

---

# Gevoeligheidsanalyse transportparameters voor de ondergrond

Wouter Karreman  
Ed Veling

---

*Het model PROFCD (PROFile Convection-Diffusion) is door Veling (1993) geschreven om snel een inschatting te kunnen maken van het transport van vervuiling in de ondergrond. Het is een interessante vraag hoe onzekerheid in de invoerparameters de resultaten beïnvloedt (zie ook Pappenberger en Beven, 2006). In dit 'Bachelor Graduation Project (BSc)' is op zoek gegaan naar een snelle en eenvoudige methode om deze gevoeligheid te kunnen schatten. Zo kan in de praktijk gemakkelijk bepaald worden of de onzekerheid in de invoerparameters acceptabel is of niet. Hiervoor is een Matlab-programma (ParamSensCD = Parameter Sensitivity Convection Diffusion) ontwikkeld.*

## Modelbeschrijving

Voor een aantal milieustudies is het van belang om eenvoudig te bepalen hoe snel vervuilende stoffen doordringen in de ondergrond. In het verleden is er veel onderzoek gedaan naar het modelleren van verplaatsing en afbraak van vervuilingen in de ondergrond. Met behulp van analytische formules kan in bepaalde situaties een schatting worden gemaakt van de hoeveelheid stof die een bepaald niveau is gepasseerd. De partiële differentiaalvergelijking die ééndimensionaal chemisch transport onder constante stroomsnelheid en met afbraak beschrijft is de volgende,

$$\frac{\partial}{\partial t}(nc^r + \rho s) = \frac{\partial}{\partial z}(nD \frac{\partial c^r}{\partial z} - qc^r) - \mu_w nc^r - \mu_s \rho s, \quad 0 < z < \infty, \quad t > 0,$$

waarin  $z$  [L] de afstand tot het maaiveld is,  $t$  [T] de tijd,  $c^r$  [M/L<sup>3</sup>] de concentratie,  $s$  [-] de geadsorbeerde massafractie,  $n$  [-] het vochtvolume per volumedeel,  $D$  [L<sup>2</sup>/T] de dispersiecoëfficiënt,  $q$  [L/T] de volumeflux (Darcysnelheid),  $\rho$  [M/L<sup>3</sup>] het soortelijke gewicht van de grond en  $\mu_w$  en  $\mu_s$  [1/T] de snelheidsconstanten voor eerste orde afbraak in respectievelijk water en grond. Aangenomen wordt dat de relatie tussen  $c^r$  en  $s$  beschreven wordt door de lineaire relatie  $s = kc^r$  met  $k$  [L<sup>3</sup>/M] de distributiecoëfficiënt. Indien men

---

**Wouter Karreman** (wkarreman@gmail.com) studeerde aan de Technische Universiteit Delft, en is nu na zijn afstuderen werkzaam bij Boskalis bv.

**Ed Veling** (E.J.M.Veling@TUDelft.nl) is werkzaam bij de Technische Universiteit Delft, Faculteit van Civiele Techniek en Geowetenschappen, Vakgroep Watermanagement, Postbus 5048, 2600 GA Delft.

deze relatie hierboven substitueert krijgt men de volgende partiële differentiaalvergelijking:

$$R \frac{\partial}{\partial t} c^r = D \frac{\partial^2 c^r}{\partial z^2} - v \frac{\partial c^r}{\partial z} - \mu R c^r, \quad 0 < z < \infty, \quad t > 0,$$

waarbij  $R = 1 + \rho k/n$  [-] de retardatie is,  $v = q/n$  [L/T] de echte snelheid en  $\mu = (\mu_w + \mu_s \rho k/n)/R$  [1/T] een effectieve afbraakconstante is. In de door Veling (1993) ontwikkelde programma's ZEROCD (ZERO Convection-Diffusion) en PROFCD (PROFile Convection-Diffusion) wordt verschil gemaakt tussen twee opvattingen van de concentratie  $c$  (zie Krefit en Zuber (1978)):

$c^r(z, t)$ : de volumegemiddelde concentratie. De opgeloste massa per volume-eenheid van vloeistof in een elementair grondvolume op een locatie  $z$  en een tijd  $t$ .

$c^f(z, t)$ : de fluxgemiddelde concentratie. De opgeloste massa per volume-eenheid van vloeistof dat een gegeven doorsnede passeert op een locatie  $z$  en een tijd  $t$ .

