupuit-benadering altijd wel geldt voor voldoende ondiepe bekkens, maar dat de in deze Dupuit-benadering voorkomende transmissiviteitstensor op een complexe manier gerelateerd is aan de doorlatendheden en de eerste en hogere laterale afgeleiden hiervan.

De vergelijkingen voor e_x , e_y en q_z , waarin ook gladheidseisen aan de laterale heterogeniteiten worden gesteld, kunnen in dit opzicht ook beschouwd worden als "gegeneraliseerde Dupuit-vergelijkingen", geldend voor veel grotere laterale afgeleiden van de doorlatendheden.

Combinatie van de exacte oplossing voor $q_z(x,y,0,t)$ en de eerder besproken geprojecteerde dynamische en kinematische randvoorwaarden levert, op dezelfde manier als bij de Dupuit-Forchheimer benadering, een vergelijking die de evolutie in de tijd van $h_f(x,y,t)$ beschrijft. Vanwege de erin voorkomende n^e ($n > 2$, $n = 3, 4 \rightarrow \infty$) afgeleiden van f naar x en y is deze uitdrukking niet praktisch te hanteren in numerieke methoden. Zowel de eindige-verschillenmethode als de eindige-elementenmethode zijn gebaseerd op tweede-orde afgeleiden ($n = 2$).

Overigens zou het in rekening brengen van de hogere-orde termen bij de berekening van de evolutie van $h_f(x,y,t)$ een schijnnaauwkeurigheid opleveren. Op de eerste plaats is het zo dat de diepe grondwaterstroming, waarin we hier ook geïnteresseerd zijn, wel sterk beïnvloed wordt door de ruimtelijke variaties in de grondwaterspiegel, maar dat omgekeerd de diepe grondwaterstroming slechts een verwaarloosbare invloed heeft op de beweging van de grondwaterspiegel. Dit betekent dat het in rekening brengen van de details van de diepe grondwaterstroming in de vergelijking ter bepaling van de evolutie van de grondwaterspiegel overbodig werk is.

Bovendien komt in de vergelijking voor $h_f(x,y,t)$ ook de nuttige neerslag $P_e(x,y,t)$ voor, en de modellen ter bepaling van $P_e(x,y,t)$ zijn in het algemeen zeer globaal en relatief onnauwkeurig. De Dupuit-Forchheimer benadering is derhalve i.h.a. voldoende nauwkeurig om een verantwoorde interpolatie in ruimte en tijd te construeren van het op slechts enkele plaatsen en tijden in peilbuizen gemeten stijghoogteveld.

De probleemstelling behandeld in dit college is een geheel andere. Indien we op grond van stijghoogtemetingen in peilbuizen, modellering (in het algemeen met Dupuit-Forchheimer en een eenvoudig model voor P_e), calibratie, interpolatie (b.v. met behulp van Kalman-filtering) en deskundige "intuïtie" een zo goed mogelijke evolutie van de grondwaterspiegel hebben geconstrueerd waarin we kunnen "geloven", dan willen we als volgende stap weten wat de consequenties zijn van deze grondwaterspiegel op stroming en transport. Echter, voor de analyse van stroming is de Dupuit-benadering in veel gevallen te onnauwkeurig. Immers, kleine potentiaalverschillen in de verticale z -richting zijn in het algemeen verwaarloosbaar als het om stijghoogteberekeningen gaat, maar zijn vaak van wezenlijk belang bij stromingsberekeningen. Daarom is het goed om voor stromingsberekeningen de beschikking te hebben over een nauwkeuriger theorie dan de Dupuit-benadering.

4.7. De grootschalige "wet van Darcy"

In het algemeen hebben we te maken met grondwaterstroming in grote regionale gebieden, waarvoor het onmogelijk is om lokaal, dat wil zeggen op elk punt x van de driedimensionale ondergrond, de waarden van de doorlatendheden op te geven. We zijn om praktische redenen gedwongen om te werken met grootschalige waarden van de doorlatendheden.

We hebben in zekere zin al kennis gemaakt met grootschalige waarden, n.l. met de vier gegeneraliseerde (tweedimensionale) transmissiviteiten $T_{xx}^*(x,y)$, $T_{xy}^*(x,y)$, $T_{yx}^*(x,y)$ en $T_{yy}^*(x,y)$ [$m^3.Pa^{-1}.s^{-1}$; $m^3.mH_2O^{-1}.d^{-1}$]. De groetheid $T_{ij}^*(x_k)/d$ ($i,j,k = 1,2$) [$m^2.Pa^{-1}.s^{-1}$; $m^2.mH_2O^{-1}.d^{-1}$] kan namelijk worden opgevat als een doorlatendheidstensor op de grotere verticale schaal van de dikte van het bekken. Waar we echter ook behoefte aan hebben is aan een grootschalige doorlatendheid op de laterale schaal.

Om zo'n grootschalige waarde af te leiden kijken we in het vervolg, als voorbeeld, naar een tweedimensionale stroming in een verticale doorsnede van de ondergrond. De hierbij behorende Dupuit-vergelijkingen zijn:

$$J_x(x',t) = -T^*(x') \partial f(x',t)/\partial x'$$

$$q_z(x',0,t) = -\partial [T^*(x') \partial f(x',t)/\partial x']/\partial x'$$

waarin $T^*(x')$ de gegeneraliseerde transmissiviteit als functie van de laterale coördinaat x' is.

We kunnen natuurlijk altijd een zodanig verloop van $f(x',t)$ kiezen dat $q_z(x',0,t) = 0$ is; de keuze van zo'n verloop betekent wel dat de karakteristieke laterale lengteschaal l_c van ruimtelijke variaties in $f(x',t)$ gelijk wordt aan de karakteristieke lengteschaal van de laterale heterogeniteiten in $T^*(x')$.

Als $q_z(x',0,t) = 0$ dan is $J_x = J_x(t)$, onafhankelijk van x' . We mogen dan schrijven:

$$J_x(t)/T^*(x') = -\partial f(x',t)/\partial x'$$

Integratie over x' van $x' = a$ tot $x' = b$, $b > a$, dus integratie over een laterale afstand $b - a$, levert:

$$J_x(x,t)/d = -[(b-a)/d] \left[\int_a^b T^*(x')^{-1} dx' \right]^{-1} \times \\ \times [f(b) - f(a)]/(b-a)$$

waarin $x = (a+b)/2$.

