Flodin: een computerprogramma om het transport van hydrofobe organische verontreiniging in de bodem te voorspellen en te beschrijven



G. H. F. TIMMERMANS
Analytisch Chemisch Laboratorium,
Rijksuniversiteit te Utrecht



G. J. M. UFFINK
Rijksinstituut voor
Volksgezondheid en Milieuhygiëne,
Leidschendam



C. A. HENDRIKS
Analytisch Chemisch Laboratorium,
Rijksuniversiteit te Utrecht



N. G. VAN DER GAAST
Adviesbureau Chemielinco,
coöp. ver. u.a. Utrecht



H. A. VAN 'T KLOOSTER
Analytisch Chemisch Laboratorium,
Rijksuniversiteit te Utrecht

Inleiding

In de laatste decennia is gebleken, dat in Nederland de bodem op veel plaatsen als gevolg van diverse activiteiten (industrie/afvalverwerking) in ernstige mate is verontreinigd. Verwacht wordt dat in de toekomst nog vele terreinen onderzocht zullen moeten worden. In gevallen waar het grondwater ernstig blijkt te zijn verontreinigd, is het, naast een inventarisatie van gegevens, noodzakelijk om na te gaan in welke mate de in het grondwater aangetroffen stoffen zich verder in de ondergrond kunnen verplaatsen.

Er bestaan tegenwoordig verschillende grondwaterstromingsmodellen, waarmee men de verspreiding van opgeloste stoffen probeert te voorspellen. Bekend en veel gebruikt zijn de FLOP-programma's [Van den Akker, 1976; 1982]. Met deze programma's kan uitsluitend het convectieve transport van opgeloste stoffen worden berekend bij een grondwaterstroming in een homogeen watervoerend pakket. De invloed van dispersie en/of adsorptie wordt bij de FLOP-programma's buiten beschouwing gelaten. Om na te gaan welke rol dispersie speelt, met name bij transport in horizontaal gelaagde pakketten, is op het Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiëne een methode ontwikkeld, waarbij aan de convectieve verplaatsing, die met FLOP is bepaald, een dispersieve component wordt toegevoegd. Deze dispersieve component wordt gegenereerd met een random walk proces [Uffink, 1983, 1985]. Aan dit model zal in dit artikel worden gerefereerd onder de naam FLORAN.

Voor de beschrijving van transport van organische verontreinigingen is dit convectief-dispersief transportmodel niet zonder meer geschikt. Interacties tussen bodemmateriaal en de stoffen in de oplossing (adsorptie) veroorzaken een vertraging (retardatie) van de bewegingen van deze stoffen. In vele gevallen kan adsorptie aan het bodemmateriaal schematisch worden weergegeven met een lineaire adsorptie-isotherm. Wanneer in de transportvergelijking een lineaire adsorptieterm wordt opgenomen, levert dit tenslotte weer de oorspronkelijke vergelijking op met als enige verschil dat de tijd met een schaalfactor vermenigvuldigd is. Deze factor is bekend als de retardatie-factor.

Voor hydrofobe organische stoffen bestaat er een verband tussen de retardatie-factor, de verdelingsconstante van de stof over een octanol/watersysteem, de hoeveelheid organisch materiaal in de bodem, de dichtheid en de porositeit van de grond [Karickhoff et al., 1979; Roberts et al., 1982].

Dit artikel beschrijft een aanpassing en uitbreiding van het rekenprogramma FLORAN, waarin met retardatie rekening wordt gehouden. De retardatie is hierin plaatsafhankelijk, zodat ruimtelijke variaties in de hoeveelheid organisch stof met deze versie kunnen worden verwerkt. Als voorbeeld worden enkele berekeningen gepresenteerd, die zijn uitgevoerd met gegevens over het Griftpark in Utrecht, een oud-gasfabriek-terrein dat ernstig is vervuild.

Het nieuwe berekeningsmodel is uitgewerkt in het computerprogramma FLODIN (in Pascal). FLODIN werkt momenteel op een DG Eclipse MV/4000 minicomputer.

Deze studie vond plaats in het kader van een doctoraal studie chemie aan de Rijks Universiteit van Utrecht. Het onderzoek werd uitgevoerd binnen het project Analytische Molecuul Spectroscopie, werkgroep Chemometrie, van de vakgroep Analytische Chemie.

Transportvergelijking voor organische verontreinigingen

Voor het transport van organische verontreiniging zijn de meest relevante processen convectie, dispersie, adsorptie en (biologische en/of chemische) transformatie. Voor een uniforme grondwaterstroming in de x-richting luidt de transportvergelijking:

$$D_l \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_t \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_t \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - U \frac{\partial C}{\partial x} + + A = \frac{\partial C}{\partial t} \qquad (1)$$

Hierin is C de concentratie opgeloste stof (g/m^3), t de tijd (s), U de snelheid van het grondwater (specifiek debiet gedeeld door porositeit) (m/s), x y en z de ruimtelijke coördinaten en D_l en D_t respectievelijk de longitudinale en transversale dispersiecoëfficient. De invloed van biologische en/of chemische transformatie en adsorptie is hier aangegeven met het symbool A. Voor conservatieve stoffen is deze term gelijk aan nul. De term A is opgebouwd uit een bijdrage als gevolg van transformatie en een bijdrage als gevolg van adsorptie en kan als volgt worden geschreven:

$$A = -\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_{tr} - \frac{\rho}{\varepsilon} \frac{\partial S}{\partial t} \qquad (2)$$

Hierin is ρ de bulkdichtheid van de grond (g/m^3), ε de porositeit (dimensieloos) en S de massa geadsorbeerde stof per massa-eenheid van het korrelmateriaal. In onderstaande paragrafen worden deze twee bijdragen nader besproken.