De volgende relatie geldt tussen de twee concentratiebeschrijvingen:

$$c^f(z, t) = c^r(z, t) - \frac{D}{v} \frac{\partial c^r(z, t)}{\partial z}.$$

De fluxgemiddelde concentratie  $c^f$  voldoet aan dezelfde partiële differentiaalvergelijking als  $c^r$ . Om de differentiaalvergelijking op te kunnen lossen dienen wij nog begin- en randvoorwaarden op te geven. Wij maken de keuze dat er op  $t = 0$  geen stof in de grond aanwezig is en dat er aan het maaiveld een continue fluxinjectie plaatsvindt. De bijbehorende voorwaarden luiden dan voor de  $c^f$ -concentratie:

$$c^f(z, 0) = 0, \quad 0 < z < \infty, \quad \& \quad c^f(0, t) = c_0, \quad t \geq 0.$$

De oplossing van deze partiële differentiaalvergelijking luidt (zie Van Genuchten (1981) en Veling (1993, formule  $c_{221}^f(z, t)$ , p. 25):

$$c^f(z, t) = c_0 \left[ \frac{1}{2} \exp\left(\frac{(v-u)z}{2D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{(Rz-ut)}{\sqrt{4DRt}}\right) + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{(v+u)z}{2D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{(Rz+ut)}{\sqrt{4DRt}}\right) \right],$$

$$\text{met } u = v\sqrt{1 + 4\mu DR/v^2} \quad [\text{L/T}].$$

Het uiteindelijke doel van de programma's is het bepalen van de hoeveelheid stof (dat kan dus een vervuiling maar ook een tracer zijn) die aanwezig is in een bepaald grondvolume. De volgende integralen zijn dan van belang:

$$M^r(z, t) = nSR \int_z^\infty c^r(z', t) dz',$$

$$M^f(z, t) = Q \int_0^t c^f(z, t') dt'.$$

De parameter  $S$  [ $L^2$ ] is het oppervlak van het gebied, en  $Q$  [ $L^3/T$ ] de volumetrische stroomsnelheid ( $Q = qS$ ). De eerste integraal representeert de hoeveelheid stof aanwezig in het gebied onder een niveau  $z$ . De tweede integraal representeert de hoeveelheid stof die een niveau  $z$  gepasseerd is gedurende de periode  $(0, t)$ . Als er geen afbraak is, zijn  $M^r$  en  $M^f$  aan elkaar gelijk. Deze integralen kunnen analytisch worden bepaald afhankelijk van de opgegeven randvoorwaarde. ZEROCD en PROFCD zijn geschikt voor situaties waarbij de beginconcentratie 0 is en waarbij de randvoorwaarde een kortstondige injectie ( $c^f$ ) of blootstelling ( $c^r$ ) is, een continue injectie/blootstelling of een blokvormige injectie/blootstelling in de tijd. Voor het geval hierboven geldt (zie Veling (1993, formule  $M_{221}^f(z, t)$ , p. 32)):

$$M^f(z, t) = c_0 \frac{QDR}{v^2} \left[ \frac{1}{2} \left\{ \frac{vz}{D} \frac{v}{u} + \frac{v^2 t}{RD} \right\} \exp\left(\frac{(v+u)z}{2D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{(Rz+ut)}{\sqrt{4DRt}}\right) - \frac{1}{2} \left\{ \frac{vz}{D} \frac{v}{u} - \frac{v^2 t}{RD} \right\} \exp\left(\frac{(v-u)z}{2D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{(Rz-ut)}{\sqrt{4DRt}}\right) \right],$$

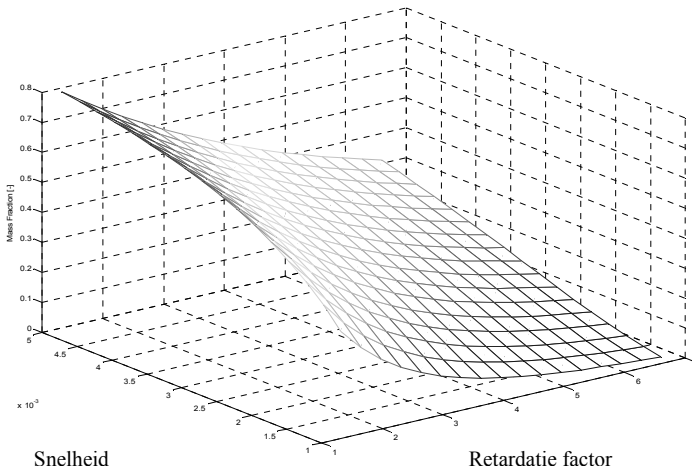
$$\text{met } u = v\sqrt{1 + 4\mu DR/v^2} \quad [L/T].$$

