

ICW nota 1736

October 1986



nota

instituut voor cultuurtechniek en waterhuishouding, wageningen

ONDERZOEK NAAR DE EFFECTEN VAN WATERAANVOER EN
PEILVERANDERINGEN IN AGRARISCHE GEBIEDEN OP DE
WATERKWALITEIT IN NATUURGEBIEDEN

Deel 2: Modellerings van twee-dimensionaal
transport van een conservatieve stof in de
verzadigde zone

Ir. P. Groenendijk

Nota's van het Instituut zijn in principe interne communicatie-
middelen, dus geen officiële publikaties.

Hun inhoud varieert sterk en kan zowel betrekking hebben op een
eenvoudige weergave van cijferreeksen, als op een concluderende
discussie van onderzoeksresultaten. In de meeste gevallen zullen
de conclusies echter van voorlopige aard zijn omdat het onderzoek
nog niet is afgesloten.

Bepaalde nota's komen niet voor verspreiding buiten het Instituut
in aanmerking

I N H O U D

	Blz.
1. INLEIDING	1
2. MODELLERING TWEE-DIMENSIONAAL TRANSPORT VAN EEN CONSERVATIEVE STOF BIJ STATIONAIRE WATERSTROMING	2
2.1. Enkelvoudig hydrologisch systeem	2
2.2. Meervoudig hydrologisch systeem	10
3. MODELLERING TWEE-DIMENSIONAAL STOFTRANSPORT MET SEIZOENS AFHANKELIJKE STROMING	13
4. MODELLERING TWEE-DIMENSIONAAL STOFTRANSPORT ONDER INVLOED VAN REGIONALE STROMING	15
5. BEPALING VAN DE VERTIKALE LAAGDIKTE	29
6. NUMERIEKE MODELLERING VAN TWEE-DIMENSIONAAL STOFTRANSPORT IN DE VERZADIGDE ZONE	20
6.1. Discretisatie van de twee-dimensionale differentiaalvergelijking	20
6.2. Pseudo twee-dimensionale oplossing	26
LITERATUUR	30
APPENDICES	

INLEIDING

Een van de doelstellingen van het onderzoeksproject dat door het ICW wordt uitgevoerd in het kader van de Studiecommissie Waterbeheer Natuur Bos en Landschap is het ontwikkelen van methodieken om de effecten van wateraanvoer en peilveranderingen in agrarische gebieden op de grondwater kwaliteit in natuurgebieden te kunnen voorspellen en evalueren.

Het stoftransport in de verzadigde zone is een van de belangrijke onderdelen in de modellen die in het kader van deze studie ontwikkeld worden.

In principe staan reeds meerdere modellen ter beschikking. Zij beantwoorden echter niet aan de doelstelling van het ontwikkelen van eenvoudige richting gevende modellen die gemakkelijk hanteerbaar zijn.

De modellen die worden ontwikkeld voor het verzadigde stoftransport hebben bijna alle een numerieke rekenwijze. Door de discretisatie naar plaats en tijd wordt een numerieke dispersie geïntroduceerd. De afmeting van de lagen en compartimenten is voor deze stromingsmodellen veelal een onbekende grootte. In deze nota wordt een methode besproken om de laagdikte te schatten aan de hand van een concentratie diepte-profiel.

Het model TRADE (ROEST en RIJTEMA, 1983) dat het twee-dimensionale stoftransport in een bodemprofiel beschrijft zou voor de simulatie van twee-dimensionaal stoftransport kunnen worden gebruikt.

Een nadeel van dit model is dat het uitgaat van een te sterke schematisering van het stroombanenverloop.

De afwijkingen van de met TRADE berekende resultaten kunnen 20-30% van de met de analytische oplossing berekende resultaten bedragen. Via een andere schematisatie zijn resultaten te verkrijgen waarvan de gemiddelde waarden overeenkomen met de analytische oplossing en waarbij het dispersie effect in beschouwing genomen wordt.

In deze nota wordt tevens een eenvoudig model besproken dat eveneens uitgaat van de analogie met een volledig gemengd reservoir en waarbij het mogelijk is een variatie in tijd en plaats aan te brengen.

Dit laatste is van belang bij de evaluatie van het instellen van beschermingzones rondom natuurterreinen en waterwingebieden. Eveneens kan variatie worden aangebracht in de voeding van het freatisch watervoerend pakket, zodat effecten van wateraanvoer globaal bestudeerd kunnen worden.

Tevens wordt de modellering van het stoftransport in een gecompliceerd hydrologisch systeem besproken. De reservoir benadering komt overeen met de aanpak van het stoftransport in het model ANIMO dat bij het ICW in ontwikkeling is.

In hoofdstuk 6 wordt aandacht besteed aan de numerieke modellering van twee-dimensionaal stoftransport, alsmede aan de pseudo twee-dimensionale toepassing van het mixing-cell concept (VAN OMMEN, 1985).

2. MODELLERING TWEE-DIMENSIONAAL TRANSPORT VAN EEN CONSERVATIEVE STOF BIJ STATIONAIRE WATERSTROMING

Een enkelvoudig hydrologisch systeem wordt voor het doel van deze studie gedefinieerd als een systeem waarvan het water van een intrekgebied naar een bepaald ontwateringsmiddel stroomt. In een meervoudig hydrologisch systeem kan water vanuit een intrekgebied naar meerdere ontwateringsmiddelen stromen.

2.1. Enkelvoudig hydrologisch systeem

Bij de modellering van het twee-dimensionale stoftransport wordt uitgegaan van een dik aquifer waarin een stationaire stroming plaats vindt naar parallelle volkomen drains (VAN DER MOLEN, 1975). Midden tussen de drains, op de waterscheiding, wordt $x=0$ gesteld.

x:	afstand vanaf de waterscheiding	(L)
y:	hoogte boven de basis van de watervoerende laag	(L)
L:	afstand tussen de kanalen	(L)
H:	dikte van het watervoerende pakket	(L)

ϵ : volume fraktie van water -
 R : voeding van het pakket door netto
 neerslag-overschot (L/T)
 T_x : verblijftijd tussen punt x en kanaal (T)
 q_x : stroming op afstand x van de waterscheiding
 per strekkende meter (L**2/T)

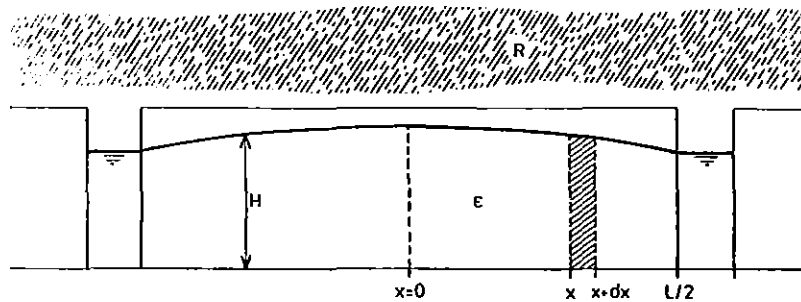


Fig. 1. Schematische weergave van de stroming naar parallelle drains

De stroming bij een punt x bedraagt: $q_x = R \cdot x$. Tussen de punten x en $x+dx$ kan worden gesteld dat per strekkende meter het volume $\epsilon \cdot H \cdot dx$ bedraagt en de flux q_x .

De verblijftijd van dit compartiment is af te leiden uit:

$$dT = \frac{\epsilon \cdot H \cdot dx}{q_x} = \frac{\epsilon \cdot H}{x} \frac{dx}{x} \quad (1)$$

De verblijftijd tussen de punten x_1 en x_2 ($x_1 < x_2$) is:

$$T = \frac{\epsilon \cdot H}{R} \ln \frac{x_2}{x_1} \quad (2)$$

De verblijftijd T_x van een druppel water op punt x tot de drain is gelijk aan:

$$T_x = \frac{\epsilon \cdot H}{R} \ln \frac{L}{2x} \quad (3)$$

De gemiddelde concentratie C kan worden berekend uit de verhouding tussen het doorgespoelde en het nog niet met de input concentratie doorgespoelde water:

$$\bar{C} = \frac{C_{init} \cdot R \cdot x + C_{feed} \cdot R \cdot (L/2 - x)}{R \cdot L/2} \quad (4)$$

met: $\bar{C}$ = gemiddelde concentratie bij de drain
 C_{init} = initiële concentratie in het profiel
 C_{feed} = concentratie van de voedingsoplossing

Met behulp van vgl. (3) volgt nu:

$$\bar{C} = C_{feed} + (C_{init} - C_{feed}) \exp\left(-\frac{Rt}{\epsilon H}\right) \quad (5)$$

VAN OMMEN (1985) toonde aan dat deze formule ook geldt voor de stroming naar een volkomen put in freatisch water.

