Brieven

Commentaar op:
Een nieuw transportmodel voor verontreiniging in het grondwater
door Wipfler, Veling en Maas

Met veel belangstelling heb ik het artikel gelezen van Wipfler e.a. (1996). Het lijkt mij een elegante en betrekkelijk eenvoudige methode om dispersief transport te berekenen uit een bekend stromingsveld. Wat mij met name aanstaat is het gebruik van statistieken van doorlatendheidsmetingen om de parameters van het model te schatten. Dit vergroot de praktische toepasbaarheid van de methode, omdat grootschalige tracerexperimenten nu eenmaal niet in standaard transportstudies kunnen worden gedaan. De auteurs stellen overigens terecht dat de transportparameters die zijn afgeleid uit doorlatendheidsmetingen in een aantal veldstudies met tracerexperimenten moeten worden gevalideerd.

Ik heb echter een aantal opmerkingen over de gevolgde methodiek:

1 De gebruikte dispersiviteitsformule

Bij het modelleren van tweedimensionaal transport wordt een feitelijk 3D-proces teruggebracht naar twee dimensies. Hierbij moeten aannamen worden gedaan over de opbouw van de ondergrond, waaruit dan de 2D-dispersiviteit volgt in termen van de eigenschappen van de ondergrond. De auteurs kiezen hierbij voor het klassieke model van Mercado (1967). Wat ik echter niet begrijp is dat ze om de dispersiviteit aan doorlatendheidskarakteristieken te relateren gebruik maken van vergelijking (3) op pagina 16. Ik kan deze expressie overigens niet terugvinden in de aangehaalde referenties. Voor horizontale stroming in heterogene afzettingen geeft Dagan (1989, blz. 322 en blz. 328) wel de volgende relatie:

$$\alpha_L = \sigma_Y^2 I_Y \qquad \text{(A)}$$

met:
a_L: Longitudinale (macro)dispersiviteit [L]
σ_Y^2: variantie van logdoorlatendheid
I_Y: De horizontale integraalschaal van de logdoorlatendheid (ongeveer 3/8 maal de range van een variogram) [L]

Maar deze relatie gaat uit van een heel ander model van de ondergrond, namelijk dat de doorlatendheid een 3D-stochastisch veld is waarin gemiddeld horizontale stroming plaatsvindt. Vergelijking (A) en dus waarschijnlijk ook vergelijking (3) op blz 16 van hun artikel is niet consistent met het model van Mercado (1967) dat op pagina 19 door de auteurs wordt gebruikt om de frontsnelheid te berekenen. Wanneer de laagjes echt homogeen zijn en de longitudinale dispersie wordt veroorzaakt door snelheidsverschillen tussen de laagjes en wordt aangenomen dat de doorlatendheden van de laagjes lognormaal verdeeld zijn, dan wordt de dispersiviteit voor het Mercado-model bij homogene porositeit gegeven door (Gelhar, 1993, blz 205–207):

$$\alpha_L = (e^{\sigma_y^2} - 1)x \qquad \text{(B)}$$

met:
σ_y^2: variantie van de logdoorlatendheid van de laagjes
x: de verplaatsing vanaf de bron [L]

De dispersiviteit neemt dus lineair toe met de afgelegde weg. De bijbehorende doorbraakcurve heeft overigens een lognormale vorm en dus ook een betrekkelijk stijl front, zodat met dit model tevens één van de bezwaren van het Gaussische model wordt weggenomen.

Als dan toch gekozen wordt voor het Mercado-model en de auteurs willen de transportparameters relateren aan de statistieken van het doorlatendheidsveld dan bestaat er reeds lange tijd een complete stochastische theorie hiervoor, ontwikkeld door Gelhar e.a. (1979): Uit vergelijking (B) volgt dat de dispersiviteit volgens het Mercado-model voor grote afgelegde weg (of na langere tijd) zeer groot wordt, veel groter dan uit veldexperimenten is waargenomen. Dit heeft te maken met de aanname dat de longitudinale dispersie alleen afhankelijk is van verticale snelheidsverschillen en er geen vermenging tussen de lagen plaatsvindt. Wanneer echter wordt aangenomen dat er ten gevolge van transversale mechanische dispersie (op de laboratoriumschaal) wel verticale menging plaatsvindt dan kan er via een stochastische benadering (i.c. de logdoorlatendheden van de laagjes vormen een realisatie van een eendimensionaal normaal verdeeld stochastisch veld) de volgende transportvergelijking voor de verwachte concentratie C(x,t) worden afgeleid:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v\frac{\partial C}{\partial x} = \alpha_L(x)v\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \beta(x)\frac{\partial^3 C}{\partial t\,\partial x^2} - \beta(x)v\frac{\partial^3 C}{\partial x^3} \qquad \text{(C)}$$