Biologische en chemische transformatie

Biologische en chemische transformatie is de verandering van de concentratie van de opgeloste stof als gevolg van microbiologische afbraak of omzetting en chemische reacties zoals oxydatie en hydrolyse. Deze wordt gegeven door de eerste term van het rechterlid van [2].
Organische verontreinigingen, die vaak op gasfabriekterreinen worden gevonden zijn bijvoorbeeld aromaten, polycyclische aromatische koolwaterstoffen (PAK's) en fenolen. Van deze groepen is met name de laatste gevoelig voor transformatie [Roberts et al., 1982] maar ook PAK's kunnen in de bodem door microbiologische activiteit worden afgebroken [Flohr, 1982].
Na ingewikkelde afbraakroutes ontstaan hierbij vaak dihydrodiolen, die weer verder kunnen worden afgebroken. Alkylbenzenen zijn in de bodem slecht afbreekbaar [Baggen, 1984]. Transformatie is geen verzekering dat de stof wordt omgezet in een onschadelijke of minder schadelijke stof. Mackay et al. [1985] stellen dat bij afwezigheid van gegevens die wijzen op afbraak men er voor de veiligheid vanuit moet gaan dat organische verontreinigingen persistent zijn. Om bovenstaande

redenen en om de niet onaantrekkelijke vereenvoudiging die dit oplevert, wordt biologische en chemische transformatie hier buiten beschouwing gelaten.

Adsorptie en retardatie

De interactie tussen het bodemmateriaal en de stoffen in oplossing wordt gegeven door de tweede term in het rechterlid van [2]. Vergelijking [1] kan nu als volgt worden geschreven:

$$D_l \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_t \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_t \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - U \frac{\partial C}{\partial x} = \\ = [1 + \frac{\rho}{\varepsilon} K_d] \frac{\partial C}{\partial t} \qquad (3)$$

Hierin is K_d de verdelingscoëfficient over vaste stof en water (m^3/g). In geval van lineaire adsorptie geldt voor de K_d:

$$K_d = \frac{\partial S}{\partial C} \qquad (4)$$

Deze isotherm heeft betrekking op die gevallen waarin sprake is van sorptie-evenwicht. Voor het rechterlid kan ook worden geschreven:

$$\frac{\partial C}{\partial t^*} \text{ , met } t^* = t/[1 + \frac{\rho}{\varepsilon} K_d] \qquad (5)$$

Hiermee heeft de transportvergelijking weer de oorspronkelijke gedaante van een conservatieve stof ($A = 0$), met als enige wijziging dat de tijd is vermenigvuldigd met een factor $1/R$, waarbij:

$$R = 1 + \frac{\rho}{\varepsilon} K_d \qquad (6)$$

Dit wil tevens zeggen dat het enige verschil in het transport van deze stof vergeleken met een conservatieve stof is, dat het transportproces trager verloopt. De mate van vertraging wordt bepaald door de factor R, die de retardatiefactor wordt genoemd. Voorwaarde is wel, dat er sprake is van evenwichtsadsorptie die met een lineaire adsorptieterm kan worden beschreven. Het eerste vereist onder meer dat de interactie met het bodemmateriaal snel verloopt in vergelijking tot de grondwaterstroming.

In bovenstaande beschouwing mag de retardatiefactor ook een plaatsafhankelijke variabele zijn, zodat ook de ruimtelijke variatie van R in rekening kan worden gebracht.

De belangrijkste bijdrage aan de ruimtelijke variatie van R is afkomstig van de verdelingscoëfficient K_d, aangezien deze veel sterker varieert dan ρ en ε [Roberts et al., 1982]. Het is voorts gebleken dat voor een aantal organische verbindingen de retardatie slechts door twee parameters wordt bepaald, namelijk de hydrofobiciteit van de stof en de fractie organische stof in de grond [Mackay et al., 1985]. Hoe groter de hydrofobiciteit van een stof des te sterker wordt deze vertraagd. Dit is zowel in het laboratorium [Chiou et al., 1983; Karickhoff et al., 1979; Schwarzenbach et al., 1981] als in het veld [Schwarzenbach] aangetoond. Experimenten van Karickhoff et al. [1979] tonen aan dat een goede voorspelling van de K_d mogelijk is op basis van de hoeveelheid organisch koolstof in de grond, de f_{oc}, en de verdelingsconstante van de stof over een octanol-water systeem, de K_{ow}. Voor K_{ow}'s variërend van 10^2 tot 10^6 en f_{oc}'s van 0,001 tot 0,033 blijken de meetresultaten te kunnen worden beschreven door [Karickhoff, Roberts]:

$$K_d = 6.3 \times 10^{-7} \times f_{oc} \times K_{ow} \qquad (7)$$

Met [6] levert dit een retardatiecoëfficiënt op van:

$$R = [1 + (\frac{\rho}{\varepsilon} \times 6.3 \times 10^{-7} \times f_{oc} \times K_{ow})] \qquad (8)$$

Zoals al eerder is opgemerkt, geldt deze eenvoudige relatie voor de retardatiefactor niet voor alle organische verbindingen. In veel gevallen zijn meer factoren van invloed, zoals de concentratie en eigenschappen van verontreinigingen (aanwezigheid van specifieke groepen in de moleculen), bodemparameters zoals de textuur en de aanwezigheid van bepaalde kleimineralen, de pH van het grondwater en de aanwezigheid van andere opgeloste stoffen [Mackay et al., 1985]. Over fenolen is bijvoorbeeld gerapporteerd dat desorptie van sedimentfracties door aanwezigheid van organisch materiaal werd vertraagd; een deel was zelfs irreversibel geadsorbeerd [Isaacson en Frink, 1984]. Een verklaring moet worden gezocht in de aanwezigheid van waterstofbruggen tussen huminezuren uit het sediment en de fenolische groepen in de verontreiniging, die een veel sterkere verbinding betekenen dan de normale hydrofobe interacties.
In diverse publikaties wordt gemeld dat voor een grote groep organische stoffen, waaronder alkylbenzenen en PAK's de K_{ow} een goede voorspellende waarde geeft voor de mate van bioaccumulatie [Geyer et al., 1984; Mackay, 1982; Southworth et al., 1978]. Dit proces is hier echter niet in beschouwing genomen.