In het beschouwde profiel worden de stroombanen beschreven door hyperbolen, gegeven door de volgende stroomfunctie (ERNST, 1973):

$$\Psi = -\frac{R}{H} \cdot x \cdot y \quad (6)$$

met Ψ = waarde van de stroomfunctie

x = afstand tot de waterscheiding

y = hoogte boven de basis van het watervoerende pakket

De hoogte y waarop een deeltje zich bevindt na een bepaalde reistijd, nadat het op $t=0$ bij $y=H$ geïnfilteerd is, wordt gegeven door:

$$y = H \cdot \exp\left(-\frac{Rt}{\epsilon H}\right) \quad (7)$$

In fig. 2 zijn de isochronen gegeven voor een profiel met stationaire 'Dupuit-stroming', met $H=10$ m, $R=0,3$ m/jaar en $\epsilon=0,3$.

De belasting aan de bovenzijde van het profiel is homogeen.

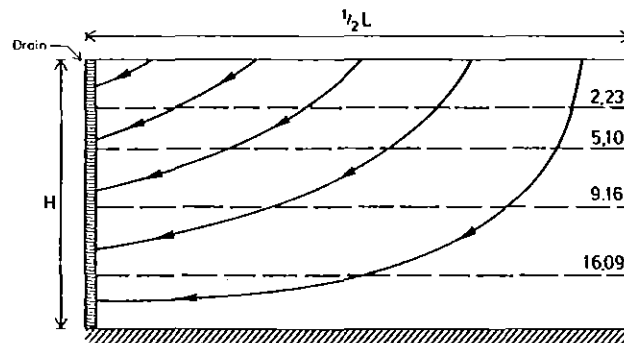


Fig. 2. Stroomlijnen en isochronen in een twee-dimensionaal profiel met volkomen drains

Vanuit het stroomlijnenpatroon is af te leiden dat de uitstroming bij $x = L/2$ homogeen is.

De isochronen lopen horizontaal. In deze twee-dimensionale doorsnede beweegt het front zich gelijkmatig naar beneden en zijn de concentratiediepte profielen aan elkaar gelijk en onafhankelijk van de plaats waar een dergelijk profiel bepaald wordt.

In de bovenstaande beschouwing wordt uitgegaan van drains die even diep zijn als de dikte van het freatische pakket. In werkelijkheid zal de diepte van de ontwateringsmiddelen meestal kleiner zijn dan de dikte van het pakket.

ERNST (1973) geeft een formulering voor de verblijftijd in een profiel waarin de ontwatering via oppervlakkige drains plaats vindt (fig.3). De draindiepte is ten opzichte van de dikte van het freatisch pakket te verwaarlozen.

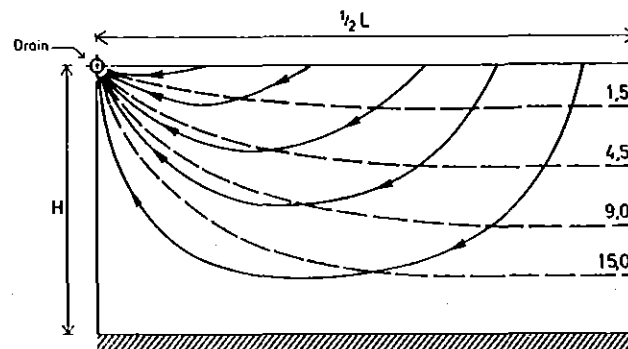


Fig.3. Stroomlijnen en isochronen in een twee-dimensionaal profiel met oppervlakkige drains

Er worden twee zones onderscheiden:

- een zone nabij de drain waarin voornamelijk radiale stroming plaats vindt. Deze zone strekt zich aan beide zijden van de drain even ver uit als het pakket diep is;
- een zone tussen de waterscheiding en de bovengenoemde zone waarin de stroming vergelijkbaar is met de stroming naar een volkomen drain.

In formule vorm:

$$T_x = \frac{\pi \cdot cL}{8R} \left(1 - \frac{2x}{L}\right)^2 \quad \text{voor} \quad \frac{L}{2} - H \leq x \leq \frac{L}{2} \quad (8a)$$

$$T_x = \frac{cH}{R} \left(\ln \frac{L-2H}{2x} + \frac{\pi H}{2L} \right) \quad \text{voor} \quad 0 < x < \frac{L}{2} - H \quad (8b)$$

Voor vrij grote waarden van $2H/L$ (b.v. tussen 0,1 en 0,5) geeft ERNST, (1973) een relatie die nauwkeuriger uitkomsten oplevert:

$$T_x = \frac{\epsilon H}{R} \left[\ln \frac{L-2H}{2x} + \frac{H}{L} \left(2 + \frac{2}{\pi} (-\ln 2 - \ln(\sin \frac{2\pi x}{L})) + \operatorname{arsinh}(\cotg \frac{2\pi x}{L}) \right) \right] \quad (8c)$$

Na omwerking van deze formules, analoog aan de afleiding van vgl. (4), kan de volgende relatie tussen de tijd en de gemiddelde concentratie in de drain worden opgesteld, uitgaande van vgl. (8a) en (8b):

$$\bar{C} = C_{\text{feed}} + (C_{\text{init}} - C_{\text{feed}}) * A \quad (9)$$

$$\text{met } A = 1 - 2 \sqrt{\frac{2Rt}{\pi \epsilon L}} \quad ; \text{ voor } t \leq \frac{\pi \epsilon H^2}{2RL} \quad (9a)$$

$$A = \left(1 - \frac{2H}{L} \right) \exp\left(-\frac{tR}{\epsilon H} + \frac{\pi H}{2L}\right) \quad ; \text{ voor } t > \frac{\pi \epsilon H^2}{2RL} \quad (9b)$$

Indien men uitgaat van vgl. (8c) kan een relatie verkregen worden waarin de gemiddelde concentratie een impliciete functie van de tijd is. Een rekenprogramma met deze formule voor een HP 41 CV zakreken-machine is gegeven in appendix 1.

In fig. 4 is het gemiddelde concentratie verloop weergegeven voor een profiel met een drainafstand L van resp. 40, 80 en 160 m. Ter vergelijking is het concentratie verloop in een volkomen drain weergegeven.

Een belangrijke conclusie is het afnemende belang van de radiale stromingscomponent bij een toenemende drainafstand. Indien $2H/L < 0.1$ kan met de formule worden gewerkt die correspondeert met een volkomen drain.

Voor drains waarvan de draindiepte niet kan worden verwaarloosd ten opzichte van de pakket diepte geldt dat het concentratieverloop ligt in het traject tussen de lijnen die behoren bij een oppervlakkige drain en een volkomen drain.

ROEST en RIJTEMA (1983) geven een pseudo twee-dimensionale formulering voor het stoftransport. De stroomlijnen worden geschematiseerd tot banen met een vertikaal en een horizontaal gedeelte (fig.5.).