Hierbij is $\alpha_L(x)$ de longitudinale (macro)dispersiviteit die afhankelijk is van de afgelegde afstand x en $\beta(x)$ een extra dispersie-achtige term die eveneens afhangt van de afgelegde afstand. In Gelhar e.a. (1979) worden analytische vergelijkingen gegeven voor de functies $\alpha_L(x)$ en $\beta(x)$. Deze functies zijn behalve van de afgelegde weg ook afhankelijk van:

σ_y^2: variantie van de logdoorlatendheid van de laagjes

a_T: transversale dispersiviteit op laboratoriumschaal (orde grootte 1 mm–1 cm) [L]

I_Y: de verticale integraalschaal van de logdoorlatendheid van de laagjes [L]

Net als het model dat wordt voorgesteld door Wipfler e.a. heeft dit model dus ook één extra vrijheidsgraad: de transversale dispersiviteit op laboratoriumschaal.

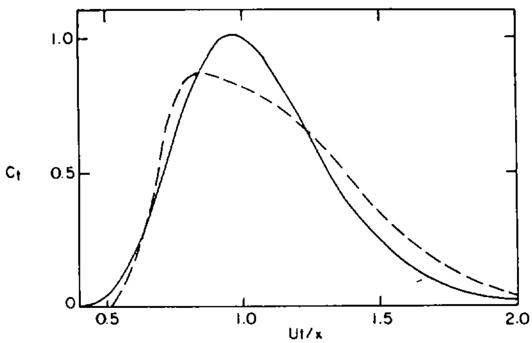
Voor grote verplaatsingsafstanden nadert $\alpha_L(x)$ een constante waarde gelijk aan:

$$\alpha_L(\infty) = \frac{10}{3}(e^{\sigma_Y^2} - 1)\frac{I_y^2}{a_T} \qquad \text{(D)}$$

Voor korte verplaatsingsafstanden is $\alpha_L(x)$ gelijk aan vergelijking (B). De extra termen met $\beta(x)$ verdwijnen pas bij zeer grote verplaatsingsafstanden ($x > 100\alpha_L(\infty)$) en blijven dus een zeer lange tijd voor een niet-klassieke dispersie zorgen. Figuur A komt uit het artikel van Gelhar e.a. (1979) en toont voor $x = 12\alpha_L(\infty)$ de concentratie-doorbraakcurven van het klassieke convectie-dispersie model en voor het transport volgens vergelijking (C). Te zien is dat het uitgebreide model een steiler front geeft en een langere staart. Dit is wat ook vaak wordt waargenomen in tracerexperimenten.

Net als in het model van Wipfler e.a. kunnen de transportparameters ook worden gerelateerd aan het variogram en het histogram van de doorlatendheden. Hiervoor moeten natuurlijk eerst de gemeten logdoorlatendheden aan ongestoorde monsters worden gegroepeerd naar diepteklassen of structurele geologische lagen. Voor elke diepteklasse/laag moet dan de gemiddelde logdoorlatendheid worden berekend. Met deze laaggemiddelde logdoorlatendheden kunnen dan σ_y^2 en I_Y (uit het variogram) worden bepaald.

De oplossingen van (C) zijn over het algemeen nogal complex. Echter van de momenten van de impulsresponsie (de concentratieverdeling op een zekere afstand van de bron ten gevolge van een instantane input van de stof) zijn analytische oplossingen bekend. Wellicht is het mogelijk om, net als



Figuur A: Concentratie-doorbraakcurven volgens de klassieke theorie (doorgetrokken lijn) en volgens vergelijking (C).

met de oplossing van Strack (1992), deze momenten te koppelen aan de momenten van een eenvoudige benaderende functie en zo een eenvoudige doorbraakcurve te berekenen waarvan de parameters gekoppeld zijn aan de afgelegde weg, de transversale dispersie (uit laboratoriumproeven) en het histogram en het variogram van de doorlatendheden. Als het dus mogelijk is de impulsresponsie te benaderen door een eenvoudige functie, dan is het model van Gelhar e.a. (1979) net zo eenvoudig als dat van Wipfler e.a. (1996).