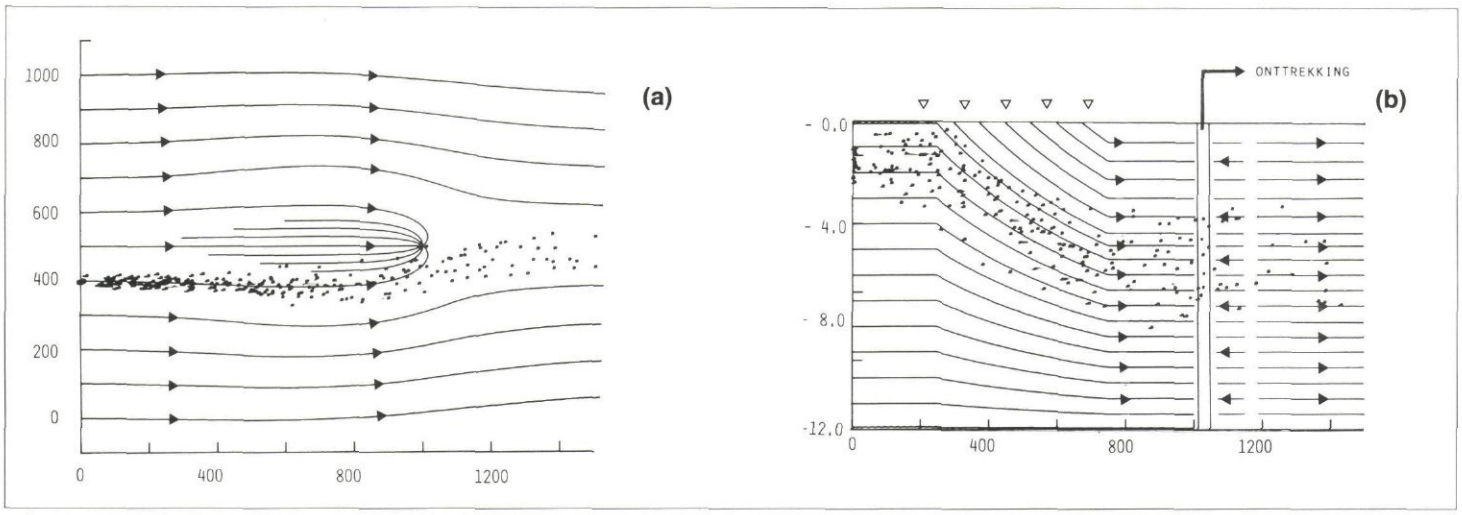
Rekenmethode

De FLOP-programma's berekenen stroombanen en verblijftijden van grondwater door de bewegingsvergelijkingen voor individuele waterdeeltjes numeriek te integreren [Van den Akker, 1976; 1982]. Het feit dat in de FLOP-programma's deeltjes in de tijd worden gevolgd maakt deze programma's zeer geschikt als basis voor een random-walk methode. Bij deze methode wordt gebruik gemaakt van de analogie tussen dispersie/diffusie en een random-walk proces.
Het rekenprogramma FLORAN [Uffink, 1983; 1985], waarin de random-walk methode wordt toegepast, heeft bovendien de mogelijkheid om stroming in gelaagde pakketten te berekenen. Tevens is in FLORAN een door Strack [1984] ontwikkelde techniek toegepast om uitgaande van de Dupuit-Forchheimer benadering, het water- en stoftransport in verticale richting te bepalen. Dit kan van belang zijn voor gevallen waarbij aan het watervoerend pakket aan de bovenzijde water wordt toegevoegd (neerslag) of aan de onderzijde water wordt onttrokken (lekkage). In de hier beschreven nieuwe versie FLODIN wordt tevens rekening met retardatie gehouden. Daarbij wordt uitgegaan van de K_{ow} van de betreffende stof en de fractie organisch koolstof in het bodempakket en wordt de retardatiefactor berekend met [8]. Indien, bijvoorbeeld door de aanwezigheid van veen, plaatselijk afwijkende hoeveelheden organisch koolstof voorkomen, kan dit, met de begrenzingen van die gebieden, worden opgegeven. Een andere toepassing van deze mogelijkheid is om in de gebieden, waar door aanwezigheid van veel verontreiniging (zoals bijvoorbeeld in oude teerputten op voormalige gasfabriekterreinen) zelf-adsorptie optreedt, voor de fractie organisch materiaal een verhoogde waarde op te geven. (Met zelf-adsorptie wordt adsorptie van verontreiniging aan verontreiniging bedoeld, en niet aan het van nature aanwezig organisch materiaal).

De verontreiniging wordt in het FLODIN-model beschreven met een verzameling deeltjes. De startposities van de deeltjes worden random gekozen binnen de grenzen van een of meer driedimensionale rechthoekige lichamen. Indien men berekeningen wil uitvoeren aan gegevens uit de praktijk, en de verontreiniging is gelokaliseerd met behulp van een rechthoekig meetnet, is het mogelijk de gemeten concentraties direct in te voeren. Na keuze van het totaal aantal deeltjes, verdeelt FLODIN deze over de gebieden rond de meetpunten, evenredig aan de aldaar gemeten concentraties.
Berekeningen werden uitgevoerd op basis van zowel fictieve data als data uit een praktijkgeval, de verontreiniging van het Utrechtse Griftpark.

Berekeningen aan fictieve gegevens

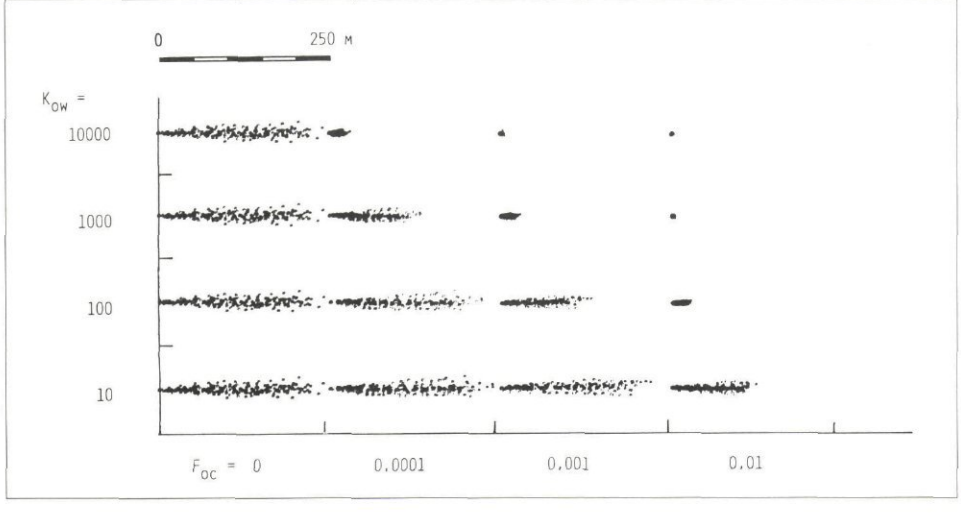
De eerste berekening betreft het transport van verontreiniging door een watervoerend pakket, waarin zich een onttrekkingspunt bevindt. Stroomopwaarts van de put bevindt zich een cirkelvormig gebied waar infiltratie van bovenaf plaatsvindt. Dit veroorzaakt daar een verticale afbuiging van de stroombanen van het water. De verontreiniging is afkomstig uit een injectiepunt dat zich ook stroomopwaarts van de put bevindt. In deze