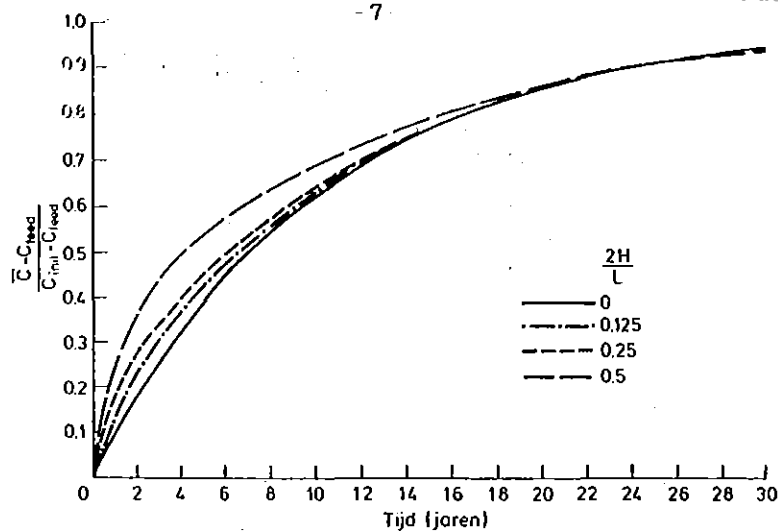


Fig. 4. Concentratie verloop in een oppervlakkige drain bij verschillende drainafstanden. $R = 0.3$ m/jaar; $\epsilon = 0.3$; $H = 10$ m.

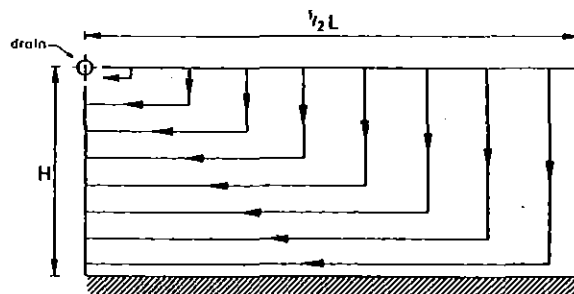


Fig. 5. Schematische weergave van het stromingspatroon in het pseudo twee-dimensionale TRADE concept

De gemiddelde concentratie aan de drain wordt in deze formulering berekend door het gemiddelde van de concentraties in de denkbeeldige lagen van een een-dimensionale kolom te bepalen.

$$\bar{C}(t) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n C_i(t) \quad (10)$$

In deze formulering kunnen op eenvoudige wijze ook verschijnselen als percolatie en kwel ingevoerd worden. Een nadeel is echter dat door de schematisatie van de stroombanen tot rechte lijnen een afwijking van de in vgl.(3) afgeleide logaritmische verblijftijd spreiding wordt geïntroduceerd. Dit wordt geïllustreerd in fig. 6, waarin het concentratieverloop volgens de TRADE schematisering en de analytische oplossing volgens vgl.(5), vgl.(9) en vgl(8c) zijn weergegeven. In beide concepten wordt alleen convectief transport verondersteld en wordt de dispersie buiten beschouwing gelaten.

Bij de TRADE formulering is gerekend met: $L/2 = 2 \cdot H$. De gebruikte waarden van de systeem eigenschappen zijn gelijk aan de waarden, gebruikt in fig. 2.

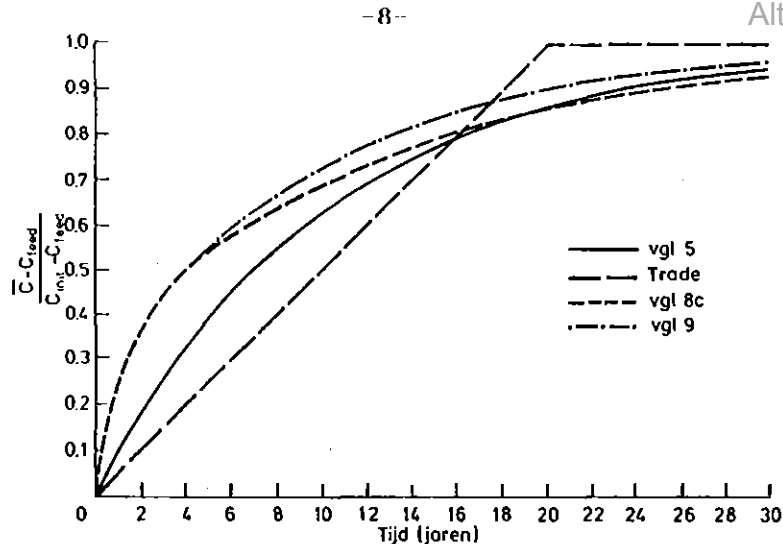


Fig. 6. Gemiddelde concentratie aan de drain berekend met het TRADE concept, met vgl.(5), met vgl.(9) en met vgl.(8c); $C_{\text{feed}} = 1$ en $C_{\text{init}} = 0$

Na de doorbraaktijd ($t=10$ jaar) berekent TRADE een concentratie van 0.5 en vgl.(5) een concentratie van 0,632. Het verschil bedraagt ruim 20 procent.

Voor de ontwikkeling van een model dat het transport van een conservatieve stof in een twee-dimensionaal profiel beschrijft, wordt de stroming geschematiseerd tot een stroming door een cascade van N -reservoirs. De isochronen worden opgevat als grenzen die homogene bodemeenheden afbakenen, analoog aan de schematisering in de een-dimensionale formulering van TRADE (ROEST en RIJTEMA, 1983). Door de discretisatie naar plaats wordt een numerieke dispersie geïntroduceerd. Met het kiezen van een goede waarde voor N , en daarmee ook voor de laagdikte, kan met de numerieke dispersie de werkelijke dispersie worden beschreven.

Het volume van ieder reservoir bedraagt V en kan worden berekend uit:

$$V = \frac{\epsilon \cdot H}{N} \quad (11)$$

Er wordt volledige menging verondersteld.

De uitstroming van het eerste reservoir bedraagt eveneens R ; $(N-1)/N$ gedeelte stroomt in het tweede reservoir en $1/N$ gedeelte verlaat het systeem.

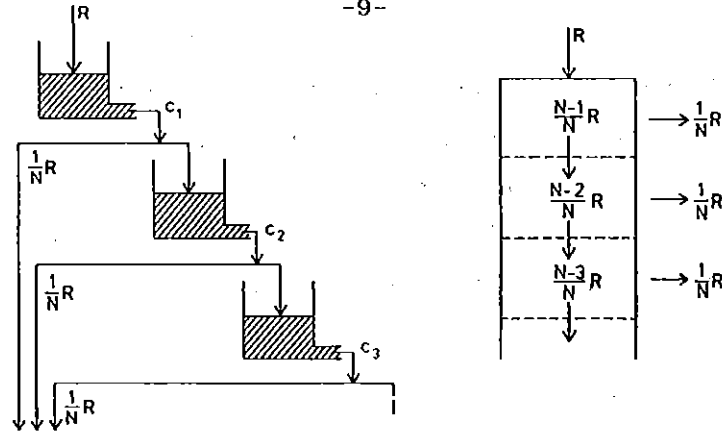


Fig. 7. Schematische weergave van de stroming in een twee-dimensionaal profiel.

Het concentratie verloop naar de tijd in het eerste reservoir $C(1,t)$ kan met de volgende differentiaalvergelijking worden beschreven:

$$V \frac{dC(1,t)}{dt} = R \cdot C_{\text{feed}} - R C(1,t) \quad (12)$$

Als op het tijdstip $t=0$ de concentratie in het reservoir gelijk is aan C_{init} , heeft de vergelijking de volgende oplossing:

$$C(1,t) = C_{\text{feed}} + (C_{\text{init}} - C_{\text{feed}}) \cdot \exp\left(-\frac{Rt}{V}\right) \quad (13)$$

De differentiaal vergelijking voor het tweede reservoir is:

$$V \frac{dC(2,t)}{dt} = \frac{N-1}{N} (R \cdot C(1,t) - R \cdot C(2,t)) \quad (14)$$

Ook nu geldt dat op tijdstip $t=0$, de concentratie in het tweede reservoir gelijk is aan C_{init} . De oplossing van (14) wordt gevonden met behulp van (13) als uitdrukking voor $c(1,t)$.

$$C(2,t) = C_{\text{feed}} + (C_{\text{init}} - C_{\text{feed}}) \cdot \left[-(N-1) \cdot \exp\left(-\frac{Rt}{V}\right) + N \exp\left(-\frac{(N-1)}{N} \cdot \frac{Rt}{V}\right) \right] \quad (15)$$

Voor het n -de reservoir wordt de volgende uitdrukking voor het concentratieverloop gevonden:

$$\frac{C(n,t) - C_{\text{feed}}}{C_{\text{init}} - C_{\text{feed}}} = \sum_{i=1}^n \binom{N}{i-1} \binom{N-1}{n-i} (-1)^{i+1} \cdot \exp\left\{-\frac{N+1-i}{N} \frac{Rt}{V}\right\} \quad (16)$$

Met vgl.(16) kunnen de concentraties op de diepten $d(i)=(i-0.5)*H/N$ met $i = 1, \dots, N$ in een profiel berekend worden, indien waarden voor C_{init} , C_{feed} , R , ϵ , H en N bekend zijn.