We kunnen $J_x(x,t)/d = \langle q_x \rangle(x,t)$ opvatten als een grootschalige flux in het punt x . Volgens het theorema van Taylor geldt $[f(b) - f(a)]/(b-a) = [\partial f(x')/\partial x']_{x'=x} + O[(b-a)^2 \partial^2 f(x')/\partial x'^2]_{x'=x}$. Indien we als grootte-orde voor de laterale uitgestrektheid kiezen $b-a = O[\sqrt{(d/l_c)}]$, dan is de term $O[(b-a)^2 \partial^2 f(x')/\partial x'^2]_{x'=x}$ van de grootte-orde $O(d/l_c)$ ten opzichte van de term $[\partial f(x')/\partial x']_{x'=x}$. In de context van de gegeneraliseerde Dupuit-benadering mogen termen van de grootte-orde d/l_c verwaarloosd worden, zodat we dan mogen stellen dat $[f(b) - f(a)]/(b-a) = \partial \langle f \rangle(x,t)/\partial x$, waarin $\langle f \rangle(x)$ de som van de Fourier-componenten met golflengtes $2\pi \lambda = l_c$ van $f(x')$ in het punt $x' = x$ voorstelt. We kunnen bovenstaande vergelijking nu schrijven als een grootschalige "wet van Darcy":

$$\langle q_x \rangle(x, t) = - \langle k_h \rangle(x) \partial \langle f \rangle(x, t) / \partial x$$

waarin:

$$\langle k_h \rangle(x) = - [(b - a)/d] \left[\int_a^b T^*(x')^{-1} dx' \right]^{-1}$$

de grootschalige laterale doorlatendheid is.

Met behulp van extra aannames is generalisatie naar de twee dimensies x en y ook mogelijk, evenals generalisatie naar een verticale grootschalige doorlatendheid; hier zullen we in dit collegedictaat echter niet verder op ingaan.

In de hierboven afgeleide grootschalige "wet van Darcy" op de ruimtelijke schaal van de integratierechthoek d ($b - a$) is f de potentiaal aan de bovenrand van de rechthoek. Op vergelijkbare wijze kan natuurlijk ook een grootschalige "wet van Darcy" voor de potentiaal op de onderrand van de integratierechthoek worden afgeleid. Uit deze twee uitdrukkingen kan dan een grootschalige "wet van Darcy" voor de tussen bovenrand en onderrand gemiddelde potentiaal worden afgeleid. Deze laatste grootschalige "wet van Darcy" is in het algemeen het best bruikbaar in numerieke modelstudies.

De conclusie is dat regionale modelstudies altijd worden uitgevoerd met grootschalige waarden voor de doorlatendheid, waarbij $b - a$ de laterale grootte van enige roosterblokken, of eindige elementen heeft, en waarbij d de dikte van een roosterblok, of eindig element is.

Een correcte keuze van de integratierechthoek d ($b - a$) is verre van triviaal. Op de eerste plaats moet de grootte van de rechthoek voldoende klein zijn, zodanig dat van de stromingsprocessen de schaal waarin we geïnteresseerd zijn niet verloren gaat. Bij voorbeeld, als we voor een lokaal probleem geïnteresseerd zijn in de snelheidsvariëaties op een laterale schaal van 10 m, waarbij variëaties op kleinere schaal verwaarloosd mogen worden, dan mogen we de grootschalige doorlatendheden eigenlijk niet bepalen op een schaal die groter is dan 10 m. Toch gebeurt dit laatste in de praktijk wel vaak, zeker in combinatie met analytisch-wiskundige oplossingstechnieken waarbij in het algemeen één waarde voor de transmissiviteit voor een heel groot gebied wordt opgegeven. Zo'n aanpak heeft dan wel ten gevolge dat er veel te grote waarden voor de macrodispersielengtes (zie paragraaf 6.3) moeten worden opgegeven.

Een tweede criterium voor een correcte keuze van de n integratierechthoeken d_i ($b_i - a_i$), $i = 1, 2, \dots, n$ (geen sommatie over de index i) is dat overgang van deze n integratierechthoeken naar één grote integratierechthoek d_T ($b_T - a_T$) = $\sum d_i$ ($b_i - a_i$) (praktisch) hetzelfde resultaat moet geven als direct de grootschalige doorlatendheden berekenen voor de grote rechthoek d_T ($b_T - a_T$).

Een volledig algemene afleiding van de grootschalige "wet van Darcy", zonder gebruik te maken van de Dupuit-benadering en de eis van differentieerbaarheid van de laterale heterogeniteiten, wordt gepresenteerd door Quintard et Whitaker [1987].

5. KWANTITATIEVE ASPECTEN VAN DE STROMINGSSTELSELANALYSE

5.1. De homogene ondergrond als eenvoudig voorbeeld

We kijken nu naar een homogene ondergrond, waarvoor natuurlijk ook alle reeds afgeleide eigenschappen van een perfect gelaagde ondergrond gelden. Zoals reeds gezegd kijken we naar de afzonderlijke Fourier-componenten van $\phi(x,y,0,t) = f(x,y,t)$. Voor elke gewenste Fourier-component kunnen de afgeleiden naar x en y in bovenbeschreven reeksontwikkelingen eenvoudig worden bepaald. Voor een homogene ondergrond kan de aldus verkregen oneindige reeks in z en σ (of in z en d), die slechts voor voldoende kleine waarden van σ (van d) convergeert, op zeer eenvoudige manier analytisch worden voortgezet voor alle waarden van σ (van d). We vinden dan een oplossing in drie dimensies die Tóth [1963] op geheel andere wijze voor een tweedimensionale stroming heeft gevonden.

Bij voorbeeld, stel dat op het bovenvlak de potentiaal gegeven wordt door de Fourier-component:

$$f(x,y,t) = a(t) \cos(x/l_x + y/l_y) + b(t) \sin(x/l_x + y/l_y)$$

Hieruit vinden we dat op het bovenvlak $z = 0$ de laterale fluxcomponenten gegeven worden door:

$$q_x(x,y,0,t) = k_h^\circ g(x,y,t)/l_x$$

$$q_y(x,y,0,t) = k_h^\circ g(x,y,t)/l_y$$

waarin

$$g(x,y,t) = a(t) \sin(x/l_x + y/l_y) - b(t) \cos(x/l_x + y/l_y)$$

We vinden uit de oplossing voor $\sigma \rightarrow \infty$ ($d \rightarrow \infty$) dat de verticale fluxcomponent op het bovenvlak gelijk is aan:

$$q_z(x,y,0,t) = \sqrt{(k_h^\circ k_z^\circ)} f(x,y,t)/l_c$$

waarin $l_c = 1/\sqrt{(1/l_x^2 + 1/l_y^2)}$.