Merk op dat  $M^f(0, t) = c_0 Qt$ , zoals ook uit de randvoorwaarde volgt. Indien men weet hoeveel stof er aan het maaiveld is geïnjecteerd (bijvoorbeeld door een tracerexperiment, of door regenval of door een vuilstort), dan kan men door middel van het programma ZEROCD met behulp van de analytische expressies voor  $M^r$  en  $M^f$  bepalen op welke tijd een gegeven fractie  $\beta = M^f(z, t)/M^f(0, t) = M^f(z, t)/c_0 Qt$  van de tot dan toe geïnjecteerde stof onder een gegeven niveau  $z$  nog aanwezig is. Het programma PROFCD berekent profielen van de gepasseerde fractie als functie van de tijd op een gegeven diepte en als functie van de diepte op een gegeven tijd. De uitvoer is zodanig dat de resultaten grafisch weergegeven kunnen worden. Beide programma's zijn alleen van toepassing op een ééndimensionale situatie. Er wordt vanuit gegaan dat er alleen transport in verticale richting plaats vindt. De korte rekentijd en de gemakkelijke grafische weergave van de resultaten maken de programma's ondanks hun beperkingen geschikt voor het maken van een eerste inschatting van de gevolgen van een mogelijke vervuilingssituatie. Daarnaast zijn de programma's geschikt voor het verifiëren van numerieke berekeningen met andere modellen.

## Parameteranalyse

Het programma PROFCD (dat hier beschouwd wordt) rekent met 6 parameters:  $v = q/n$  (effectieve snelheid),  $R$  (retardatiecoëfficiënt),  $D$  (dispersiecoëfficiënt),  $\mu$  (afbraakconstante),  $z$  (diepte waarop massafactie bepaald wordt) en  $t_1$  (meetijd). Om de effecten van een verandering in de parameters te kunnen bepalen kunnen verschillende analyses worden uitgevoerd. Te denken valt aan bijvoorbeeld een analyse volgens de Monte-Carlo methode. Het is echter zeer bewerkelijk om van de invoerparameters de verdeling te bepa-

len. Er is daarom gekozen om, voor een eerste analyse, de parameters procentueel te verhogen en te kijken wat dit voor een effect heeft op de uitkomst van het programma. Dit is gedaan met behulp van een Matlab-analyse waarvan een van de resultaten in figuur 1 is weergegeven.



**Figuur 1:** Vergelijking snelheid en retardatiefactor, op de opstaande as is de gepasseerde massafractie  $\beta$  weergegeven. Het is duidelijk te zien dat de effecten van parameter variaties voor beide parameters niet lineair zijn.

In het veld kan deze analyse goed gebruikt worden. In een situatie waarin alle parameters bekend maar onzeker zijn kunnen grafieken als de bovenstaande gemaakt en geraadpleegd worden om te bekijken hoe gevoelig het systeem voor die onzekerheid is.

### Gevoeligheidsanalyse van het model

In de praktijk zal men weinig gedetailleerde kennis hebben van de parameters in het gebruikte model. Het ligt dan voor de hand voor elk van de parameters een passende verdelingsfunctie te kiezen. Daarom is ervoor gekozen om een nieuw MATLAB-programma (ParamSensCD) te maken dat op grond van een gekozen verdelingsfunctie voor elk van de parameters de daardoor ontstane verdelingsfunctie van de gepasseerde massafractie kan bepalen.