De uitstroming is voor alle reservoirs even groot. De gemiddelde concentratie over de reservoirs kan worden berekend uit:

$$\frac{\bar{C}(t)-C_{feed}}{C_{init}-C_{feed}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{C(i,t)-C_{feed}}{C_{init}-C_{feed}} \quad (17)$$

Deze vergelijking heeft als uitkomst:

$$\frac{\bar{C}(t)-C_{feed}}{C_{init}-C_{feed}} = \exp\left(-\frac{1}{N} \frac{Rt}{V}\right) \quad (18)$$

en is bij substitutie van ϵH voor NV volgens vgl. (11) gelijk aan vgl. (5).

In fig. 8 zijn de resultaten weergegeven van een berekening van een concentratiefront in een twee-dimensionaal bodemprofiel.

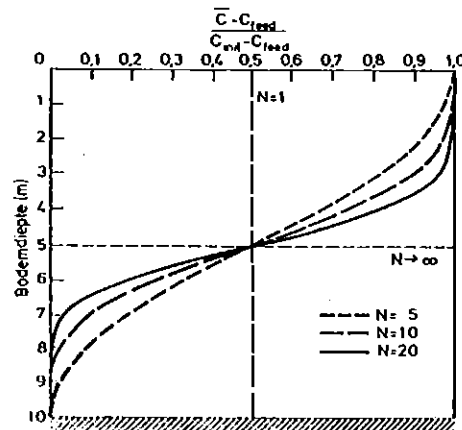


Fig. 8. Concentratiediepte profielen, berekend met vgl. (16), bij verschillende laag aantallen $H = 10$ m; $R = 0,3$ m/jaar; $\epsilon = 0,3$; $t = 6,93$ jaar

2.2. Meervoudig hydrologisch systeem

De modellering van het transport van een conservatieve stof in een meervoudig hydrologisch systeem met stationaire waterstroming wordt geïllustreerd in fig. 9.

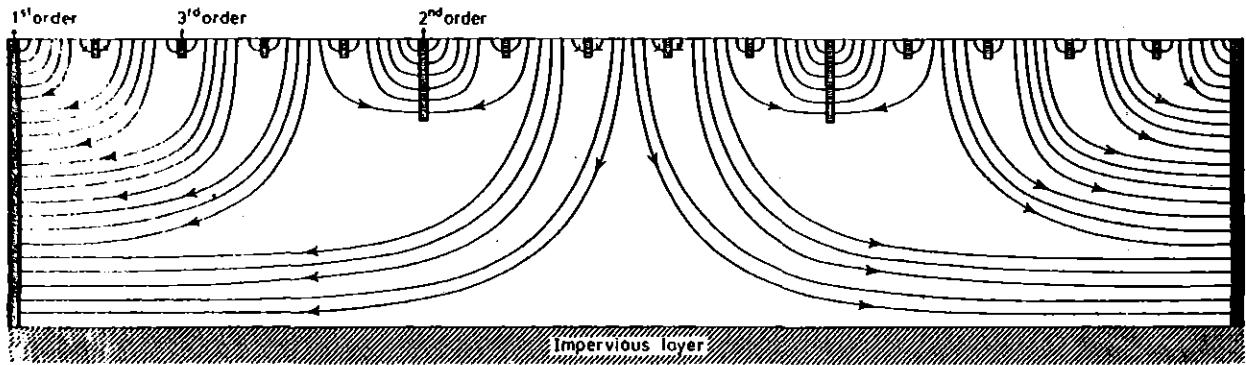


Fig. 9. Schematische doorsnede van het stroomlijnenpatroon van een parallel equidistant drainagesysteem met 3 verschillende niveaus

Uitgangspunt voor de modellering is een gedetailleerd beeld van de stroomlijnen in het bodemprofiel.

De in het enkelvoudige hydrologische systeem gebruikte schematisering gaat uit van een homogene voeding van het pakket in de intrekzone. Als gevolg daarvan is de stroming aan de drain ook homogeen. De verblijftijd van water in de geïntroduceerde lagen kan worden berekend met vgl. (2).

$$T_x = \frac{\epsilon \cdot H}{R} \ln \frac{X_n}{X_{n-1}} \quad (19)$$

waarin: $X_n = \frac{N-1}{N} \cdot L$

$$X_{n-1} = \frac{N-n+1}{N} L$$

De reciproke van de verblijftijd $1/T$ is in figuur 10 uitgezet tegen het laagnummer n , bij $N = 10$. Dit lineaire verband tussen $1/T$ en het laagnummer geldt voor alle waarden van N .

Bij nadering van de waarde n tot N wijken de waarden iets af van het lineaire verband.

Dit verband kan ook op de volgende wijze worden verklaard. De reciproke waarde van de verblijftijd van het gehele profiel is $R/\epsilon H$. Per laag verlaat $1/N$ -de gedeelte van de voeding het profiel. De gemiddelde doorstroming in de eerste laag bedraagt $(N-0.5)/N \cdot R$, in de tweede laag $(N-1.5)/N \cdot R$, etc. De gemiddelde doorstroming, gedeeld door het volume vormt een lineair verband met het laagnummer.

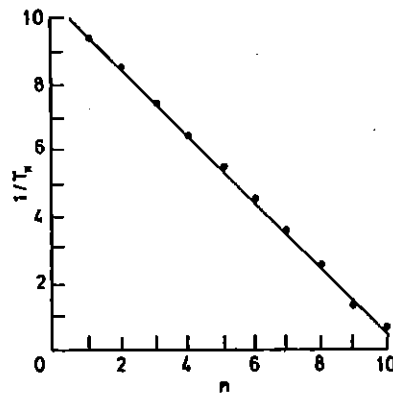


Fig. 10. Verband tussen de reciproke van de verblijftijd $1/T$ en het laagnummer in een twee-dimensionaal profiel, bij onderling gelijke laagdikten.

In de in fig. 9 gegeven schematisatie heeft ieder hydrologisch subsysteem een karakteristieke drainage diepte en drainafstand. In het model ANIMO (BERGHUIS VAN DIJK e.a., 1985) wordt het volgende verband aangenomen voor de verhouding tussen drainage diepte en drainafstand:

$$\frac{f_1 \cdot L_1}{H_1} = \frac{f_2 \cdot L_2}{H_2} = \frac{f_3 \cdot L_3}{H_3} = \frac{f_i \cdot L_i}{H_i} \quad (20)$$

waarin f_i = drainage flux naar een subsysteem i

L_i = drainafstand van een subsysteem i

H_i = drainage diepte van een subsysteem i

Het stroombanen patroon voor een meervoudig hydrologisch systeem kan hieruit worden afgeleid. Vanuit dit patroon kunnen stroomzones met bijbehorende verblijftijden worden onderscheiden. Als N bekend is voor een subsysteem kan voor iedere waarde van de verblijftijd een corresponderende waarde n worden gevonden. Het concentratie verloop kan worden berekend met vgl. (14).

De gemiddelde concentratie in de drain wordt gevonden door de totale vracht vanuit de stroomzones te delen door het totale toegestroomde watervolume.

3. MODELLERING TWEE-DIMENSIONAAL STOFTRANSPORT MET SEIZOENS AFHANKELIJKE STROMING

In grote delen van het pleistocene deel van Nederland vertoont de grondwaterstand een sinusoidaal verloop. Voor de voeding van het watervoerend pakket uit het netto neerslagoverschot lijkt een sinusoidaal verloop een redelijke aanname voor deze gebieden (ERNST, 1971; VAN DER MOLEN, 1977).