Voorts vinden we dat de fluxcomponenten met toenemende diepte exponentieel afnemen (uitdempen) volgens:

$$q_x(x,y,z,t) = q_x(x,y,0,t) \exp[-(z/l_c) \sqrt{(k_h^\circ/k_z^\circ)}]$$

$$q_y(x,y,z,t) = q_y(x,y,0,t) \exp[-(z/l_c) \sqrt{(k_h^\circ/k_z^\circ)}]$$

$$q_z(x,y,z,t) = q_z(x,y,0,t) \exp[-(z/l_c) \sqrt{(k_h^\circ/k_z^\circ)}]$$

Op de diepte $z = d'$ worden de verticale fluxcomponenten dan gegeven door $q_i(x,y,0,t) \exp(-\sqrt{\sigma'})$, $i = x, y, z$, waarin $\sqrt{\sigma'} = (d'/l_c) \sqrt{(k_h^\circ/k_z^\circ)}$. Indien we nu de diepte d' zo kiezen dat $\sqrt{\sigma'} = 1$ vinden we een dempingsfactor $\exp(-1) \approx 0,37$; indien we d' zo kiezen dat $\sqrt{\sigma'} = 3$ vinden we een dempingsfactor $\exp(-3) \approx 0,05$, voor $\sqrt{\sigma'} = 4$ vinden we een dempingsfactor van ca. 0,02 en voor $\sqrt{\sigma'} = 2\pi$ vinden we een dempingsfactor van ca. 0,002. Enigszins afhankelijk van de situatie hebben we bij één van de bovengenoemde waarden van $\sqrt{\sigma'}$ al een verwaarloosbaar kleine verticale fluxcomponent t.o.v. $q_z(x,y,0,t)$. We hoeven de diepte d dus niet oneindig diep te kiezen; we

krijgen al een goede benadering van de oplossing als we de diepte d van de "ondoorlatende" basis zo te kiezen dat $\sqrt{\sigma} \approx 1$ (≈ 1 betekent variërend van ca. 1 tot ca. 2π , afhankelijk van de details van de stromingssituatie), d.w.z. $d \approx l_c \sqrt{(k_{zc}/k_{hc})}$. Immers, de oplossingen voor $d \rightarrow \infty$ verschilt voldoende weinig van de oplossing voor $d \approx l_c \sqrt{(k_{zc}/k_{hc})}$. De aldus gedefinieerde diepte d is dus afhankelijk van de "golflengte" $2\pi l_c$ van de ruimtelijke variatie in de grondwaterspiegel.

5.2. De "ondoorlatende" basis in een gelaagde ondergrond

Het begrip "ondoorlatende" basis is eigenlijk een meer zinvol begrip in een gelaagde ondergrond waar aquifers en aquitards elkaar afwisselen; in dat geval immers verspringt de dempingsfaktor abrupt van waarde (zie paragraaf 3.2) en blijkt dat de "ondoorlatende basis" gelegen moet zijn aan de onderkant van een aquifer en de top van een aquitard. Om in dit geval de oneindige reeks in σ analytisch voort te zetten voor grote waarden van σ zijn speciale wiskundige technieken nodig (b.v. niet-lineaire "reeks-tot-reeks" transformaties). Niettemin blijft de formule $\sqrt{\sigma} \approx 1$ haar waarde behouden als grootteordeschatting voor de karakteristieke diepte van het stromingsprobleem. De formule $\sqrt{\sigma} \approx 1$ speelt een uiterst belangrijke rol in het kwalitatief begrijpen van het geneste karakter van stroombanen (zie paragraaf 5.3), een belangrijk aspect van de "stromingsstelselanalyse" van Tóth en Engelen c.s.; zie [Engelen and Jones, 1986].

Definiëren we: " Q_s " = $\rho(0) g \sqrt{[a(w)^2 + b(w)^2]}$ [$J \cdot m^{-3}$] als de voor stroming beschikbare potentiële energie per volume-eenheid van Fourier-mode w (zie paragraaf 3.5); " k_s " = $\sqrt{(k_{hc}/k_{zc})}$ [-] als de "energieomzettingscapaciteit"; " i_s " = $\rho(0) g \sqrt{[a(w)^2 + b(w)^2]}/l_c$ [$J \cdot m^{-4}$] als de laterale "gradiënt" van de potentiële energie per volume-eenheid ($l_c = 1/|w|$; zie paragraaf 3.5); en " D " = d als de diepte van het stromingsstelsel veroorzaakt door Fourier-mode w , dan vinden we uit $\sqrt{\sigma} \approx 1$ dat: " Q_s " = " k_s ". " i_s ". " D_s "; zie [Engelen and Jones, p. 125, 1986].

De formule $\sqrt{\sigma} \approx 1$ (of " Q_s " = " k_s ". " i_s ". " D_s ") is ook van belang bij de voorbereiding tot het numeriek modelleren, waarbij er op zekere diepte een ondoorlatende basis moet worden aangenomen.

5.3. Nesting van stroombanen

Op grond van bovenbeschreven theorie en begripsvorming kan, heel globaal, het geneste karakter van grondwaterstroming en de betekenis van de verschillende ruimtelijke schalen worden beschreven. Bij voorbeeld: in een grootschalige superregionale modellering (b.v. in een nationaal grondwatermodel) is de karakteristieke lengte van variatie in de grondwaterspiegel 20 km. De karakteristieke anisotropiefactor is, wegens gelaagdheid van de ondergrond, $k_{hc}/k_{zc} \approx 400$. Uit $\sqrt{\sigma} \approx 1$ volgt dan dat voor deze golf de karakteristieke diepte van de "ondoorlatende" basis $d \approx 1000$ m (of, voor zekerheid, wat meer) is. De regionale variaties in grondwaterspiegel, gesuperponeerd op de superregionale golf, hebben b.v. een karakteristieke uitgestrektheid van 2 km, hetgeen een voor deze golf karakteristieke diepte van de "ondoorlatende" basis van $d \approx 100$ m (of meer) impliceert. Dus beneden de 100 m diepte vinden we alleen nog maar stroming veroorzaakt door de superregionale golf. Boven de 100 m diepte wordt het stromingsbeeld bepaald door superpositie van de stroming veroorzaakt door de superregionale golf en de regionale golf; waarbij de intensiteit van de regionale stromingscomponent i.h.a. zal overheersen. Op

deze manier vinden we ook dat diepe stroombanen in laterale richting een veel langere weg afleggen dan ondiepe stroombanen; bovendien hoeven de diepe en ondiepe stroombanen niet in dezelfde richting te lopen. We moeten echter wel bedenken dat de diepe stroming traag is ten opzichte van de ondiepe stroming, en dus weinig bijdraagt aan het transport van infiltratiegebied naar kwelgebied van in het water opgeloste stoffen.