Afb. 1 - Convectief en dispersief transport zonder retardatie.
a: horizontale doorsnede. b: verticale doorsnede. Uniforme stroming in x-richting: 0.30 m^2/d; neerslag van 125 mm/j in cirkel rond (500,500) met straal van 250 m; onttrekking in (1.000,500) van 5 m^3/u;pakketdikte 12 m; porositeit 0.33; dispersiviteiten: 10.0 m (longitudinaal), 0.4 m (transversaal/horizontaal) en 0.001 m (transversaal/verticaal); geen retardatie; eindtijd 20.000 dagen.

berekening is nog geen rekening gehouden met retardatie.
Afb. 1 geeft het resultaat van de berekening weer. Zoals uit de afbeelding blijkt, komt een deel van de verontreiniging in de put terecht, en beweegt een deel zich erlangs.
Het tweede rekenvoorbeeld betreft berekeningen waaruit het effect van variaties in K_{ow} en f_{oc} op de retardatie blijkt. In afb. 2 is een watervoerend pakket met uniforme grondwaterstroming weergegeven, waarin zich zestien injectiepunten bevinden.
In horizontale richting varieert het organisch koolstof gehalte, de f_{oc}, en in verticale assen zijn de waarden voor f_{oc} en K_{ow} weergegeven. Het resultaat van de berekening gegeven. Het resultaat van de berekening laat zien dat retardatie sterk toeneemt bij hogere waarden van f_{oc} en K_{ow}. Wanneer f_{oc} nul bedraagt, is er (in het model) geen sprake meer van retardatie. Voor stoffen met lage K_{ow}'s voorspelt het model een kleine retardatiefactor. Als een van de voorbeelden wordt in de afbeelding een stof met een K_{ow} van 10 gegeven (fenolen). De berekende waarde voor de retardatie is voor deze stoffen te laag in vergelijking met praktijkwaarden. De oorzaak hiervoor is dat voor deze stoffen elektrostatische interacties en vorming van waterstofbruggen een veel grotere bijdrage leveren dan de hydrofobe interactie die het model hanteert.

Afb. 2 - Verspreiding van diverse stoffen als functie van hun K_{ow} en de fractie organisch materiaal in de bodem.
Uniforme stroming in x-richting: 1 m^2/d; pakketdikte 20 m; porositeit 0.33; dispersiviteiten: 5.0 m (longitudinaal), 0.6 m (transversaal/horizontaal) en 0.02 m (transversaal/verticaal); eindtijd 20.000 dagen.



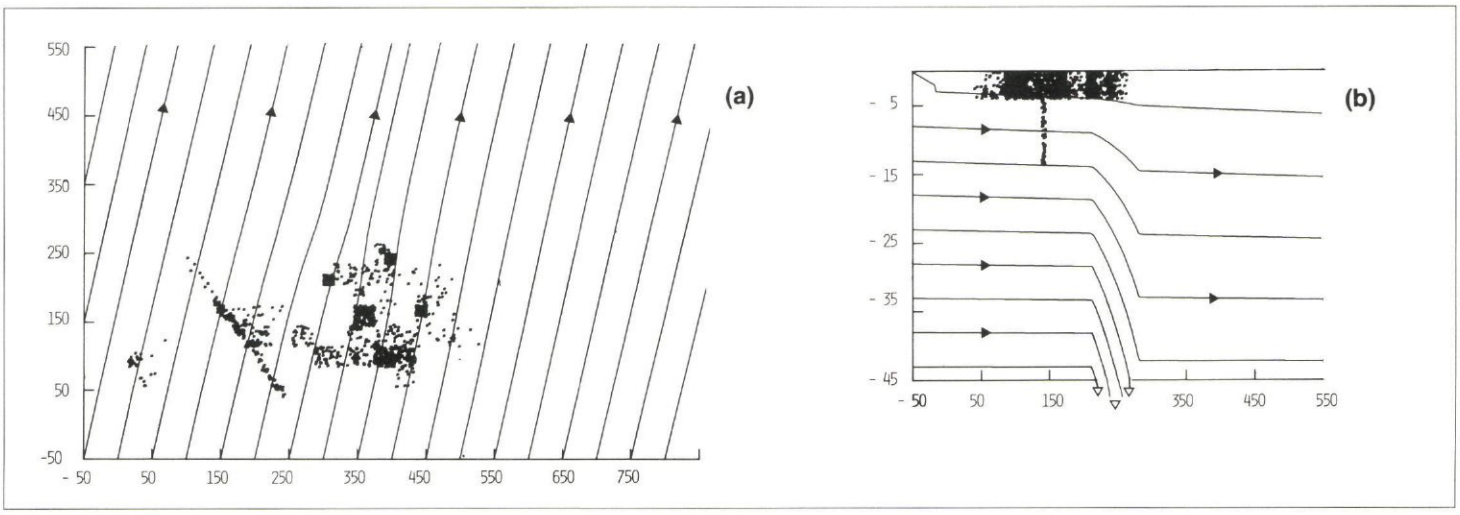
Berekeningen aan praktijk-gegevens van het Griftpark

Algemeen

Het terrein van het Griftpark in Utrecht is 10 ha groot en omvat onder andere het bedrijfsterrein van een voormalige gasfabriek. Uitgebreide onderzoekingen uit het verleden hebben de locatie van de verontreinigingen gedetailleerd in kaart gebracht. Door middel van ongeveer 200 boringen is het terrein onderzocht op aanwezigheid van teer- en olieachtige componenten. Van elk monster werd (voor verschillende diepten) de totaal fluorescentie gemeten als maat voor het PAK-gehalte. In bepaalde gevallen (als verontreiniging door PAK onzeker was) werden van een aantal afzonderlijke PAK's (de Borneff-groep) de concentraties gemeten. Benzeen, tolueen, xyleen en naftaleen werden slechts enkele malen gemeten. Daarnaast werden ook metingen verricht aan fenol en cyaniden. Deze zijn voor het hier gerapporteerde onderzoek niet van belang.