Met gebruik van een cosinus- in plaats van een sinusfunctie kan dit als volgt worden weergegeven:

$$R(t) = R_{av} + R_{am} * \cos\left(\frac{2\pi t}{365}\right) \quad (21)$$

met $R(t)$ = voeding van het watervoerend pakket

als functie van de tijd (L/T)

R_{av} = gemiddeld neerslag overschot (L/T)

R_{am} = amplitude van de voeding (L/T)

t = tijd in etmalen, gerekend vanaf het tijdstip
 waarop de hoogste grondwaterstand optreedt

Als de stroming naar parallelle ontwateringsmiddelen, respectievelijk de stroming naar een volkomen put in freatisch water wordt beschouwd, kan bij de berekening van de gemiddelde concentratie aan de drain respectievelijk put, het systeem worden opgevat worden als een volledig gemengd reservoir.

Als vgl.(21) voor de flux wordt genomen, kan de volgende differentiaalvergelijking worden opgesteld:

$$\frac{dC}{dt} = (C_{feed} - C) \left\{ \frac{R_{av}}{\epsilon H} + \frac{R_{am}}{\epsilon H} \cdot \cos\left(\frac{2\pi t}{365}\right) \right\} \quad (22)$$

Op tijdstip $t=0$ is de concentratie in het profiel gelijk aan C_{init} en heeft de vergelijking de volgende oplossing:

$$\frac{C(t) - C_{feed}}{C_{init} - C_{feed}} = \exp\left(-\frac{R_{av}}{\epsilon H} t + \frac{R_{am}}{\epsilon H} \frac{365}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi t}{365}\right)\right) \quad (23)$$

Voor de berekening van concentratie diepte-profielen wordt het in het vorige hoofdstuk beschreven concept met een reservoir cascade ook hier als basis gebruikt voor het stromingsmodel.

De concentratie in de eerste laag verloopt volgens vgl. (23) indien in plaats van $\epsilon \cdot H$ de met vgl. (11) berekende V voor de laagdikte wordt gebruikt.

De differentiaalvergelijking voor de tweede laag is:

$$V \frac{dC_2}{dt} = \frac{N-1}{N} ((C_1 - C_2) * R_{av} + R_{am} \cos(\frac{2\pi t}{365})) \quad (24)$$

Bij substitutie van vgl. (23) en vgl. (11) voor C_1 is de oplossing van vgl. (24):

$$\begin{aligned} \frac{C(2,t) - C_{feed}}{C_{init} - C_{feed}} = & (- (N-1) \exp(-\frac{R_{av}}{V} t - \frac{R_{am}}{V} \frac{365}{2\pi} \sin(\frac{2\pi t}{365})) + \\ & + N \exp(1 - \frac{N-1}{N} \cdot \frac{R_{av}}{V} t + \frac{R_{am}}{V} \frac{365}{2\pi} \sin(\frac{2\pi t}{365}))) \end{aligned} \quad (25)$$

Het concentratie verloop van de n -de laag wordt analoog aan vgl. (16) gevonden.

$$\begin{aligned} \frac{C(n,t) - C_{feed}}{C_{init} - C_{feed}} = & \sum_{i=1}^n \left(\frac{N}{i} \right) \left(\frac{N-1}{n-1} \right) (-1)^{i+1} \exp\left\{-\frac{N+1+i}{N} * \right. \\ & \left. \left(\frac{R_{av}}{V} t + \frac{R_{am}}{V} \frac{365}{2\pi} \sin(\frac{2\pi t}{365}) \right) \right\} \end{aligned} \quad (26)$$

Als het netto neerslagoverschot niet het hierboven aangenomen sinusoidale verloop vertoont kan het systeem worden doorgerekend met behulp van een reeks stationaire toestanden. De tijdschaal wordt verdeeld in eenheden waarbinnen de tijdsafhankelijke flux constant gesteld kan worden. De resulterende concentratie van een periode wordt voor de volgende periode als de initiële concentratie beschouwd. De initiële concentratie op tijdstip $t=0$ in de te onderscheiden bodemlagen behoeft in deze quasi-stationaire benadering niet voor alle lagen gelijk te zijn.

Analoog aan de afleiding van vgl.(16) werd de volgende formule ontwikkeld:

$$C(n,t) = C_{feed} + \sum_{k=1}^n [(C_{init,k} - C_{feed}) * \sum_{i=0}^{n-k} (-1)^{n-k+i} * \binom{N-k}{N-n} * \binom{n-k}{i} * \exp(-\frac{N+1-k-i}{N} \frac{Rt}{V})]$$
(27)

4. MODELLERING TWEE-DIMENSIONAAL STOFTRANSPORT ONDER INVLOED VAN REGIONALE STROMING

In de meeste eenvoudige stationaire modellen die het stoftransport door een watervoerend pakket naar een put of een drain beschrijven, wordt verondersteld dat de voeding uit het netto-neerslagoverschot en de concentratie aan stoffen die met dit water worden meegevoerd constant zijn. In werkelijkheid zal dat bijna nooit het geval zijn en zijn deze variabelen in mindere of meerdere mate afhankelijk van de tijd.

De aanname dat de belasting homogeen is, is eveneens een beperking van deze modellen. In de praktijk worden soms maatregelen genomen die de concentratie aan milieuvreemde stoffen in het voedingswater in beschermingszones rondom bijvoorbeeld natuurterreinen of waterwin-gebieden moeten doen afnemen.

Om de invloed van dergelijke maatregelen te kunnen voorspellen en evalueren is het nodig in deze modellen een ruimtelijke variatie met betrekking tot intrekgebieden mogelijk te maken.

De niet-stationariteit wordt benaderd door een opeenvolgende serie stationaire toestanden. De ruimtelijke variatie wordt benaderd door het intrekgebied te verdelen in subgebieden waarbinnen de voeding en de concentratie van de voeding homogeen zijn. Voor ieder subgebied is de voeding en de concentratie van de voeding constant per tijdstap. De lengte van een tijdstap is afhankelijk van de termijn waarbinnen verondersteld kan worden dat de genoemde variabelen constant blijven. In fig. 11 is de schematisering van de aanpak van de modellering met een aantal subgebieden weergegeven. In deze figuur wordt ieder sub-

gebied voorgesteld als 1 compartiment. Om op praktijkschaal het dispersie effect in de hand te houden zullen doorgaans de subgebieden in meerdere compartimenten worden onderverdeeld. Ook hier vormt een reservoir cascade de basis voor het model.

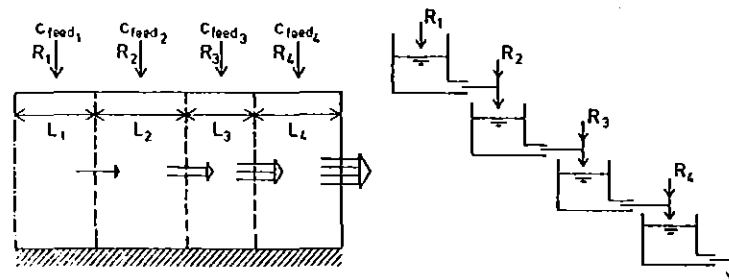


Fig. 11. Schematische weergave van de stroming met ruimtelijke variatie met betrekking tot intrekgebieden

De verdeling van het profiel in een aantal compartimenten veroorzaakt een numerieke dispersie. Bij een oneindig groot aantal compartimenten wordt dit dispersie effect uitgesloten en moet de gevonden oplossing de uitkomst benaderen van de rekenwijze met alleen convectieve stroming. Als goede waarden voor de parameters bekend zijn, kan de numerieke dispersie gebruikt worden om de natuurlijke dispersie te simuleren. De volgende differentiaal vergelijking kan voor het eerste compartiment worden opgesteld.

$$L_1 \cdot \epsilon H \cdot \frac{dc_1}{dt} = L_1 R_1 \cdot C_{feed,1} - L_1 \cdot R_1 \cdot C_1 \quad (28)$$