Zowel in de literatuur als in de praktijk blijkt het erg lastig om de verdeling van de grondparameters te schatten. Er is daarom gekozen om het programma zo interactief mogelijk te maken en de gebruiker de verdelingsfunctie van elke parameter te laten kiezen. De mogelijkheid wordt geboden om een parameter:

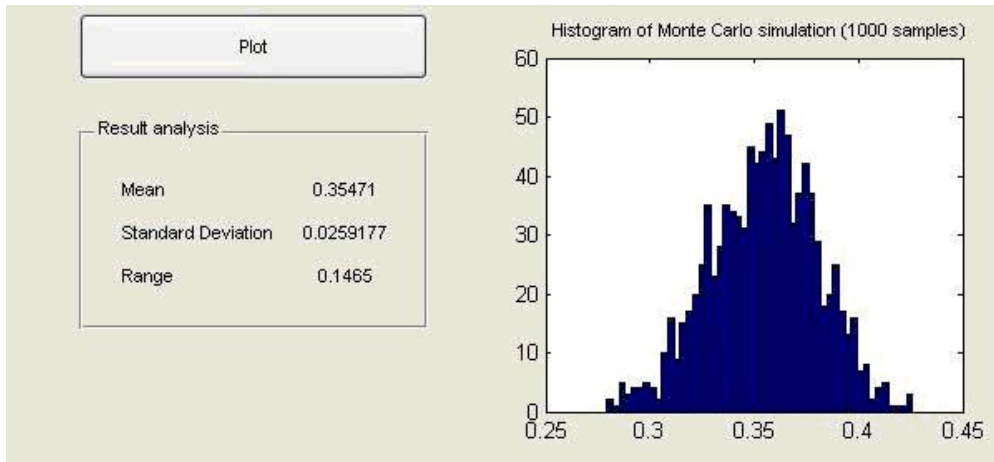
- Constant te houden; de parameter wordt dan als vaste waarde in de berekening meegenomen.
- Normaal te verdelen; er dient naast een verwachtingswaarde ook een standaard deviatie (SD) ingevoerd te worden.
- Exponentieel te verdelen met de invoerwaarde als gemiddelde.

Voor elke parameter kan een andere verdeling gekozen worden, de GUI (Grafische User Interface) van het programma is weergegeven in figuur 2.

Input			
Parameter	Mean	Distribution type	Standard Deviation
Velocity (v) in m/d	<input type="text" value="0.001"/>	<input type="radio"/> const <input checked="" type="radio"/> norm <input type="radio"/> exp	<input type="text" value="0.0001"/>
Retardation factor (R)	<input type="text" value="1.32"/>	<input checked="" type="radio"/> const <input type="radio"/> norm <input type="radio"/> exp	<input type="text" value="0.2"/>
Dispersion coefficient (D) in m <sup>2</sup> /d	<input type="text" value="1e-05"/>	<input checked="" type="radio"/> const <input type="radio"/> norm <input type="radio"/> exp	<input type="text" value="1e-06"/>
Decay rate (Mu) in 1/d	<input type="text" value="0.0144"/>	<input checked="" type="radio"/> const <input type="radio"/> norm <input type="radio"/> exp	<input type="text" value="0.001"/>
Time (t) in d	<input type="text" value="1200"/>	<input checked="" type="radio"/> const <input type="radio"/> norm <input type="radio"/> exp	<input type="text" value="10"/>
Depth (z) in m	<input type="text" value="0.06"/>	<input checked="" type="radio"/> const <input type="radio"/> norm <input type="radio"/> exp	<input type="text" value="0.01"/>
Tau: 90.9091    Zeta: 6    Epsilon: 0.19008    Result (Beta): 0.35652			

**Figuur 2:** Plaatje van een deel van de gebruikersinterface van ParamSensCD met invoerparameters. Onder "Distribution type" kan de gewenste verdeling worden aangegeven. De gepasseerde massafractie (Beta =  $\beta$ ) wordt bij elke parameterwijziging direct opnieuw doorgerekend.

Het programma voert vervolgens een Monte-Carlo-analyse uit. Kort gezegd houdt dit in dat er een aantal keren een willekeurig getal uit de opgegeven verdeling wordt getrokken. Aan de hand van de ingevoerde verdelingen, verwachtingswaarden en eventuele standaarddeviaties trekt het programma 1000 keer elke parameter en rekent de gepasseerde massafractie uit. Deze 1000 waarden worden vervolgens in een histogram geplot zodat de gebruiker kan zien hoe de verdeling van de massafractie er uit ziet. Daarnaast wordt de gemiddelde waarde, de standaarddeviatie en het verschil tussen de maximale en minimale waarden van de resultaten bepaald. Dit is te zien in figuur 3.