Anderzijds is onderzoek naar het gedrag van diepe grondwaterstroming wel degelijk van belang voor wetenschap en technologie, en het is goed dat een instituut (TNO-DGV) zich hiermee bezig houdt. Kennis van de diepe grondwaterstroming is b.v. van belang bij opslag van giftig of radioactief afval in de diepe ondergrond, ter verklaring van een stijgend of dalend zoutgehalte in de loop der eeuwen, of ter verklaring van het voorkomen van ertsen of olie en gas op bepaalde plaatsen. Het wordt tegenwoordig algemeen aanvaard dat diepe grondwaterstroming en het daardoor veroorzaakte transport van opgeloste CO_2 een belangrijke rol speelt bij het verschijnsel metamorfose (rekristallisatie van een gesteente onder invloed van veranderingen in het fysisch-chemische milieu). Ook is het in principe mogelijk dat op sommige plaatsen relatief grote hoeveelheden diep grondwater met relatief veel bicarbonaat- en calciumionen naar de oppervlakte opkwellen met gevolgen voor de daar aanwezige microbiële activiteit en vegetatie.

We moeten overigens bij het voorafgaande over diepe grondwaterstroming wel bedenken dat de diepe stroming in het algemeen ook beïnvloed wordt door andere effecten dan de tot nog toe beschreven stroming veroorzaakt door ruimtelijke variatie in de grondwaterspiegel. Met name compactie of decompactie en vrije convectie (vooral onder oceaانبodems) zullen een rol spelen. Compactie/decompactie treedt op in geconsolideerde gesteenten en heeft te maken met de gesteentedruk.

5.4. Tijdsafhankelijkheid van stromingsstelsels

We kunnen er ook op speculeren dat het superregionale ruimtelijke verloop van de grondwaterspiegel in het algemeen samenhangt met de topografie van het landschap. Dit idee is voor het eerst tot uitdrukking gebracht door Tóth [1963]. Aangezien de topografie niet snel in de tijd verandert zal de diepe grondwaterstroming tamelijk stationair zijn en kunnen de resultaten op kaart worden uitgebracht.

Dat de tijdsafhankelijkheid van de amplitude van een Fourier-component afhangt van de karakteristieke lengte l_c van zo'n component is gemakkelijk in te zien. Zoals we hebben gezien wordt de gelineariseerde kinematische randvoorwaarde gegeven door:

$$\theta(x,y,0) \partial h_f(x,y,t)/\partial t = P_e(x,y,0,t) - q_z(x,y,0,t)$$

Verder hebben we gezien dat in een homogeen poreus medium de volgende uitdrukking geldt voor $q_z(x,y,0)$:

$$q_z(x,y,0,t) = \sqrt{(k_h^\circ k_z^\circ)} f(x,y,t)/l_c$$

waarin $f(x,y,t) = \rho_0 g h_f(x,y,t)$. Combinatie van beide vergelijkingen levert:

$$\theta \partial h_f/\partial t = P_e - \rho_0 g \sqrt{(k_h^\circ k_z^\circ)} h_f/l_c$$

Laat ons even veronderstellen dat $P_e = 0$ (geen nuttige neerslag en geen contact met oppervlaktewater) en dat de grondwaterspiegel $h_f(x,y,0)$ op een zeker tijdstip $t = 0$ bekend is. De ruimtelijke variaties in de grondwaterspiegel worden dan bij toenemende tijd vlakker (dempen uit in de tijd) volgens de oplossing:

$$h_f(x,y,t) = h_f(x,y,0) \exp[-(\rho_0 g \sqrt{(k_h^\circ k_z^\circ)/(\theta l_c)}) t]$$

De karakteristieke tijd t_c voor tijdsveranderlijkheid is dus gelijk aan:

$$t_c = \theta l_c / [\rho_0 g \sqrt{(k_h^\circ k_z^\circ)}]$$

Ook voor gelaagde ondergronden kan de bovenstaande formule een grootte-orde schatting voor de karakteristieke tijd t_c geven; hiertoe moeten in plaats van k_h° en k_z° de eerder gedefinieerde (zie paragraaf 5.1) karakteristieke doorlatendheden k_{hc} en k_{zc} ingevuld worden.

Uit bovenstaande uitdrukking zien we dat de karakteristieke tijd groter wordt als de ruimtelijke uitgestrektheid van de variatie in grondwaterspiegel l_c groter wordt (we zien ook dat de zwaartekracht hierin een rol speelt). Bij voorbeeld, bij een regionale golf met $l_c = 2$ km, en bij een ondergrond met $k_{hc} = 1 \text{ m}^2 \text{ mH}_2\text{O}^{-1} \text{ d}^{-1}$, $k_{zc} = 0,0025 \text{ m}^2 \text{ mH}_2\text{O}^{-1} \text{ d}^{-1}$ en $\theta = 0,25$ is de karakteristieke tijd $t_c = 10\,000 \text{ d} \approx 27$ jaar. Dus stroming op een diepte groter dan ca. 100 m (zie paragraaf 5.2) reageert met een traagheid van ca. 27 jaar op een verandering in de nuttige neerslag. Dat wil zeggen dat deze stromingscomponent praktisch gesproken onafhankelijk is van de nuttige neerslag, maar samenhangt met de topografie (en vooral met de peilen van de oppervlaktewateren hierin). Omdat deze stromingscomponent zo traag verandert mogen we deze karteren op kaarten met een levensduur van, zeg, 10 jaar.

Anderzijds volgt uit de formule voor t_c dat voor het lokale, op het superregionale en regionale verloop gesuperponeerde ruimtelijke verloop, een relatie met de topografie veel minder waarschijnlijk is; deze "kortgolfige" grondwaterspiegels fluctueren in de tijd met de seizoenen (met een naijling veroorzaakt door de stroming in de onverzadigde zone) en het karteren van lokale resultaten heeft dan ook weinig zin; de kaarten zouden veel te snel "verouderen". Bij voorbeeld, bij een lokale golf met $l_c = 5$ m (dus een golflengte van ca. 30 m) en een ondergrond met $k_{hc} = 1 \text{ m}^2 \text{ mH}_2\text{O}^{-1} \text{ d}^{-1}$, $k_{zc} = 0,1 \text{ m}^2 \text{ mH}_2\text{O}^{-1} \text{ d}^{-1}$ en $\theta = 0,25$ is de karakteristieke tijd $t_c \approx 4 \text{ d}$ (bedenk dat de verhouding k_{hc}/k_{zc} i.h.a. kleiner wordt bij korte, dus ondiepe, golven). Deze korte golven (met een diepte van ca. 15 m, zie paragraaf 5.3) reageren dus bijna instantaan mee met de seizoensfluctuaties in P_e .

Bedenk wel dat deze voorbeelden zeer globaal zijn en dat er voor een concreet probleem een meer gedetailleerde analyse nodig is.