Op $t=0$ is de concentratie gelijk aan C_{init} . De oplossing voor de vergelijking is:

$$C(1,t) = C_{feed,1} + (C_{init,1} - C_{feed,1}) \cdot \exp\left(-\frac{L_1 R_1 t}{L_1 \cdot \epsilon H}\right) \quad (29)$$

Voor het tweede compartiment is de differentiaalvergelijking:

$$L_2 \cdot \epsilon H \frac{dC_2}{dt} = L_1 \cdot R_1 \cdot C(1,t) + L_2 \cdot R_2 \cdot C_{feed,2} - (L_1 R_1 + L_2 R_2) \cdot C_2 \quad (30)$$

Als op $t=0$ de concentratie in dit compartiment gelijk is aan $C_{init.2}$ en vgl. (29) wordt ingevoerd als uitdrukking voor $c(1,t)$, is de oplossing van vgl. (30):

$$C(2,t) = \frac{L_1 R_1 C_{feed,1} + L_2 R_2 C_{feed,2}}{L_1 R_1 + L_2 R_2} + \frac{L_1 R_1}{R_1 (L_2 - L_1) + R_2 L_2} * \\ (C_{init,1} - C_{feed,1}) * \exp\left\{-\frac{L_1 R_1 t}{L_1 \cdot \epsilon H}\right\} + \\ [C_{init,2} - \frac{L_1 R_1 C_{feed,1} + L_2 R_2 C_{feed,2}}{L_1 R_1 + L_2 R_2} - \frac{L_1 R_1}{R_1 (L_2 - L_1) + R_2 L_2} * \\ (C_{init,1} - C_{feed,1}) * \exp\left\{-\frac{L_1 R_1 + L_2 R_2}{L_2 \cdot \epsilon H} t\right\}] \quad (31)$$

Op dezelfde manier kunnen voor de compartimenten 3 tot en met n formules worden ontwikkeld. Dit pseudo-numerieke rekenschema heeft de volgende algemene vorm:

$$C(n,t) = \frac{\sum_{i=1}^n R_i L_i \cdot C_{feed,i}}{\sum_{i=1}^n R_i L_i} + \text{coef}_{n,1} * \exp\left\{-\frac{R_1 L_1}{L_1 \epsilon H} \cdot t\right\} + \\ - \text{coef}_{n,2} * \exp\left\{-\frac{R_1 L_1 + R_2 L_2}{L_2 \cdot \epsilon H} t\right\} + \dots + \text{coef}_{n,k} * \\ \exp\left\{-\frac{t}{L_k \cdot \epsilon H} \cdot \sum_{i=1}^k R_i L_i\right\} + \dots + \text{coef}_{n,n} * \left\{-\frac{t}{L_n \cdot \epsilon H} \cdot \sum_{i=1}^n R_i L_i\right\} \quad (32)$$

$$\text{met: } \text{coef}_{n,1} = \text{coef}_{n-1,1} * \sum_{i=1}^{n-1} R_i L_i / \left\{ \sum_{i=1}^n R_i L_i - L_n \frac{R_i L_i}{L_i} \right\} \quad (32a)$$

$$\text{met: } \text{coef}_{n,2} = \text{coef}_{n-1,2} * \sum_{i=1}^{n-1} R_i L_i / \left\{ \sum_{i=1}^n R_i L_i - L_n \left(\frac{1}{L_2} \sum_{i=1}^2 R_i L_i \right) \right\} \quad (32b)$$

$$\text{coef}_{n,k} = \text{coef}_{n-1,k} * \sum_{i=1}^{n-1} R_i L_i / \left\{ \sum_{i=1}^n R_i L_i - L_n \left(\frac{1}{L_k} \sum_{i=1}^k R_i L_i \right) \right\} \quad (32c)$$

$$\text{coef}_{n,n} = C_{\text{init},n} - \sum_{k=1}^{n-1} \text{coef}_{n,k} - \left\{ \sum_{i=1}^n (R_i L_i C_{\text{feed},i}) \right\} / \sum_{i=1}^n R_i L_i \quad (32d)$$

De resulterende concentratie $C(k,t)$ aan het einde van een tijdsperiode k , vormt de initiële concentratie voor de volgende periode van dat compartiment.

In fig. 12 is het concentratie verloop weergegeven van een profiel dat een homogene voeding krijgt en op 20-40 procent van de afstand waterscheiding - drain een concentratie 5 heeft in het voedingswater. Op $t=0$ is de initiële concentratie in het profiel 0. De berekening is uitgevoerd met een verschillend aantal compartimenten.

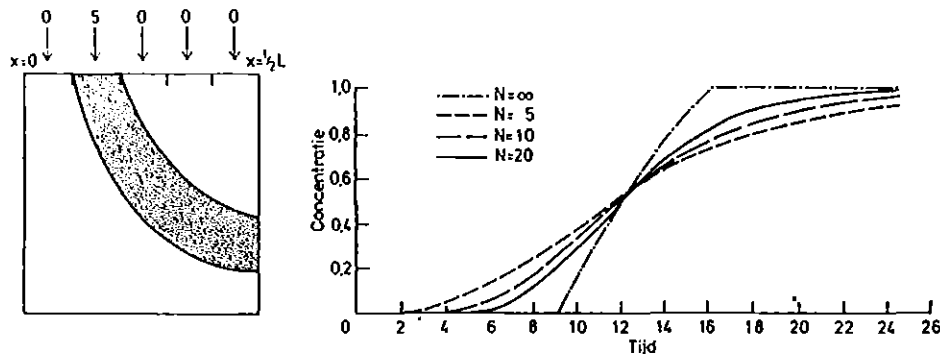


Fig.12. Gemiddelde concentratie aan de drain, berekend met een verschillend aantal compartimenten

Een regionale stromingscomponent kan worden ingevoerd als het gebied tussen de waterscheiding en de beschouwde subgebieden niet nader gedefinieerd is voor wat betreft het oppervlakte en als dit gebied niet nader onderverdeeld is. In dit geval wordt $R_1 L_1$ vervangen door $(R_1 L_1)^*$ en $C_{\text{feed},1}$ door $C_{\text{feed},1}^*$:

$$(R_1 L_1)^* = R_1 L_1 + f_R \cdot H \quad (33a)$$

$$C_{\text{feed},1}^* = \frac{C_{\text{feed},1} R_1 L_1 + C_{\text{feed},R} f_R H}{R_1 L_1 + f_R \cdot H} \quad (33b)$$

waarin: f_R de fluxdichtheid en $C_{feed,R}$ de concentratie van de regionale stroming voorstelt en H de pakketdikte. In fig. 13 is dit schematisch weergegeven.

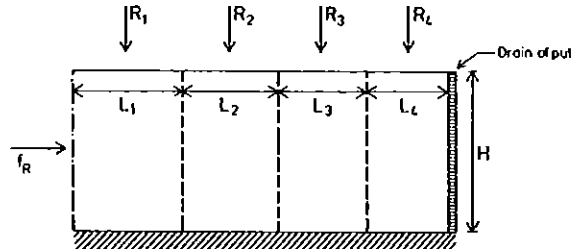


Fig.13. Schematische weergave van de rekenwijze met een regionale stromingscomponent

In appendix 2 is ter illustratie een rekenvoorbeeld met dit model uitgewerkt. In dit voorbeeld is elk subgebied voorgesteld en doorgerekend als een compartiment.

5. BEPALING VAN DE VERTIKALE LAAGDIKTE

In een één-dimensionale grondkolom kan het aantal lagen waarmee gerekend dient te worden om de doorbraak van een conservatieve stof te simuleren, worden berekend met behulp van de statische momenten methode (ROEST en RIJTEMA,1983; GROENENDIJK,1985).

De zogenaamde impuls respons kan worden verkregen door de 'doorbraak-curve', waarin de concentratie relatief is uitgezet, te differentiëren naar de tijd.