Data

Als maat voor de aanwezigheid van PAK's en lichte aromaten werd de gemeten totaal fluorescentie genomen zoals die in het Concept Interim Rapport betreffende het Hernieuwd Nader Onderzoek [1983] vermeld staan. Feitelijk kan de gemeten fluorescentie niet dienen als maat voor aanwezige lichte aromaten, omdat bij fluorescentiebepalingen alleen polycyclische verbindingen worden gemeten. Bij gebrek aan meetgegevens betreffende de lichte aromaten, is dit toch gebeurd. Een extra overweging die bij deze beslissing meespeelde was dat in het verleden, toen de verontreiniging ontstond, de gedumpte teer en olie in ruime mate lichte aromaten bevat zullen hebben.
Alleen de locaties waar een fluorescentiewaarde van 500 of meer was gemeten werden als vervuild beschouwd; per locatie werden de gemeten fluorescenties (behorende bij de verschillende diepten) gemiddeld.
Dit leverde 84 door bovenstaand criterium als 'vervuild' gekenschetste meetpunten.
De vervuiling werd vervolgens gesimuleerd door 1.250 deeltjes te verdelen over 84

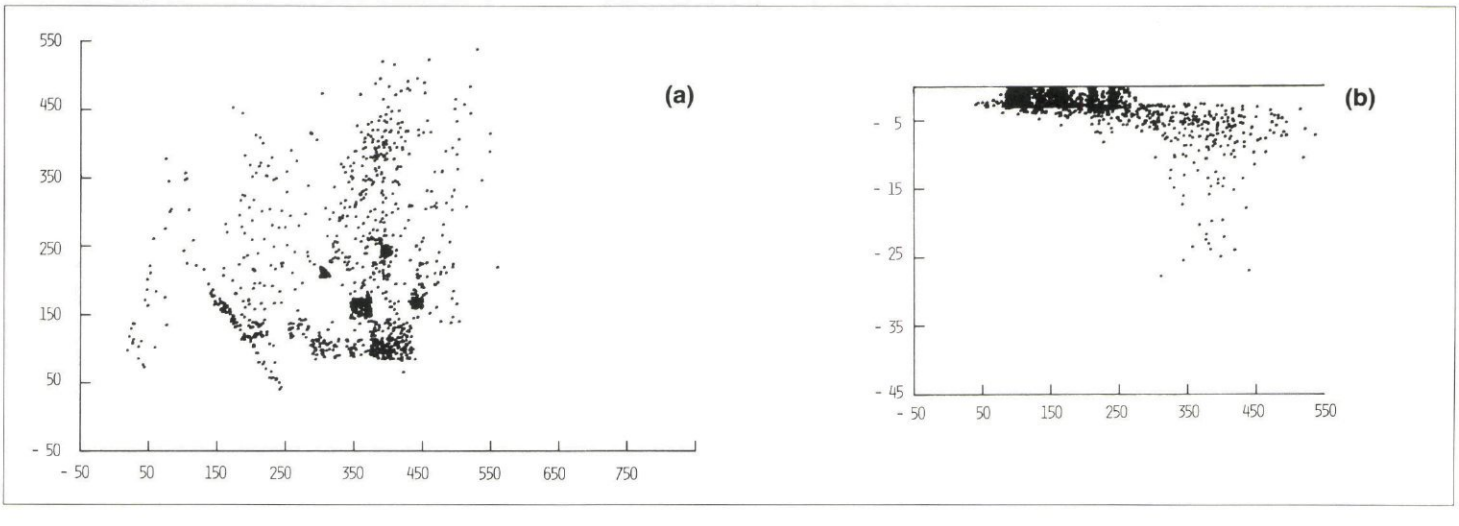


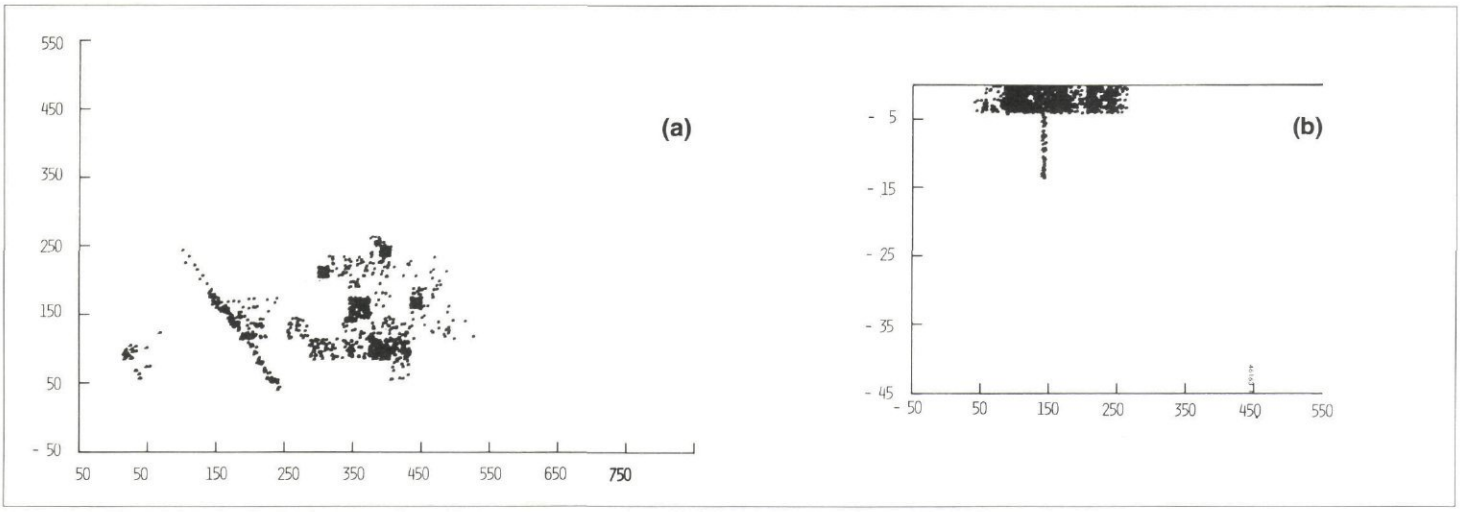
Afb. 3. - Gemodelleerde grondwaterstroming in het Griftpark en startposities van de verontreiniging.
a: horizontale doorsnede. b: verticale doorsnede. Uniforme stroming in noordwestelijke richting: 0.63 m^2/d; neerslagoverschot van 25 mm/j; lekkage van 2.000 mm/j aan onderkant in cirkel rond (340,240) met straal van 40 m; pakketdikte 45 m; porositeit 0.33; 45 lagen, de bovenste drie met relatieve doorlaatbaarheden van 0.08, 0.08 en 0.01 t.o.v. de resterende lagen.