5.5. Netto-kwel/infiltratie kaarten

Zoals gezegd kunnen we in veel gevallen aannemen dat de grootschalige ruimtelijke variaties in de grondwaterspiegel (de lange golven) een redelijk stationair karakter hebben. Op grond hiervan kunnen we dus kaarten maken van $q_z(x,y,0,t^\circ)$, waarbij t° een representatief tijdstip is. Zulke kaarten geven dus de kwel/infiltratie patronen behorende bij golflengten groter dan een bepaalde waarde ($l_x, l_y > l_{pix}$). De kwel/infiltratie patronen behorende bij golflengtes kleiner dan die bepaalde waarde zouden hierbij opgeteld moeten worden om de werkelijk optredende kwel/infiltratie in een

bepaald punt te kennen, maar deze worden dus niet op de kaart weergegeven. De op de kaart weergegeven kwel/infiltratie-patronen geven de z.g. netto-kwel/infiltratie en niet de werkelijk in een bepaald punt optredende kwel/infiltratie. De interpretatie van deze netto-kwel/infiltratie is dat deze (ongeveer) gelijk is aan het gemiddelde van de werkelijk optredende kwel/infiltratie over een oppervlak met dimensie l_{pix}^2 , de pixelgrootte. Uit het voorafgaande moge het ook duidelijk zijn dat het presenteren van kaarten met lokaal variërende afmetingen van de pixelgrootte tot totaal verkeerde interpretaties kan leiden, zeker als er ook nog bijbehorende stroombanen worden gepresenteerd (z.g. pseudo-stroombanen). Aangezien de invloed van kleinschalige variaties sneller uitdempt met toenemende diepte dan de invloed van grootschalige variaties, geeft een netto-kwel/infiltratie-kaart informatie over de werkelijk optredende kwel/infiltratie en werkelijk optredende stroombanen op grotere diepte, n.l. op dieptes met een grootte-orde groter dan ca. $l_{\text{pix}} \sqrt{(k_{\text{zc}}/k_{\text{hc}})}$.

De aanwezigheid van kwel betekent in de meeste gevallen behalve een relatief constante toevoer van water eveneens een regelmatige toevoer van bicarbonaat- en calciumionen. Deze ionen hebben een belangrijke invloed zowel op de microbiële activiteit en daarmee op de mineralisatie van stikstof en fosfaat, als ook op de zuurstofhuishouding van de bodem en de mate waarin fosfaat in een voor de plant opneembare vorm aanwezig is. Er zijn aanwijzingen dat bij een afname van kwel vooral veranderingen in fosfaatbeschikbaarheid leiden tot sterke veranderingen in de soortensamenstelling van het plantendek. Onderzoek over de regulatie van omvang en chemische samenstelling van kwelstromen en over de invloed van kwelstromen op de kringloop van nutriënten en protonen is dan ook van grote betekenis voor de natuurbescherming.

5.6. De initiële fase van een stromingsstelselanalyse

Eén conclusie uit dit voorbeeld moge duidelijk zijn: de juiste weg om te beginnen met een (regionale) stromingsstelselanalyse is om volgens de hierboven gegeven lijnen het onderhavige probleem te analyseren alvorens met het modelleren (of met het karteren) aan te vangen. Met behulp van wiskundige analyse moeten eerst de schalen (zowel de laterale schalen als de daarmee samenhangende dieptes schalen en tijdschalen) van het probleem worden onderzocht alvorens dimensies van roosterblokken of elementen, relevante tijdstippen, en de diepte van de "ondoorlatende" basis te kiezen. De bovenbeschreven theorie met bijbehorende grootte-ordeschattingen kan hierbij goede diensten bewijzen. Op de in hoofdstuk 5 gepresenteerde redeneringen kunnen nog allerlei verfijningen worden toegepast. Bij voorbeeld, de amplitudeverhoudingen in de grondwaterspiegel behorende bij verschillende tegelijkertijd optredende Fourier-golven zijn ook van belang en in de amplitudeverhoudingen van de snelheden speelt ook de verhouding tussen de verschillende golflengtes een rol. Er blijft wat dat betreft nog veel verder onderzoek nodig.

6. TRANSPORT VAN OPGELOSTE STOFFEN

6.1. Transportprocessen

Als we op de poriënschaal naar de vloeistofstromings- en transportprocessen kijken wordt de stroming beschreven door de stationaire Stokes-vergelijkingen en wordt het transport uitsluitend door convectie en moleculaire diffusie beschreven. De convectie stelt een omkeerbaar proces voor (d.w.z., als we t door $-t$ en x door $-x$ vervangen krijgen we dezelfde vergelijking). De moleculaire diffusie stelt een onomkeerbaar proces voor. (De wet van Darcy, gecombineerd met de continuïteitsvergelijking voor incompressibele stroming, beschrijft een omkeerbaar proces.)

Op de schaal van de wet van Darcy heeft de transportsnelheid v de betekenis van een gemiddelde waarde van de snelheid over veel poriën. Rond deze gemiddelde waarde v is er natuurlijk een zekere spreiding die maakt dat ook het (omkeerbare) convectieve transport met gemiddelde snelheid v plaatsvindt met daaromheen een zekere spreiding. Combinatie van deze spreiding met de moleculaire diffusie geeft een onomkeerbaar proces dat microdispersie wordt genoemd. Microdispersie is een theoretisch goed begrepen proces.

We hebben echter veelal te maken met grootschalige studies waarbij we om praktische redenen niet de lokale wet van Darcy (op de schaal van ca. 1 cm) kunnen oplossen. We moeten gebruik maken van een grootschalige "wet van Darcy", waarvan we in paragraaf 4.7 een voorbeeld hebben gegeven. We hebben bij het afleiden van de (gegeneraliseerde) Dupuit-benadering en de daarop gebaseerde grootschalige "wet van Darcy" gezien dat de stroming in regionale bekkens lokaal veel grilliger verloopt dan de grootschalige snelheid $\langle v \rangle$ suggereert. Combinatie van snelheidsspreiding rond deze grootschalige waarde $\langle v \rangle$ en microdispersie geeft een onomkeerbaar proces dat macrodispersie wordt genoemd.

Macrodispersie is theoretisch zeer moeilijk te beschrijven en wordt daarom veel bediscussieerd in de vakliteratuur. Niettemin wordt er in praktische studies altijd een "praktijkformulering" toegepast. Het is deze "praktijkformulering" die we in de volgende paragrafen in het kort zullen uitwerken. Voor meer details zie [Bear and Verruijt, 1987], en voor meer praktische toepassingen zie [Kinzelbach, 1987].