Het i-de moment wordt als volgt berekend:

$$M_i = \frac{\int_0^{\infty} t^i f(t) dt}{\int_0^{\infty} f(t) dt} \quad (34)$$

met: t = tijd (T)

$f(t)$ = impulsrespons (M^3/T)

Het laag-aantal kan worden berekend volgens:

$$N = \frac{M_1^2}{M_2 - M_1^2} \quad (35)$$

Het verticale laag-aantal N , benodigd voor berekeningen met vgl. (16) kan op analoge wijze worden berekend. Een voorwaarde is echter wel dat men de beschikking heeft over een concentratie-diepte profiel van een conservatieve stof die is bepaald op het tijdstip $t = (\epsilon H/R) \ln 2$.

$$M_1 = \frac{\int_0^H x^2 g(x) dx}{\int_0^H g(x) dx} \quad (36)$$

met: x = diepte ten opzichte van de voedingsbron (L)
 $g(x)$ = impulsrespons (M^3/T)

De impulsrespons $g(x)$ wordt bepaald door de relatieve concentratie curve naar de plaats te differentieren. Het laag-aantal wordt eveneens berekend met vgl. (35).

6. NUMERIEKE MODELLERING VAN TWEE-DIMENSIONAAL STOFTRANSPORT IN DE VERZADIGDE ZONE

6.1. Discretisatie van de twee-dimensionale differentiaalvergelijking

Het twee-dimensionale convectieve en dispersieve stoftransport kan worden beschreven met de volgende differentiaalvergelijking (CHENG et al, 1984):

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \quad (37)$$

waarin: u en v de reële snelheden zijn op een bepaald punt van de twee-dimensionale doorsnede en in de x - en y -richting $c(x,y,t)$ de concentratie is op tijdstip t in het punt (x,y) . Als de dispersie isotroop is kan de tweede orde term worden vereenvoudigd tot:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) \quad (38)$$

met D = apparent diffusion coëfficiënt (L^2/T)

D_x en D_y = apparent diffusion coëfficiënt in de x - en y -richting (L^2/T)

In het navolgende worden 3 manieren besproken waarop de differentiaal vgl. (37) kan worden gediscretiseerd.

Met behulp van Taylor reeksen kunnen partiële differentie termen voor de discrete termen worden verkregen. In appendix 3 zijn een aantal reeksen uitgewerkt.

Een discrete vorm voor vgl. (37) kan worden gegeven door:

$$\begin{aligned} & \frac{c(x,y,t+\Delta t) - c(x,y,t)}{\Delta t} + u \frac{c(x,y,t) - c(x-\Delta x,y,t)}{\Delta x} + \\ & + v \frac{c(x,y,t) - c(x,y-\Delta y,t)}{\Delta y} \\ & = D_x \left[\frac{c(x+\Delta x,y,t) - 2c(x,y,t) + c(x-\Delta x,y,t)}{(\Delta x)^2} \right] + \\ & + D_y \left[\frac{c(x,y+\Delta y,t) - 2c(x,y,t) + c(x,y-\Delta y,t)}{(\Delta y)^2} \right] \end{aligned} \quad (39)$$

Als de tweede orde diffusie term wordt verwaarloosd door het stellen van $D_x = D_y = 0$, houdt deze schrijfwijze een menging in, in compartiment (i,j) met vloeistof uit de compartimenten $(i-1,j)$ en $(i,j-1)$. De menging wordt berekend door een lineaire interpolatie tussen de compartimenten (i,j) en $(i-1,j)$ en de compartimenten (i,j) en $(i,j-1)$, zoals is aangegeven in fig. (14).

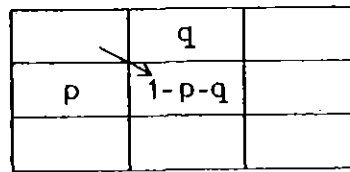


Fig. 14. Mengprincipe in vgl. (39) met $p = \frac{u\Delta t}{\Delta x}$ en $q = \frac{v\Delta t}{\Delta y}$

Substitutie van vgl. (3-7) tot en met vgl. (3-10) uit appendix 3 in vgl. (39) geeft het volgende resultaat:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} +$$

$$\frac{1}{2}[(u\Delta x - u^2\Delta t) \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - 2uv\Delta t \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial y} + (v\Delta y - v^2\Delta t) \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}] + \dots \quad (40)$$

De laatste RHS-term is een uitdrukking voor de numerieke dispersie die ontstaat als gevolg van de benadering met eindige differenties. Het effect van de numerieke dispersie is een functie van het snelheidsveld en er is geen eenduidige manier om de mate van deze dispersie te controleren.

Een differentieschema met bi-lineaire interpolatie geeft enige verbetering ten opzichte van de hier boven besproken methode. Behalve de compartimenten (i,j), (i-1,j) en (i,j-1) wordt ook het compartiment (i-1,j-1) in de interpolatie betrokken.

$$\begin{aligned}
 & \frac{c(x,y,t+\Delta t) - c(x,y,t)}{\Delta t} + u \frac{c(x,y,t) - c(x-\Delta x,y,t)}{\Delta x} + \\
 & + v \frac{c(x,y,t) - c(x,y-\Delta y,t)}{\Delta y} + \frac{u}{\Delta x} \cdot \frac{v}{\Delta y} \cdot \Delta t * \\
 & \{c(x-\Delta x,y,t) + c(x,y-\Delta y,t) - c(x,y,t) - c(x-\Delta x,y-\Delta y,t)\} \\
 & = D_x \left\{ \frac{c(x+\Delta x,y,t) - 2c(x,y,t) + c(x-\Delta x,y,t)}{(\Delta x)^2} \right\} \\
 & + D_y \left\{ \frac{c(x,y+\Delta y,t) - 2c(x,y,t) + c(x,y-\Delta y,t)}{(\Delta y)^2} \right\} \quad (41)
 \end{aligned}$$

$p \cdot q$	$q(1-p)$	
$p(1-q)$	$(1-p)(1-q)$	

Fig. 15. Mengprincipe in vgl. (41) met $p = \frac{u\Delta t}{\Delta x}$ en $q = \frac{v\Delta t}{\Delta y}$

Substitueren van vgl. (37) tot en met vgl. (3-10) en vgl. (3-15) uit appendix 3 in vgl. (41) levert de volgende uitdrukking als resultaat op:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial c}{\partial t} - u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{1}{2}[(u\Delta x - u^2\Delta t) \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \\
 + \frac{1}{2}(v\Delta y - v^2\Delta t) \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}] \quad (42)
 \end{aligned}$$

De mate van numerieke dispersie die optreedt bij gebruik van bovenstaand rekenschema kan enigszins gecontroleerd worden door het kiezen van een goede tijdstap. Dit kan geschieden door voor elk compartiment in de twee-dimensionale doorsnede Δt_x en Δt_y te berekenen uit de volgende betrekkingen:

$$D_x^{ap} = D_x + \frac{1}{2}(u\Delta x - u^2\Delta t) \quad (43a)$$

$$D_y^{ap} = D_y + \frac{1}{2}(v\Delta y - v^2\Delta t) \quad (43b)$$

waarin: D_x^{ap} en D_y^{ap} de 'apparent diffusion' in de x- en y-richting voorstelt (GROENENDIJK, 1985).

Per compartiment worden 2 tijdstappen berekend. Uit rekenkundige overwegingen zal men verkiezen met 1 tijdstap per compartiment te werken. De afwijking van de oplossing met een exact gecontroleerde dispersie is het kleinst wanneer Δt wordt berekend volgens:

$$\Delta t = \sqrt{\Delta t_x \cdot \Delta t_y} \quad (44)$$

De toepassing van dit rekenschema vergt desondanks nog een omvangrijke administratie omdat per compartiment met een andere tijdstap wordt gewerkt.