Het is niet gezegd dat het model van Gelhar e.a. (1979) zich beter verhoudt tot de werkelijkheid. Dit zou getest moeten worden. Echter, het model is wel intern consistenter omdat het gemodelleerde dispersief transport overeenkomt met het gebruikte model van de ondergrond. Bovendien is de extra parameter (de transversale dispersie op laboratoriumschaal) gemakkelijker te bepalen of te relateren aan sedimenttypen dan het verhoudingsgetal ρ in het model van Wipfler e.a. (1996).

3 *Het gebruik van de doorlatendheidsmetingen*

Bij de volgende discussie ga ik er van uit dat het model van Wipfler e.a. (1996) ongewijzigd wordt toegepast en dat de gemiddelde snelheid en de factor ρ uit het histogram van de doorlatendheidsmetingen moet worden bepaald. Ik vermoed dat men bij het berekenen van de doorlatendheid die hoort bij de gemiddelde snelheid (de zogenaamde effectieve horizontale doorlatendheid) of het geometrisch gemiddelde van de doorlatendheden (zie figuur 6 op blz 23) heeft genomen of het rekenkundig gemiddelde heeft genomen. Beide berekeningswijzen zijn echter niet correct. Het geometrisch gemiddelde geeft de effectieve doorlatendheid voor een twee-dimensionaal heterogeen medium, en dus niet voor een medium dat gelaagd is. Het rekenkundig gemiddelde van de doorlatendheden uit Figuur 6 van Wipfler e.a. (1996) geeft alleen de effectieve horizontale doorlatendheid als elke meting uit een ander laagje komt. Dit is echter niet het geval zoals blijkt uit Jensen e.a. (1993). Op één en dezelfde diepte zijn meerdere doorlatendheidsmetingen gedaan. Deze zijn natuurlijk niet allemaal gelijk. Het model van Mercado (1967) gaat dus nooit precies op: er is binnen een laagje een zekere horizontale heterogeniteit. We kunnen de ondergrond echter wel reduceren tot een Mercado-model door voor elk laagje uit de doorlatendheidsmetingen uit dat laagje het geometrisch gemiddelde te berekenen, ervan uitgaande dat de stroming horizontaal is. De k_i-waarden uit figuur 3 van Wipfler e.a. (1996) zijn dan de effectieve doorlatendheden van de laagjes (de geometrische gemiddelden). Om de effectieve horizontale doorlatendheid van het gehele pakket te berekenen moeten we dan vervolgens het rekenkundig gemiddelde van de effectieve laagdoorlatendheden nemen. Overigens geldt ook hier weer dat de onderverdeling van de gemeten doorlatendheden naar laagjes zowel op z-coördinaat kan gebeuren als op basis van geologisch onderscheidden structurele lagen. In formulevorm vinden we:

$$k_i^{eff} = \exp\left(\frac{1}{m_i}\sum_{j=1}^{m_i}\ln(k_{ij})\right) \tag{E}$$

$$k_h^{eff} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} k_i^{eff} \tag{F}$$

met:

m_i: aantal doorlatendheidsmetingen in laagje i

n: aantal laagjes

k_{ij}: doorlatendheidsmeting j in laagje i [L/T]

k_i^{eff}: effectieve (horizontale) doorlatendheid van laagje i

k_h^{eff}: effectieve horizontale doorlatendheid van het hele pakket

We kunnen nu ook de variantie σ_y^2 bepalen (o.a. om de dispersiviteit te berekenen):

$$\sigma_y^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\ln(k_i^{eff}) - \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\ln(k_i^{eff})\right)^2 \tag{G}$$

Als bij de berekening van de dispersiviteit ook nog de verticale integraalschaal nodig is dan moet uit de k_i^{eff} ook nog een variogram berekend worden.