**Figuur 3:** Resultaat ParamSensCD na de Monte-Carlo-analyse (1000 trekkingen).

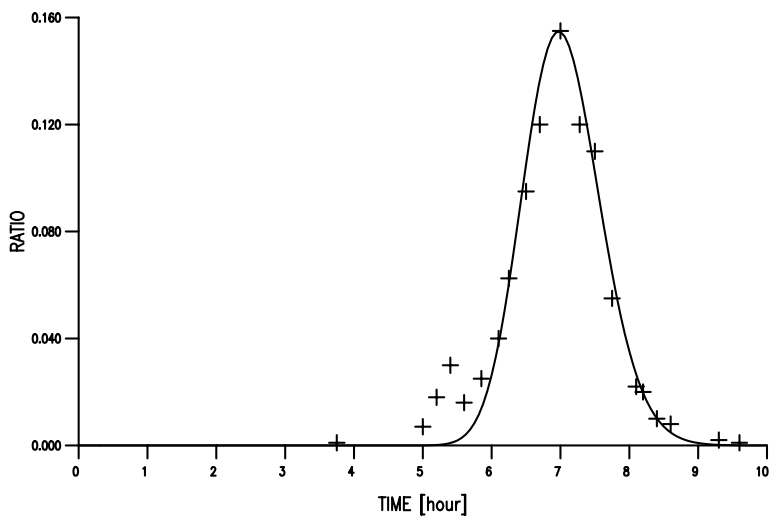
Een van de andere opties van het model is het maken van plots van de effecten van het variëren van dimensieloze parameters. Door over te gaan op dimensieloze parameters wordt het aantal vrijheidsgraden namelijk verlaagd. Voor dit model zijn de dimensieloze grootheden:

$$\zeta = v z / D, \quad \tau = v^2 t / (R D), \quad \varepsilon = \mu R D / v^2.$$

### Praktijkgeval

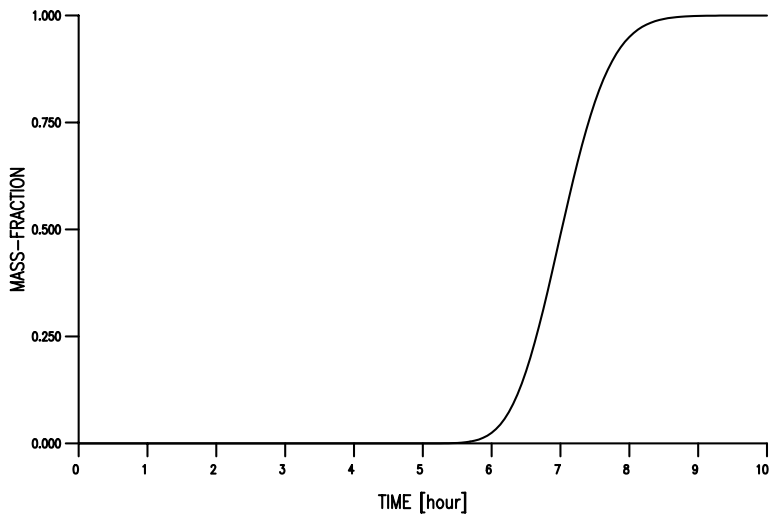
Om de mogelijkheden van deze onzekerheidsanalyse in de praktijk toe te passen maken wij gebruik van een goed gedocumenteerd praktijkgeval van een ééndimensionaal vervuilingstransport in een homogene ondergrond (Pang en Hunt, 2001). Hier werd een niet-reactieve tracer door een homogene grondkolom gevoerd waarbij op verschillende diepten de gepasseerde concentratie tegen de tijd gemeten werd.

De parameters van het experiment zijn als volgt:  $v = 27,7$  m/d,  $\alpha = 0,026$  m,  $R = 1$  (geen adsorptie),  $\mu = 0$  (geen afbraak),  $z = 8$  m en  $t_0$  (duur van de injectie) = 13 minuten, waarbij de  $v$  en de  $\alpha$  zijn gevonden na kalibratie. Zie figuur 4 waar voor deze parameters het profiel is uitgerekend met behulp van het programma PROFCD en waarin de meetwaarden uit de publicatie van Pang en Hunt (2001, figuur 1) zijn opgenomen. In figuur 5 wordt de gepasseerde massafractie als functie van de tijd op een diepte van  $z = 8$  m getoond.