6.2. Behoud van massa voor opgeloste stof

Het eerste fundamentele uitgangspunt, het behoud van massa, geldt natuurlijk ook voor een in het water opgeloste stof. Wiskundig uitgedrukt ziet de vergelijking van massabehoud voor de opgeloste stof er als volgt uit:

$$\partial(\omega \rho \theta) / \partial t + \text{div}[\omega \rho \theta (v + u)] = b$$

Hierin is ω de massafractie van de opgeloste stof, ρ is de dichtheid van het mengsel water met daarin de opgeloste stof, θ is de effectieve porositeit van het poreuze medium, $v = (v_x, v_y, v_z)$ is de transportsnelheid van het stromende mengsel (een vector) en $u = (u_x, u_y, u_z)$ is de snelheid van de opgeloste stof ten opzichte van de snelheid van het stromende mengsel (een vector), dus $v + u$ is de totale snelheid van de opgeloste stof, b is een bronterm die het in oplossing komen van nieuwe opgeloste stof beschrijft.

|| eenheid massafractie [-]; SI-eenheid dichtheid [kg.m^{-3}]; eenheid (effectieve) porositeit [-]; SI-eenheid snelheid [$\text{m}^3.\text{m}^{-2}.\text{s}^{-1} = \text{m.s}^{-1}$]; gebruikelijke eenheid snelheid [$\text{m}^3.\text{m}^{-2}.\text{d}^{-1} = \text{m.d}^{-1}$]; SI-eenheid bronterm [$\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$; $\text{kg.m}^{-2}.\text{d}^{-1}$] ||

We kunnen de massabehoudsvergelijking voor de opgeloste stof ook schrijven als:

$$\rho \theta [\partial \omega / \partial t + \mathbf{v} \cdot \text{grad}(\omega)] + \text{div}(\omega \rho \theta \mathbf{u}) + \\ + \omega [\partial(\rho \theta) / \partial t + \text{div}(\rho \theta \mathbf{v})] = b$$

Substitutie van de wet van behoud van massa voor het mengsel (de continuïteitsvergelijking) $\partial(\rho \theta) / \partial t + \text{div}(\rho \theta \mathbf{v}) = 0$ in bovenstaande vergelijking levert:

$$\partial \omega / \partial t + \mathbf{v} \cdot \text{grad}(\omega) + \omega \mathbf{u} \cdot \text{grad}(\rho \theta) / (\rho \theta) + \\ + \text{div}(\omega \mathbf{u}) = b / (\rho \theta)$$

6.3. De dispersieve flux

De in de literatuur gebruikelijke uitdrukking voor de dispersieve flux $\omega \mathbf{u}$ is:

$$- \omega \mathbf{u} = D_m \text{grad}(\omega) + \\ + (\alpha_L / v) \mathbf{v} \cdot \text{grad}(\omega) \mathbf{v} + \\ + (\alpha_T / v) [\mathbf{v} \times \text{grad}(\omega)] \times \mathbf{v}$$

Hierin is D_m [$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$; $\text{m}^2.\text{d}^{-1}$] de moleculaire diffusiecoëfficiënt; α_L [m] is de longitudinale dispersielengte; α_T [m] is de transversale dispersielengte, $v = \sqrt{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})}$ is de absolute waarde van de transportsnelheid; het vectorprodukt $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ van twee vectoren $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z)$ en $\mathbf{b} = (b_x, b_y, b_z)$ is gedefinieerd als de vector: $\mathbf{a} \times \mathbf{b} = (a_y b_z - a_z b_y, a_z b_x - a_x b_z, a_x b_y - a_y b_x)$; deze vector staat loodrecht op de vectoren $\mathbf{a}$ en $\mathbf{b}$.

De term $D_m \text{grad}(\omega)$ stelt de moleculaire diffusie voor, die altijd, d.w.z. niet alleen in poreuze media, optreedt in mengsels. Wel is het zo dat D_m ca. 2/3 van de gewone moleculaire diffusiecoëfficiënt is.

De term $(\alpha_L / v) \mathbf{v} \cdot \text{grad}(\omega) \mathbf{v}$ heeft de zelfde richting als de transportsnelheid $\mathbf{v}$, daarom beschrijft deze term de z.g. longitudinale mechanische dispersie.

De term $(\alpha_T / v) [\mathbf{v} \times \text{grad}(\omega)] \times \mathbf{v}$ heeft een richting loodrecht op de transportsnelheid $\mathbf{v}$, daarom beschrijft deze term de z.g. transversale mechanische dispersie.

In de literatuur wordt bovenstaande uitdrukking voor de dispersieve flux steevast op de volgende, uiteraard equivalente manier gepresenteerd:

$$\rho \mathbf{u} = - \underline{D} \cdot \text{grad}(\omega)$$

waarin $\underline{D}$ [$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$; $\text{m}^2.\text{d}^{-1}$] de z.g. dispersietensor is:

$$\underline{D} = (D_m + \alpha_T) \underline{\mathbf{i}} + [(\alpha_L - \alpha_T) / v] \mathbf{v} \mathbf{v} =$$

$$D_{ij} = (D_m + \alpha_T) \delta_{ij} + [(\alpha_L - \alpha_T)/v] v_i v_j$$

Hierin is $\underline{1} = \delta_{ij}$ de eenheidstensor en $\underline{v} \underline{v} = v_i v_j$ ($i, j = 1, 2, 3$) is een dyade (niet te verwarren met het scalaire produkt $\underline{v} \cdot \underline{v}$).

Mechanische dispersie komt alleen in poreuze media voor; het is in feite een term die ervoor corrigeert dat de transportsnelheid $\underline{v} = \underline{q}/\theta$ op de Darcy-schaal niet de werkelijke lokale vloeistofsnelheid (beschreven door de Stokes-vergelijkingen) is, maar een over vele poriënruimtes gemiddelde vloeistofsnelheid. In een lokaal homogeen poreus medium is de longitudinale dispersielengte van de grootte-orde van de afmetingen van de poriën [volgens Fried and Combarnous (zie [Dagan, 1989]) geldt $1,4 l_p < \alpha_L < 2,2 l_p$, waarin l_p de dimensie van de poriënschaal is). De transversale dispersielengte is nog één of twee grootte-orde(s) kleiner ($0,01 \alpha_L < \alpha_T < 0,1 \alpha_L$). Deze vorm van dispersie op de Darcy-schaal heet microdispersie.

Ook op de grotere schaal met een kleinerschalige heterogene doorlatendheidsverdeling wordt bovenstaande formule vaak toegepast, hoewel dat theoretisch lang niet altijd te verantwoorden is. Dispersie op de grote schaal wordt macrodispersie genoemd. Omdat mechanische macrodispersie een term is die ervoor corrigeert dat de grootschalige transportsnelheid $\langle \underline{v} \rangle$ niet gelijk is aan de lokale vloeistofsnelheid $\underline{v}$, maar een over vele poriënruimtes gemiddelde vloeistofsnelheid is, hangen in een heterogeen poreus medium de macrodispersielengtes dus ook sterk van de grootte en vorm van het middelingsvolume, dus van de middelingschaal af. Als zeer globale vuistregel kan worden gezegd dat de longitudinale macrodispersielengte een grootte-orde (ca. een factor tien) kleiner is dan de lengteschaal van middeling, terwijl de transversale macrodispersielengte op haar beurt weer een grootte-orde kleiner is dan de longitudinale dispersielengte. Bij grote verschillen in laterale en verticale middelingschaal zullen de dispersielengtes dan ook, afhankelijk van de heersende stromingsrichting, sterk variëren.