rechthoekige gebieden. In deze gebieden liggen de vervuilde meetpunten. De horizontale afmetingen van de gebieden waren afhankelijk van de mazen van het monstername-net ter plaatse (15 of 30 m).
De gekozen verticale afmetingen liepen meestal van 0 tot 4 m diepte, behalve onder het riviertje de Biltsche Grift: daar lagen de begrenzingen op 2 en 4 m diepte. Verder is er een teerput gesimuleerd door middel van een gebied dat liep van 4 tot 14 m diepte.
Bij de verdeling van de 1.250 deeltjes over de 84 gebieden werd de gemeten fluorescentie als verdeelsleutel gehanteerd. Per gebied werden de deeltjes random verdeeld.
Starttijden van de deeltjes werden in het geval van de berekeningen aan PAK's random gekozen tussen 0 en 200 jaar (de eindtijd van de berekening). Hiermee werd het langzaam in oplossing gaan van deze verbindingen gesimuleerd. Voor lichte aromaten geldt dat ze veel sneller in oplossing gaan. Daarom werd in deze berekening aan alle deeltjes een starttijd 0 toegekend.

Voor de hydrologische beschrijving van het terrein werd gebruik gemaakt van gegevens van Provinciale Waterstaat Utrecht. Nieuwenhuis [1980] rapporteert dat uit metingen van de grondwaterstanden blijkt dat er in het westelijk deel van het park vooral verticale stroming plaatsvindt. Lokaal wijkt de stroming nogal af van de regionale uniforme stroming in noord-westelijke richting.
Bovenstaande beschrijving werd als volgt in het model verwerkt. Op de uniforme stroming (snelheid: 15 m/j) is een neerslagoverschot van 50 mm/j gesuperponeerd. Dit resulteert in een licht verhang. In het westelijk deel van het park bevindt zich een klein cirkelvormig lek waaruit een hoeveelheid water van 10.000 m^3/j stroomt.
Gegevens die het bodempakket karakteriseren (porositeit, doorlatendheid, veenlagen, etc.) waren afkomstig uit het concept-rapport betreffende het hernieuwd nader onderzoek [1983]. In het model werd het bodempakket beschreven met 45 laagjes. Wat betreft de doorlatendheid is het volgende van belang. Bij homogene watervoerende pakketten behoeft de doorlatendheid niet te worden opgegeven, aangezien de stroomsnelheid direct kan worden berekend uit de opgegeven debieten van pompputten en neerslag. In gelaagde pakketten zullen ten gevolge van doorlatendheidsverschillen verticale variaties voorkomen in de stroomsnelheid. Voor de berekening van deze snelheidsverschillen zijn uitsluitend de doorlatendheidsverhoudingen van de laagjes belangrijk en niet de absolute grootte van de

Afb. 4 - Berekende verspreiding van aromaten in een periode van 75 jaar.
a: horizontale doorsnede. b: verticale doorsnede. Grondwaterstroming en gegevens over bodempakket als in afb. 3. Overige gegevens: K_{ow}: 100; dispersiviteiten: 2.0 m (longitudinaal), 0.4 m (transversaal/horizontaal) en 0.01 m (transversaal/verticaal); fractie organisch materiaal 0.0040 en op plaatsen waar een hoge fluorescentiewaarde gevonden werd 0.05; eindtijd 27.375 dagen.





Afb. 5 - Berekende verspreiding van PAK's in een periode van 200 jaar.
a: horizontale doorsnede. b: verticale doorsnede. Grondwaterstroming en gegevens over bodempakket als in afb. 3. Overige gegevens: K_{ow}: 100.000; dispersiviteiten: 2.0 m (longitudinaal), 0,2 m (transversaal/horizontaal) en 0.001 m (transversaal/verticaal); fractie organisch materiaal 0.0040 en op plaatsen waar een hoge fluorescentiewaarde gevonden werd 0.05; eindtijd 72.000 dagen.

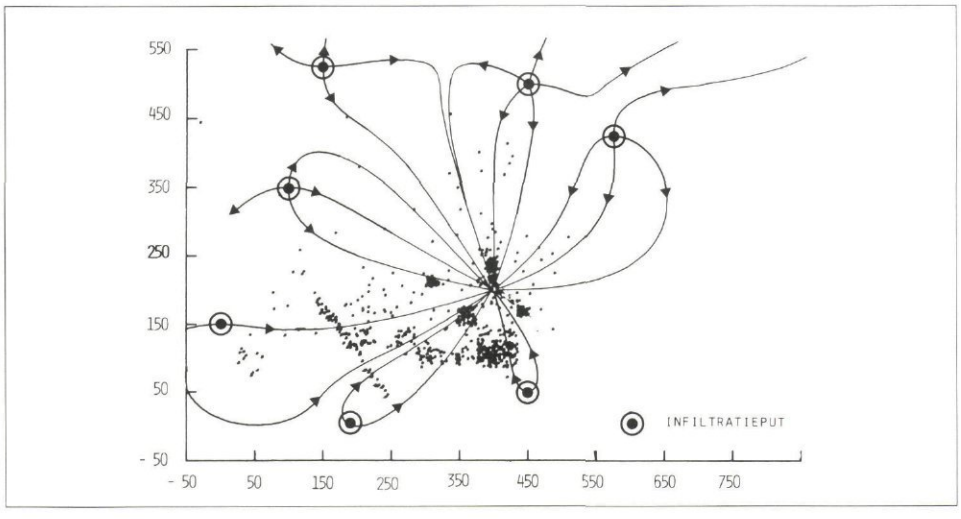
doorlatendheid. In het hier beschreven geval is voor de bovenste drie laagjes een doorlatendheid gekozen resp. 0,08, 0,08 en 0,01 (de laatste van deze drie is een kleilaagje). De overigen hebben een doorlatendheid van 1,0. Hierdoor is de berekende grondwaterstroming bovenin het pakket langzaam en neerwaarts gericht (een ruwe beschrijving van de netto grondwaterstroming in de onverzadigde zone).