\* TIME-CONC GRAPH \* 25-Oct-06 17:50:51 TYPE = 230 Block pulse injection (t0) in flux at z = 0 No decay  
 Ratio { flux concentration } to { injection (flux) concentration c0 }  
 z=8.0000E+00 [m] v=2.7700E+01 [m/d] D=7.2020E-01 [m\*m/d] R=1.0000E+00 [-] mu=0.0000E+00 [1/d] t0=9.0278E-03 [d]

**Figuur 4:** Resultaat programma PROFCD, concentratieverloop als functie van de tijd op een diepte van 8 m. De meetwaarden uit de publicatie van Pang en Hunt (2001, figuur 1) zijn ingevuld met een +.



\* TIME - MASS-FRACTION \* 25-Oct-06 22:53:48 TYPE = 230 Block pulse injection (t0) in flux at z = 0 No decay  
 Fraction { material passed level z } to { total injected amount }  
 z=8.0000E+00 [m] v=2.7700E+01 [m/d] D=7.2020E-01 [m\*m/d] R=1.0000E+00 [-] mu=0.0000E+00 [1/d] t0=9.0278E-03 [d]

**Figuur 5:** Resultaat programma PROFCD, gepasseerde massafractie als functie van de tijd bij een injectie van 13 minuten = 0.0090278 dag op een diepte van 8 m.

Met het beschreven ParamSensCD-programma is het slechts mogelijk om een continue injectie te simuleren. Wij maken nu gebruik van de parameters hierboven en nemen aan dat er een continue injectie plaatsvindt. Uit het programma ZEROCD blijkt dat na  $t_{1/2} = 0,57762$  dag = 13,86 uur de helft van de tot dan toe geïnjecteerde massa is gepasseerd. Indien wij nu met ParamSensCD een onzekerheidsanalyse uitvoeren dan verkrijgen wij het volgende resultaat voor de spreiding in  $t_{1/2}$  gebaseerd op de onzekerheid in de snelheid want uit de publicatie van Pang en Hunt (2001) blijkt deze niet goed bekend te zijn. De verdeling van deze parameter wordt in dat artikel niet gegeven. Daarom nemen wij aan dat de gekalibreerde waarde ( $v = 27,7$  m/d) de verwachtingswaarde is met een standaard deviatie van 1.5 m/d. Nu volgt:

$$v = 27,7 \text{ m/d, met SD} = 1,5 \text{ m/d}$$

$$D = \alpha v = 0,026 * 27,7 = 0,7202 \text{ m}^2/\text{d, met SD} = 0,039 \text{ m}^2/\text{d}$$

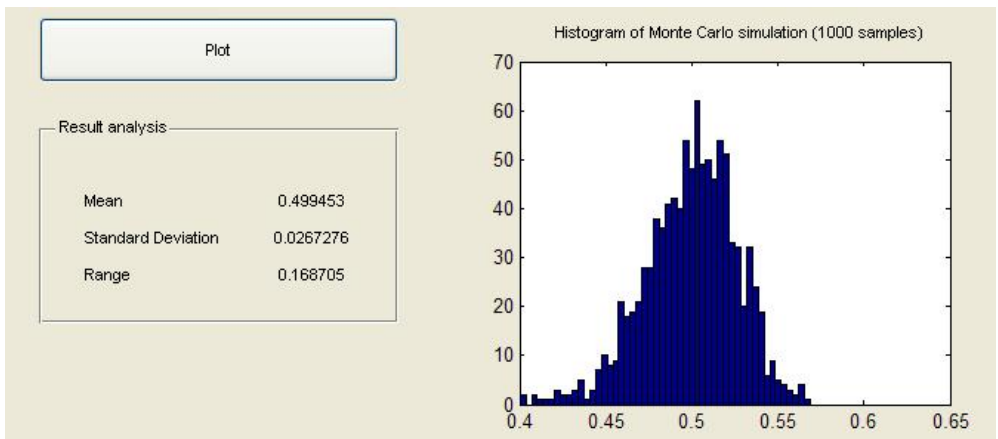
De invoer voor de Monte-Carlo-simulatie ziet eruit als in figuur 6. Voor de opgegeven parameterwaarden berekent het ParamSensCD-programma reeds een  $\beta$  - waarde van 0,499999, zoals ook verwacht mocht worden op grond van de berekening met ZEROCD.