Invullen van de uitdrukking voor de dispersieve flux $\omega \underline{u}$ in de term $\omega \underline{u} \cdot \text{grad}(\rho \theta)/(\rho \theta)$ van de massabehoudswet toont aan dat de laatste term praktisch altijd verwaarloosbaar klein is t.o.v. de term $\underline{v} \cdot \text{grad}(\omega)$. De massabehoudswet vereenvoudigt dan tot:

$$\partial \omega / \partial t + \underline{v} \cdot \text{grad}(\omega) = - \text{div}(\omega \underline{u}) + b/(\rho \theta)$$

De uitdrukking voor de dispersieve flux kan worden herschreven als:

$$\begin{aligned} - \omega \underline{u} = & [(\alpha_L - \alpha_T)/v] \underline{v} \cdot \text{grad}(\omega) \underline{v} + \\ & + (D_m + \alpha_T \underline{v}) \text{grad}(\omega) \end{aligned}$$

Uit deze uitdrukking vinden we dat:

$$\begin{aligned} - \text{div}(\omega \underline{u}) = & [(\alpha_L - \alpha_T)/q] \underline{v} \cdot \text{grad}(\omega) \text{div}(\underline{q}) + \\ & + \underline{q} \cdot \text{grad}[(\alpha_L - \alpha_T)/q] \underline{v} \cdot \text{grad}(\omega) + \\ & + \text{div}[(D_m + \alpha_T \underline{v}) \text{grad}(\omega)] \end{aligned}$$

waarin $\underline{q} = \underline{v}/\theta$.

Zoals we in paragraaf 2.3 hebben gezien is $\text{div}(\underline{q}) = 0$ een goede benadering,

zodat de massabehoudswet er dan als volgt uit ziet:

$$\begin{aligned} \partial\omega/\partial t + \mathbf{v} \cdot \text{grad}(\omega) &= \theta \mathbf{v} \cdot \text{grad}[\{(\alpha_L - \alpha_T)/(\theta v)\} \mathbf{v} \cdot \text{grad}(\omega)] + \\ &+ \text{div}[(D_m + \alpha_T v) \text{grad}(\omega)] + b/(\rho \theta) \end{aligned}$$

Bovenstaande vergelijking wordt meestal de convectie-dispersievergelijking genoemd.

6.4. De stroomlijn-coördinaat

Stel dat gedurende het tijdsinterval $t_0 < t \leq t_1$ het transportsnelheidsveld $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ stationair is, d.w.z. $\partial\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)/\partial t = 0$. Dus $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x})$ waarin $\mathbf{x} = (x, y, z)$ de plaatsvector is. In het driedimensionale stromingsveld wordt een stroomlijn gegeven door de vector $\mathbf{x} = \mathbf{X}(\tau) = [X(\tau), Y(\tau), Z(\tau)]$, waarin τ een scalaire variabele is die de positie op de stroomlijn aangeeft. De richting $d\mathbf{X}(\tau)/d\tau = [dX(\tau)/d\tau, dY(\tau)/d\tau, dZ(\tau)/d\tau]$ is, per definitie van stroomlijn, in de zelfde richting als de richting van $\mathbf{v}(\mathbf{x})$, dus:

$$d\mathbf{X}(\tau)/d\tau = [dX(\tau)/d\tau, dY(\tau)/d\tau, dZ(\tau)/d\tau] = \mathbf{v}/r$$

waarin r een willekeurige scalar functie is. Bij voorbeeld, indien we r kiezen als $r = v = |\mathbf{v}| = \sqrt{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})}$ is r de werkelijke lengte-coördinaat (uitgedrukt in meter) langs de stroomlijn; als we r kiezen als $r = 1$ is τ de coördinaat die de tijd aangeeft die het waterdeeltje met snelheid v langs de stroomlijn heeft gereisd.

Op plaatsen $\mathbf{x}$ waar $\mathbf{v} = 0$, de z.g. stagnatiepunten, is het begrip stroomlijn niet gedefinieerd. Het stromingsveld $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ hoeft weliswaar niet een eenwaardige functie van $\mathbf{x}$ te zijn, maar bifurcatie van stroomlijnen mag niet optreden; d.w.z. er mogen maximaal twee waarden van $\mathbf{v}$ bij één punt $\mathbf{x}$ horen en de twee richtingen moeten een hoek groter dan $\pi/2$ maken. We hebben dan te maken met het type stroomlijnen met breking op vlakken met sprongen in de doorlatendheden, zoals beschreven in de voorafgaande paragrafen over stroming.

Voor elke scalaire functie $f(\mathbf{x}, t) = f[\mathbf{X}(\tau), t] = f(x, y, z, t) = f[X(\tau), Y(\tau), Z(\tau), t] = F(\tau, t)$ geldt nu dat $\partial F/\partial \tau = (\partial f/\partial x) (dX/d\tau) + (\partial f/\partial y) (dY/d\tau) + (\partial f/\partial z) (dZ/d\tau) = (d\mathbf{X}/d\tau) \cdot \text{grad}(f)$, zodat:

$$\mathbf{v} \cdot \text{grad}(f) = r \partial F/\partial \tau$$

Bovenstaande uitdrukking zegt dat een term van de vorm $\mathbf{v} \cdot \text{grad}(f)$ differentiatie naar de stroomlijncoördinaat τ betekent; het gaat dus om differentiatie langs een stroomlijn, zonder de richtingen loodrecht daarop in beschouwing te hoeven nemen.

De convectie-dispersievergelijking kan dus worden geschreven als:

$$\begin{aligned} \partial\omega/\partial t + r \partial\omega/\partial \tau &= \theta r \partial[\{(\alpha_L - \alpha_T)/(\theta v)\} r \partial\omega/\partial \tau]/\partial \tau + \\ &+ \text{div}[(D_m + \alpha_T v) \text{grad}(\omega)] + b/(\rho \theta) \end{aligned}$$

Indien we zowel moleculaire diffusie verwaarlozen (meestal een terechte aanname) als ook transversale dispersie verwaarlozen (wel gemakkelijk, maar in veel gevallen niet goed te rechtvaardigen), dan vinden we uitsluitend

transport langs de stroomlijn volgens:

$$\begin{aligned} \partial\omega/\partial t + r \partial\omega/\partial r = \theta r \partial[(\alpha_L/(\theta v)) r \partial\omega/\partial r]/\partial r + \\ + b/(\rho \theta) \end{aligned}$$

hetgeen een drastische vereenvoudiging betekent. Zelfs als transversale dispersie (en moleculaire diffusie) niet verwaarloosbaar is geven bovenstaande vergelijkingen toch het belang aan van het bepalen van stroomlijnen en reistijden.