De hoeveelheid organisch materiaal werd op 0,4% gesteld. Op plaatsen waar grote hoeveelheden verontreiniging aanwezig was, werd een waarde van 5% verondersteld. Op deze wijze werd zelf-adsorptie gesimuleerd.

Rekenresultaten
Afb.3 geeft een beeld van de berekende grondwaterstroming. In de afbeelding zijn tevens de startposities van de deeltjes weergegeven.
Afb. 4 geeft het transport van lichte aromaten weer. De eindtijd van de berekening was 75 jaar. Uit de afbeelding blijkt dat de lichte aromaten redelijk mobiel zijn en in 75 jaar zo'n 300 m afgelegd hebben. Een deel van de verontreiniging bereikt een diepte van bijna 30 m.
Afb. 5 geeft een beeld van de verspreiding van PAK's. Eindtijd van de berekening was 200 jaar. De berekening bevestigt dat de PAK's praktisch immobiel zijn.

Naast bovenstaande berekeningen is het mogelijk het effect van bepaalde beschermingsmaatregelen te berekenen. Bruggeman en Snelting [1985] beschrijven een hydrologisch scherm als isolatie van bodemverontreiniging. Door middel van infiltratie- en onttrekkingsputten kan de grondwaterstroming lokaal zodanig veranderd wordendat de verontreinigingen zich niet meer kunnen verspreiden, maar naar een of meer centraal gelegen onttrekkingsputten bewegen. Men dient bij de keuze van de posities van de putten wel rekening te houden met (transversale) dispersie.
Het computerprogramma FLODIN is geschikt om het effect van diverse oplossingen te berekenen. Als voorbeeld dient een berekening aan lichte aromaten. Als beginsituatie werd gekozen de na 75 jaar bereikte eindposities (afb. 4). Voor de hydrologische isolatie werden 8 putten, waarvan 7 infiltratie- en 1 onttrekkingsput, aangewend. De periode waarover berekend werd was 15 jaar. Afb. 6 geeft de eindsituatie na 15 jaar retourbemaling weer.

Afb. 6 - Effect van hydrologische isolatie.
a: horizontale doorsnede. b: verticale doorsnede. Hydrologisch scherm bewerkstelligd door onttrekkingsput in (400,200) met een debiet van 200 m^3/u; rondom dit punt zeven infiltratieputten met diverse debieten (een totaal debiet van 200 m^3/u). Startposities waren de eindposities van de aromaten (figuur 4); eindtijd 5.500 dagen.



Conclusie
Het hier besproken model biedt mogelijkheden om het transport van hydrofobe organische verontreinigingen te berekenen. Hiervoor zijn gegevens die het bodempakket beschrijven, en hydrologische gegevens nodig. Het computerprogramma kan in sommige gevallen gemeten concentraties direct verwerken. Noodzakelijk hiervoor is dat de monstername met behulp van een rechthoekig monsternamenet heeft plaatsgevonden.
Indien de desbetreffende verontreiniging volgens een lineaire adsorptie-isotherm aan bodemmateriaal adsorbeert, en deze adsorptie plaatsvindt op basis van hydrofobe interacties, kan de retardatie van de verontreiniging door het model worden berekend.
Het resultaat van de berekeningen is een voorspelling van de verplaatsing van de verontreiniging, en kan met de nodige voorzichtigheid gebruikt worden als aanvullende informatie bij saneringS-

onderzoeken. Met name isolatie-technieken die berusten op hydrologische principes kunnen met het model vooraf worden getest.

Literatuur

Van den Akker, C. (1976). *Een numerieke berekeningsmethode van stroomlijnen of stroombanen met bijbehorende verblijftijden.* H_2O (9) 21, pag. 436-438.

Van den Akker, C. (1982). *Numerical analysis of the streamfunction in plane groundwater flow.* Proefschrift, Delft.

Baggen, W. (1984). *Het gedrag van xenobiotische stoffen in de bodem en de (on-)mogelijkheid om de oktanol-water coëfficient te gebruiken als normstellingsparameter.* Werkgroep Milieukunde, Rijksuniversiteit Utrecht. Verslag nr. 18/84.

Bruggeman, G. A.; Snelting, H. (1985). *Hydrologisch scherm als isolering van bodemverontreiniging.* H_2O (18) 9, pag. 186-192.

Chiou, C. T.; Porter, P. E.; Schmedding, D. W. (1983). *Partition equilibria of nonionic organic compounds between soil organic matter and water.* Environ. Sci. Technol. 17 (4), pag. 227-231.

Concept Interim Rapport betreffende Hernieuwd Nader Onderzoek Bodemverontreiniging Griftpark. (1983). Provinciale Waterstaat Utrecht.

Flohr, P. (1982). *Polycyclische aromatische koolwaterstoffen (PAK) in de bodem – een literatuurstudie.* Instituut voor Milieuvraagstukken, Amsterdam.

Geyer, H; Politzki, G.; Freitag, D. (1984). *Prediction of ecotoxicological behaviour of chemicals: relationship between n-octanol/water partition coëfficient and bioaccumulation of organic chemicals by Alga Chlorella.* Chemosphere 13 (2), pag. 269-284.

Isaacson, P. J.; Frink, C. R. (1984). *Nonreversible sorption of phenolic compounds by sediment fractions: the role of sediment organic matter.* Environ. Sci. Technol 18 (1), pag. 43-48.

Karickhoff, S. W.; Brown, D. S.; Scott, T. A. (1979). *Sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments.* Water Res. 13, pag. 241-248.

Mackay, D. M. (1982). *Correlation of bioconcentration factors.* Environ. Sci. Technol. 16 (5), pag. 274-278.

Mackay, D. M.; Roberts, P. V.; Cherry, J. A. (1985). *Transport of organic contaminants in groundwater.* Environ. Sci. Technol. 19 (5), pag. 384-392.

Nieuwenhuis, J. G. W. (1980). *Hydrologie van het Griftpark.* Provinciale Waterstaat Utrecht.