Het verhoudingsgetal ρ volgt tenslotte uit de ratio van de maximale effectieve laagdoorlatendheid en de effectieve doorlatendheid van het pakket:

$$\rho = \frac{MAX(k_i^{eff})}{k_h^{eff}} \tag{H}$$

Literatuur

Dagan, G. (1989) Flow and transport in porous formations, Springer Verlag, Berlijn.

Gelhar, L.W. (1993) Stochastic subsurface hydrology, Prentice-Hall, New-Jersey.

Gelhar, L.W., A.L. Gutjahr en R.L. Naff (1979) Stochastic analysis of macrodispersion in a stratified aquifer; in: *Water Resources Research*, jrg 15, nr 6, pag 1387–1397.

Jensen, K.H., K. Bitsch en P.L. Bjerg (1993) Large-scale dispersion experiments in a sandy aquifer in Denmark: Observed tracer movements and numerical analyses; in: *Water Resources Research*, jrg 29, nr 3, pag 637–696.

Mercado, A. (1967) The spreading pattern of injected water in a permeability stratified aquifer; in: *Proceedings of the IASH symposium Haifa*, publ 72.

Strack, O.D.L. (1992) A mathematical model for dispersion with a moving front in groundwater; in: *Water Resources Research*, jrg 28, nr 11, pag 2973–2980.

Wipfler, E.L., E.J.M. Veling en C. Maas (1996) Een nieuw transportmodel voor verontreiniging in het grondwater; in: *Stromingen*, jrg 2, nr 1, pag 13–25.

Met vriendelijke groet,

Marc Bierkens
DLO-Staring Centrum
Postbus 125
6700 AC Wageningen
Tel: (0317) 474241
Fax: (0317) 424812
E-mail: bierkens@sc.dlo.nl

Reactie van de auteurs:

Uit het commentaar van Marc Bierkens (en uit enkele mondelinge reacties) blijkt dat ons artikel serieus gelezen wordt, en dat stellen we zeer prijs. Een gedeelte van Marcs reactie is op te vatten als aanmerking op onze beweringen; een ander deel bestaat uit suggesties voor een alternatieve aanpak, of voor verder onderzoek. Zulke suggesties geven ons weer aanleiding tot commentaar. In het onderstaande lopen verweer en commentaar enigszins door elkaar heen. We houden de nummering van Marcs reactie aan.

1 De gebruikte dispersiviteitsformule

De dispersievergelijking van Strack, die onderwerp is van ons artikel, voorspelt dat het front van een verontreiniging zich met een eindige snelheid verplaatst, en dat die snelheid evenredig is met de gemiddelde stroomsnelheid van het grondwater. Strack geeft daarvoor geen fysische verklaring, maar het is wel fysisch aannemelijk. Om dit aanschouwelijk te maken, doen we een beroep op het laagjesmodel van Mercado, dat inderdaad een eindige verplaatsingssnelheid van het front oplevert, evenredig aan de gemiddelde stroomsnelheid. Veel meer doen we er niet mee, want Mercado houdt geen rekening met uitwisseling van materie tussen de laagjes onderling, en dat blijkt in de praktijk weinig realistisch te zijn. Transversale uitwisseling van deeltjes heeft echter geen invloed op de verplaatsingssnelheid van het front van een verontreining (we komen daar straks nog op terug) en daarom vinden we dat Mercado's model voor ons illustratieve doel wel bruikbaar is.

Om de dispersiviteit te relateren aan de doorlatendheidskarakteristieken hebben we gebruik gemaakt van het boek van Dagan uit 1989. Daarin staat onze vergelijking 3 weliswaar niet letterlijk, maar hij is er uit te distilleren door Dagans vergelijking 4.7.1 te combineren met een opmerking in de tekst op pagina 330 (r 19–22). (De betreffende paragraaf slaat wel degelijk op een medium dat uit laagjes is opgebouwd). De uitdrukking voor de dispersiviteit, die wij gebruiken, heeft betrekking op de limiettoestand waarin de dispersiviteit een constante waarde aanneemt. Op dit punt moeten we opmerken dat we uit persoonlijke contacten met Strack weten dat zijn vergelijking nadrukkelijk niet voor een gelaagd medium bedoeld is. In dit opzicht zijn we dus niet consequent geweest, toen we ervoor kozen om met vergelijking 3 verder te werken.