6.5. Sorptie en afbraak

Zware metalen en vele organische componenten zijn chemische stoffen die worden geadsorbeerd door het sediment. Wanneer er slechts één component is opgelost in het grondwater het gebruikelijk om sorptie in te voeren m.b.v. de term $b = -\rho_B \partial\Omega/\partial t$. Ook een eventuele afbraakterm kan in de bronterm b worden ingevoerd volgens $b = -\rho \theta k_d \omega^n$, ofwel:

$$b/(\rho \theta) = -[\rho_B/(\rho \theta)] \partial\Omega/\partial t - k_d \omega^n$$

waarin ρ_B [kg.m⁻³] de bulkdichtheid van de vaste stof van het poreuze medium is, Ω [-] is de aan het korrelskelet geadsorbeerde massafractie, k_d [s⁻¹; d⁻¹] is de afbraakcoëfficiënt en n [-] is de exponent in de afbraakterm. In de literatuur wordt voorts meestal verondersteld dat Ω bij constante temperatuur alleen maar een functie is van de massafractie ω van de in het grondwater opgeloste stof. Bij een isotherm stromingsveld vinden we dus:

$$b/(\rho \theta) = -[\rho_B/(\rho \theta)] (d\Omega/d\omega) \partial\omega/\partial t - k_d \omega^n$$

Invullen van bovenstaande uitdrukking in de convectie-dispersievergelijking levert:

$$\begin{aligned} \partial\omega/\partial t + (r/R) \partial\omega/\partial r = \\ = \theta (r/R) \partial[(\alpha_L - \alpha_T)/(\theta v)] r \partial\omega/\partial r/\partial r + \\ + (1/R) \text{div}[(D_m + \alpha_T v) \text{grad}(\omega)] + (k_d/R) \omega^n \end{aligned}$$

waarin:

$$R = 1 + [\rho_B/(\rho \theta)] (d\Omega/d\omega)$$

de zogenaamde retardatiefactor is. Uit bovenstaande vergelijking zien we het volgende. De convectieve term $(r/R) \partial\omega/\partial r = (v/R) \cdot \text{grad}(\omega)$ is een factor R kleiner dan deze term zou zijn zonder sorptie. Door de sorptie treedt er dus schijnbaar vertraging (retardatie) van de convectiesnelheid op. Verder zien we dat zowel de dispersietermen als de afbraakterm een factor R kleiner zijn dan indien er geen sorptie zou zijn. Kennis van de retardatiefactor is dus van uitermate groot belang bij het berekenen van het transport van opgeloste stoffen. Het is nu ook duidelijk dat een handige keuze van r gegeven wordt door $r = R$; de resulterende vorm van de convectie-dispersievergelijking wordt dan:

$$\partial\omega/\partial t + \partial\omega/\partial r = \theta \partial[(\alpha_L - \alpha_T)/(\theta v/R)] \partial\omega/\partial r/\partial r +$$

$$+ (1/R) \operatorname{div}[(D_m + \alpha_T v) \operatorname{grad}(\omega)] + (k_d/R) \omega^n$$

Bij verwaarlozing van moleculaire diffusie en transversale dispersie kan bovenstaande vergelijking langs een op voorhand bepaalde stroomlijn worden opgelost. Uitbreiding naar een gekoppeld stelsel van zulke vergelijkingen voor verschillende chemisch met elkaar reagerende componenten is ook mogelijk.

7. LITERATUUR

- R. Ababou, L.W. Gelhar, D. McLaughlin, Three-Dimensional Flow in Random Porous Media, MIT-report No. 318, pp. 211-220 (1988).
- C.A.J. Appelo, Hydrochemistry for Hydrogeologists: Application of Chemical Theory, Collegedictaat Aardwetenschappen 650/1003/1 (1988).
- J. Bear and A. Verruijt, Modeling Groundwater Flow and Pollution: With Computer Programs for Sample Cases, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht (1987).
- H.S. Carslaw and J.C. Jaeger, Conduction of Heat in Solids, Oxford University Press, Oxford (1959).
- G. Dagan, Flow and Transport in Porous Formations, Springer-Verlag, Berlin (1989).
- G.B. Engelen and G.P. Jones (editors), Developments in the Analysis of Groundwater Flow Systems, IAHS Publication No. 163 (1986).
- A.A. van de Griend, Inleiding tot de Hydrodynamica en Hydraulica, Collegedictaat Aardwetenschappen 650/1005/1 (1989).
- W. Kinzelbach, Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser, Oldebourg Verlag, München (1987).
- P.M. Morse and H. Feshbach, Methods of Theoretical Physics, McGraw-Hill, New York (1953).
- M. Quintard et S. Whitaker, Écoulement monophasique en milieu poreux: effet des hétérogénéités locales, Journal de Mécanique théorique et appliquée, Vol. 6, N° 5, pp. 691-726 (1987).
- N.A. de Ridder, Inleiding tot Numerieke Methoden in de Grondwaterhydrologie: Eindige Differentie en Eindige Elementen Methoden, Collegedictaat Aardwetenschappen, 570/1057/1 (1982).
- T. Rikitake, R. Sato and Y. Hagiwara, Applied Mathematics for Earth Scientists, Terra/Reidel, Dordrecht (1987).
- I.H. Silberberg and J.J. McKetta, Learning How to Use Dimensional Analysis, Petroleum Refiner, Part I, Vol. 32, No. 4, pp. 179-183, Part II, Vol. 32, No. 5, pp. 147-150, Part III, Vol. 32, No. 6, pp. 101-103, Part IV, Vol. 32, No. 7, pp. 130-134 (1953).
- D.K. Todd, Groundwater Hydrology, Wiley, New York (1980).
- J. Tóth, A Theoretical Analysis of Groundwater Flow in Small Drainage Basins, Journal of Geophysical Research, Vol. 68, No. 16, pp. 4795-4812 (1963).
- M. Van Dyke, Perturbation Methods in Fluid Mechanics, The Parabolic Press, Stanford (1975).
- M. van Veldhuizen, Wiskunde voor de Aardwetenschappen, Collegedictaat,

ongenummerd (1989).

J.J. de Vries, Groundwater Hydraulics, Collegedictaat Aardwetenschappen, 650/1006/1 (1989).

R.C. Weast, Handbook of Chemistry and Physics, A Ready-Reference Book of Chemical and Physical Data, CRC Press, Cleveland (1975).

S. Whitaker, Flow in Porous Media I: A Theoretical Derivation of Darcy's Law, Transport in Porous Media, Vol. 1, No. 1, pp. 3-25 (1986).

A.N. Whitehead, Science and the Modern World, The Free Press, New York (1967).