Pickens, J. F.; Lennox, W. C. (1976). *Numerical simulation of waste movement in steady groundwater flow systems.* Water Resour. Res. 12 (2), pag. 171-180.

Roberts, P. V.; Reinhard, M.; Valocchi, A. J. (1982). *Movement of organic contaminants in groundwater: implications for water supply.* J. Am. Water Works Assoc. 74, pag. 408-413.

Schwarzenbach, R.P.; Westall, J. (1981). *Transport of nonpolar organic compounds from surface water to groundwater. Laboratory sorption studies.* Environ. Sci. Technol. 15 (11), pag. 1360-1367.

Southworth, G. R.; Beauchamp, J. J.; Schmieder, P. K. (1978). *Bioaccumulation potential of polycyclic aromatic hydrocarbons in Daphnia Pulex.* Water Res. 12, pag. 973-977.

Strack, O. D. L. (1984). *Three-dimensional streamlines in Dupuit-Forchheimer Models.* Water Resour. Res. 20 (7), pag. 812-822.

Uffink, G. J. M. (1983). *A random walk method for the simulation of macrodispersion in a stratifield aquifer.* Relation of groundwater quantity and quality (proceedings of the Hamburg Symposium, august 1983). IAHS Publ. no. 146.

Uffink, G. J. M. (1985). *Macrodispersie in gelaagde pakketten. Deel 1: een rekenmodel.* Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiene. Deelrapport nr. 840380001.

● ● ●

CIMI van start: milieu-informatie beter toegankelijk

Per 16 juni jl. is de Centrale Ingang Milieu Informatie (CIMI) van start gegaan. CIMI heeft ten doel informatie op milieugebied beter toegankelijk te maken.

Uit proefnemingen met milieu-effectrapportages is naar voren gekomen dat het vaak moeilijk is de juiste informatie over een specifiek milieu-aspect te vinden. Deze constatering is vorig jaar nog eens bevestigd door een onderzoek van het bureau r + m te Heerlen. Bij dit onderzoek werd 'tijdrovendheid' genoemd als grootste probleem bij het zoeken naar milieu-informatie.

CIMI wordt ontwikkeld door een projectgroep in opdracht van het Directoraat-Generaal voor de Milieuhygiëne onder verantwoordelijkheid van het Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiëne.

CIMI zal voorlopig bestaan uit drie aan elkaar gerelateerde deelsystemen:

– CIMIBRON, een verwijssysteem naar bronhouders;
– CIMILIT, een informatiesysteem voor literatuur op milieugebied;
– CIMION, een informatiesysteem voor lopend milieu-onderzoek.

Met de ontwikkeling van CIMIBRON is het eerst begonnen: het prototype is thans zover ontwikkeld dat het in de praktijk kan worden beproefd. Het bronhoudersverwijssysteem CIMIBRON heeft tot doel de milieu-expertise die in organisaties aanwezig is te ontsluiten.

Via CIMIBRON zullen vragenstellers zo snel en gericht mogelijk worden doorverwezen naar de bronhouder die over de gezochte informatie beschikt. In CIMIBRON is voor zover van toepassing ook een karakteristiek opgenomen van de bibliotheek van de desbetreffende organisatie. Het prototype CIMIBRON omvat thans ca. 25 organisaties, 150 bronafdelingen en 300 specialismen.

CIMIBRON is bestemd voor een breed publiek; iedereen met beroepsmatige of particuliere belangstelling voor milieuzaken kan contact opnemen met een van de bij het CIMI-bureau aanwezige milieudeskundigen. Deze intermediair zal in eerste instantie trachten de vraag te beantwoorden met behulp van het geautomatiseerde informatiesysteem. Het zoeken in het CIMIBRON-bestand geschiedt via een thesaurus, een lijst van gecontroleerde trefwoorden.

De speciaal voor CIMI ontwikkelde thesaurus omvat thans bijna 6.000 trefwoorden.

Wanneer het zoeken in het CIMIBRON-bestand geen of onvoldoende informatie oplevert, zal de intermediair proberen op andere wijze het gewenste antwoord te vinden. Dit kan bijvoorbeeld geschieden door een deskundige te consulteren, of door contact op te nemen met een instantie of bibliotheek die (nog) niet in de CIMI-bestanden is opgenomen. Ook is het mogelijk dat een zusterorganisatie in het buitenland wordt benaderd of een zoekactie wordt ondernomen in een internationale publieke databank. Voor deze vorm van dienstverlening zullen door CIMI voorshands geen kosten in rekening worden gebracht.

Op dit moment is een beperking van de CIMI-service nog dat de informatie die wordt verstrekt bestaat uit een verwijzing naar een deskundige instantie, zodat altijd een vervolgactie nodig is om de uiteindelijk gewenste informatie te verkrijgen. Deze beperking zal over een paar maanden grotendeels worden opgeheven wanneer een rechtstreekse verwijzing naar literatuur en lopend onderzoek ook mogelijk zal zijn. Naar verwachting zullen de deelsystemen CIMILIT en CIMION dit najaar in gebruik worden genomen.

Een uitgebreide test- en evaluatiefase tussen 1 september en 15 november a.s. zal voorafgaan aan de definitieve in bedrijfstelling van CIMI. Deze test- en evaluatiefase is bedoeld om te toetsen of de kwaliteit en de prestaties van de deelsystemen overeenkomen met de tevoren vastgestelde eisen.

In het kader van de test zal onder meer een aantal workshops worden georganiseerd met het doel de mening van de toekomstige gebruikers over het CIMI-systeem te peilen en op grond van de bevindingen eventueel verbeteringen in het systeem aan te brengen.

Leider van het projectteam is dr. A. Adriaanse. Het Projectbureau CIMI is gevestigd in gebouw Damsigt, kamer Da 506, Nieuwe Havenstraat 6, Voorburg. Het postadres is: postbus 150, 2260 AD Leidschendam, telefoon 070 - 69 42 51, toestel 417.

Nieuwe directeur bedrijfsvoering DWL Rotterdam

Ing. J. A. Verheijden (40) is met ingang van 1 oktober 1986 benoemd tot directeur bedrijfsvoering van de gemeentelijke Drinkwaterleiding Rotterdam. Hij volgt in deze functie ir. C. Wielenga op, die het bedrijf wegens VUT verlaat. De heer Verheijden is momenteel werkzaam als project director bij de Bos Kalis Groep.