2 Het model als geheel

In deze passage stelt Marc voor om het laagjesmodel met transversale uitwisseling als alternatief voor de vergelijking van Strack te beschouwen, omdat het intern consistenter is. We moeten aannemen dat intern consistent in dit geval betekent dat er—in tegenstelling tot Strack—een fysische voorstelling aan het model ten grondslag ligt. (Wiskundig gezien is er immers met Stracks model niets mis). Het laagjesmodel bevat net als Stracks model een extra vrijheidsgraad, waardoor de doorbraakkromme schever kan worden dan volgens de gewone convectie–dispersievergelijking. (Dit effect wordt door Marc met een figuur mooi geïllustreerd). Een verschil met Strack is dat in het laagjesmodel de extra parameter geen invloed heeft op de verplaatsingssnelheid van het front. Dit is direct te zien aan vergelijking C. Immers: het front moet op een karakteristiek van de differentiaalvergelijking liggen. Vergelijking (C) heeft dezelfde karakteristieken als de vergelijking

$$\frac{\partial^3 C}{\partial t\,\partial x^2} + v\,\frac{\partial^3 C}{\partial x^3} = 0$$

waarin de nieuwe parameter β niet voorkomt. Fysisch gezien is dit ook wel begrijpelijk: in het laagjesmodel zijn de snelste deeltjes de deeltjes die in het snelste laagje stromen zonder het ooit te verlaten. Op de snelheid van deze deeltjes heeft het toevoegen van transversale uitwisseling geen effect. In Stracks model heeft de extra parameter wel invloed op de voortplantingssnelheid van het front, en dat is waar het Strack in de eerste plaats om ging.

Volgens vergelijking D is de longitudinale (macro)dispersiviteit omgekeerd evenredig met de transversale (micro)dispersiviteit. Dit is typisch een eigenschap van een perfect gelaagd medium. In een random samengesteld medium heeft de transversale (micro)dispersiviteit maar heel weinig invloed op de longitudinale (macro)dispersiviteit. De toepassing van vergelijking (C) is dus beperkt tot perfect gelaagde media.

Om deze redenen ziet het er niet naar uit dat vergelijking (C) als een alternatief kan dienen voor Stracks vergelijking, maar wellicht vullen de twee elkaar aan.

Als de parameters α en β in vergelijking (C) alleen functies zijn van x, en niet van t, dan is het inderdaad betrekkelijke eenvoudig om goede benaderende oplossingen van vergelijking (C) aan te geven, volgens de methode die wij in ons artikel voor de vergelijking van Strack gebruiken. Voor wat de praktisch toepassing betreft hoeft het laagjesmodel dus niet lastiger te zijn dan het model van Strack.

3 *Het gebruik van de doorlatendheidsmetingen*

We hebben het geometrische gemiddelde genomen, en we zijn het met Marc Bierkens eens dat daar kanttekingen bij te plaatsen zijn. Zoals Marc aangeeft geldt het geometrisch gemiddelde voor een 2-D heterogeen medium. Weliswaar sluit dit aan bij de gedachtengang van Strack, maar we hebben in een eerder stadium al keuzen gedaan die beter bij een gelaagd medium passen, dus dat is niet consequent. Bij een vervolgonderzoek is het zeker de moeite waard om verder in te gaan op Marcs voorstel voor het berekenen van de effectieve doorlatendheid. Vooral de mogelijkheid om op die manier het verhoudingsgetal ρ te kunnen berekenen is erg aantrekkelijk. (Een praktische beperking is wel dat er erg veel metingen nodig zijn).

Errata

We maken graag van de gelegenheid gebruik om twee errata door te geven. In vergelijking 9 van ons artikel staat de uitdrukking

$$a = \frac{v_g - t_f}{2\alpha}$$

Dit moet zijn:

$$a = \frac{v_g - \dfrac{v_g^2}{v_f}}{2\alpha}$$

In vergelijking 10 staat de uitdrukking

$$b(\rho, v_g, x) = \frac{1}{\tau}\frac{x}{v_g}$$

Dat moet zijn:

$$b(\rho, v_g, x) = \frac{1}{\rho}\frac{x}{v_g}$$

Louise Wipfler
Ed Veling
Kees Maas