Input			
Parameter	Mean	Distribution type	Standard Deviation
Velocity (v) in m/d	27.7	<input type="radio"/> const <input checked="" type="radio"/> norm <input type="radio"/> exp	1.5
Retardation factor (R)	1.0	<input checked="" type="radio"/> const <input type="radio"/> norm <input type="radio"/> exp	0.0
Dispersion coefficient (D) in m <sup>2</sup> /d	0.7202	<input type="radio"/> const <input checked="" type="radio"/> norm <input type="radio"/> exp	0.039
Decay rate (Mu) in 1/d	0.0	<input checked="" type="radio"/> const <input type="radio"/> norm <input type="radio"/> exp	0.0
Time (t) in d	0.5776166	<input checked="" type="radio"/> const <input type="radio"/> norm <input type="radio"/> exp	0.0
Depth (z) in m	8.0	<input checked="" type="radio"/> const <input type="radio"/> norm <input type="radio"/> exp	0.0
Tau: 615.384		Zeta: 307.692	Epsilon: 0
		Result (Beta): 0.499999	

**Figuur 6:** Invoergegevens voor beschreven praktijkgeval.

Na 1000 verschillende trekkingen voor  $v$  en  $D$  wordt de standaarddeviatie voor  $\beta$  in dit geval 0,0268 bij een gemiddelde gepasseerde massafractie van  $\beta = 0,498341$  (zie figuur 7). Door de niet-lineariteit van de gebruikte formules is het niet zo dat de gesimuleerde massafractie ook weer normaal verdeeld is. Deze resultaten geven de gebruiker meer inzicht hoe betrouwbaar een voorspelling is voor het tijdstip  $t_{1/2}$ .





**Figuur 7:** Resultaat verdeling  $\beta$  beschreven praktijkgeval.

## Conclusies en aanbevelingen

Het ParamSensCD-programma dat is geschreven aan de hand van de formules uit het PROFCD-rapport is een snel en eenvoudige stuk gereedschap om de betrouwbaarheid en bruikbaarheid van laboratorium- en velddata te onderzoeken. Het biedt de mogelijkheid om in de praktijk optredende verdelingen van parameters in te voeren en zo de verdeling van de berekende gepasseerde massafractie grafisch weer te kunnen geven. Daarnaast beschikt het over de mogelijkheid om analyses uit te voeren met dimensieloze parameters. Het biedt ook de mogelijkheid om contourlijnen voor  $\beta$  te tekenen in een  $(\zeta - \tau)$ -,  $(\zeta - \varepsilon)$ - of  $(\varepsilon - \tau)$ -vlak; dat zijn drie dimensieloze grootheden (zie boven). Het programma beperkt zich vooralsnog tot 1 type randvoorwaarde en 2 typen verdelingen.

Het verdient aanbeveling om het programma op enkele punten uit te breiden. De beperking tot een continue injectie en een fluxconcentratie maakt het programma niet altijd toepasbaar. Dit is gemakkelijk te doen met behulp van de formules gegeven in het PROFCD-rapport voor volume gemiddelde concentratie en voor instantane en eindig durende vervuilingssituaties. Daarnaast is het mogelijk om het programma uit te breiden naar meer verdelingstypes om meer mogelijke parametervariëaties op te kunnen vangen.

## Beschikbaarheid

Het programma ParamSensCD bestaat uit een drietal Matlab-7 files die beschikbaar zijn bij de tweede auteur.

## Literatuur

**Genuchten, M.Th. van (1981)** Analytical solutions for chemical transport with simultaneous adsorption, zero-order production and first-order decay; in: *Journal of Hydrology*, jrg 49, pag 213–233.

- Kreft, A. en A. Zuber (1978)** On the physical meaning of the dispersion equation and its solutions for different initial and boundary conditions; in: *Chemical Engineering Science*, jrg 33, pag 1471–1480.
- Pang, Liping en Bruce Hunt (2001)** Solutions and verification of a scale dependent dispersion model; in: *Journal of Contaminant Hydrology*, jrg 53, pag 21–39.
- Pappenberger, F. en K.J. Beven (2006)** Ignorance is bliss: Or seven reasons not to use uncertainty analysis; in: *Water Resources Research*, jrg 42, W05302, doi:10.1029/2005WR004820 (8 pag).
- Veling, E.J.M. (1993)** ZEROCD and PROFCD, Description of Two Programs to Supply Quick Information with respect of the Penetration of Tracers in the Soil; RIVM Report 725206009, Bilthoven. (zie <http://www.hydrology.citg.tudelft.nl/veling/zerocd-profcd-doc-new.pdf>).