CHENG et al (1984) geven een methode die de numerieke dispersie uitsluit. De methode is gebaseerd op de interpolatie over de omliggende compartimenten met behulp van tweede orde Lagrange polynomen. De eindige differentiebenadering in deze methode wordt gegeven door:

$$\begin{aligned} c(x,y,t+\Delta t) = & a_0 \cdot c(x,y,t) + a_1 \cdot c(x+\Delta x,y-\Delta y,t) + \\ & a_2 \cdot c(x,y-\Delta y,t) + a_3 \cdot c(x-\Delta x,y-\Delta y,t) + \\ & a_4 \cdot c(x+\Delta x,y,t) + a_5 \cdot c(x-\Delta x,y,t) + \\ & a_6 \cdot c(x+\Delta x,y+\Delta y,t) + a_7 \cdot c(x,y+\Delta y,t) + \\ & a_8 \cdot c(x-\Delta x,y+\Delta y,t) \end{aligned} \quad (45)$$

$$\text{met } a_0 = (1-p^2)(1-q^2) - 2 \frac{\Delta t D_x}{(\Delta x)^2} - 2 \frac{\Delta t D_y}{(\Delta y)^2} \quad (45a)$$

$$a_1 = -\frac{1}{4} p(1+p) q(1-q) \quad (45b)$$

$$a_2 = -\frac{1}{2}(1-p^2) q(1-q) + \frac{\Delta t D_y}{(\Delta y)^2} \quad (45c)$$

$$a_3 = \frac{1}{4} p(1-p) q(1-q) \quad (45d)$$

$$a_4 = \frac{1}{2} p(1+p) (1-q^2) + \frac{\Delta t D_x}{(\Delta x)^2} \quad (45e)$$

$$a_5 = -\frac{1}{2} p(1-p) (1-q^2) + \frac{\Delta t D_x}{(\Delta x)^2} \quad (45f)$$

$$a_6 = \frac{1}{4} p(1+p) q(1+q) \quad (45g)$$

$$a_7 = \frac{1}{2} (1-p^2) q(1+q) + \frac{\Delta t D_y}{(\Delta y)^2} \quad (45h)$$

$$a_8 = -\frac{1}{4} p(1-p) q(1+q) \quad (45i)$$

met $p = -u \frac{\Delta t}{\Delta x}$ en $q = -v \frac{\Delta t}{\Delta y}$

a_8	a_7	a_6
a_5	a_0	a_4
a_3	a_2	a_1

Fig. 16. Mengprincipe in vgl. (45) met $p = -u \frac{\Delta t}{\Delta x}$ en $q = -v \frac{\Delta t}{\Delta y}$

Door de vergelijkingen (3-7) tot en met (3-15) uit appendix 3 in vgl. (45) te substitueren ontstaat de volgende betrekking:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \dots \quad (46)$$

Bij verwaarlozing van de 3e en hogere ordetermen verdwijnt de numerieke dispersie uit dit rekenschema. Men dient echter wel rekening te houden met het optreden van oscillaties bij bepaalde waarden van de tijdstap en de dispersielengte.

Een ander nadeel van dit rekenschema is het genereren van negatieve concentraties in het geval er verdringing plaats vindt van een geconcentreerde oplossing met een minder geconcentreerde oplossing en er sprake is van een scherp grensvlak.

Met dit rekenschema werden berekeningen uitgevoerd met een kleine tijdstap en dispersielengten: $k = 0,1$; $k = 0,2$ en $k = 0,5$ (m). De afmetingen van het profiel, de initiële concentratie en de voedingsconcentratie waren gelijk aan die in fig. 8.

Allereerst viel op dat de iso-concentratielijnen horizontaal in het profiel liepen. In fig. 17 is het concentratieverloop naar de diepte weergegeven van de 3 uitgevoerde berekeningen op tijdstip $t=7.00$.

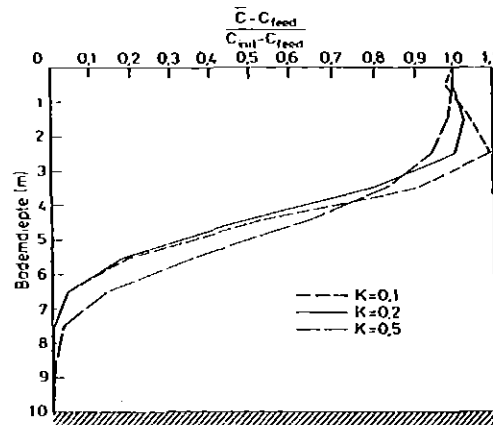


Fig. 17. Concentratie diepteprofielen, berekend met vgl. (45)

Voor de 3 simulaties geldt dat de hoeveelheid stof die in het profiel is geïnfilteerd niet gelijk is.

Gedeeltelijk is dit effect te verklaren uit de optredende oscillatie.

6.2. Pseudo twee-dimensionale oplossing

SCHULZ en REARDON (1983) geven de volgende vergelijking voor het twee-dimensionale stoftransport bij een éénrichtingsstroming:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial C}{\partial x} = D_l \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_t \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \quad (46)$$

met $\bar{u}$ als de gemiddelde snelheid van het grondwater, x als de coördinaat in de stroomrichting y als de coördinaat loodrecht op de

stroomrichting, D_l als de longitudinale dispersiecoëfficiënt en D_t als de transversale dispersiecoëfficiënt.

Zij baseren de stoftransportberekeningen op een propstroom en superponeren een dispersieterm op het loodrecht op de stromingsrichting. De concentratie verkregen uit de propstroom berekening wordt vermenigvuldigd met een exponentiële term:

$$c(x,y,t) = c_{\max} \cdot \exp\left\{-\frac{1}{4t}\left(\frac{(x-\bar{u}t)^2}{D_l} + \frac{y^2}{D_t}\right)\right\} \quad (48)$$

Voor de berekening van het propstroom front gebruiken zij het zogenaamde 'mixing-cell' concept met een minimale numerieke dispersie. In fig. 18 is het dispersieve effect weergegeven van een bodemcompartiment waarbij een stofverdeling plaats vindt over de omliggende compartimenten.

De mate van transversale dispersie is klein ten opzichte van de longitudinale dispersie. SAUTY (1980) geeft de volgende verhouding:

$$\frac{D_l}{D_t} \approx 20 \quad (49)$$

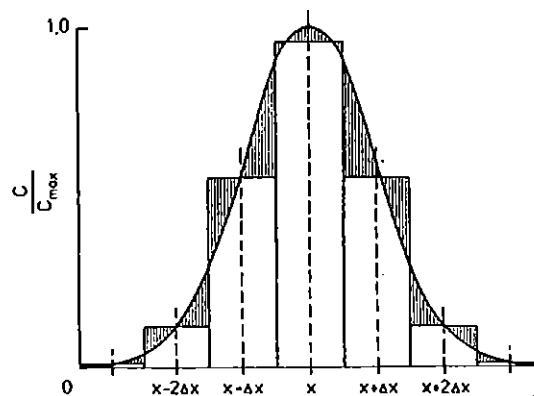


Fig. 18. Histogram waarin het dispersieve effect is weergegeven met een continue en gediscretiseerde frequentieverdeling

SUDICKY et al (1983) komen tot de conclusie dat de dispersielengte kan variëren, afhankelijk van de afstand tot de bron. Zij geven een verhouding van 2.5-4.0.

In het 'mixing-cell' concept wordt de transversale dispersie niet beschouwd. In dit concept wordt de één-dimensionale convectie-dispersie vergelijking op een expliciete, achterwaartse wijze gediscretiseerd.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (50)$$

$$\frac{c(x, t+\Delta t) - c(x, t)}{\Delta t} = -u \frac{c(x, t) - c(x-\Delta x, t)}{\Delta x} \quad (51)$$

Wanneer de uitdrukkingen voor de discrete termen vgl. (3-1), vgl. (3-4) en vgl. (3-6) uit appendix 3 worden gesubstitueerd in vgl. (51) verkrijgt men de volgende vergelijking:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{1}{2}(u\Delta x - u^2\Delta t) \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (52)$$

In dit concept kan de waarde voor de tijdstap zodanig worden berekend dat de numerieke dispersie gelijk is aan de natuurlijke dispersie (VAN OMMEN, 1985). Vgl. (51) kan worden herschreven tot:

$$c(x, t+\Delta t) = \frac{u\Delta t}{\Delta x} \cdot c(x-\Delta x, t) + (1 - \frac{u\Delta t}{\Delta x}) \cdot c(x, t) \quad (53)$$

De verblijftijd in een compartiment kan worden berekend met:

$$T = \frac{\Delta x}{u} \quad (54)$$

zodat vgl. (53) overgaat in:

$$c(x, t+\Delta t) = \frac{\Delta t}{T} \cdot c(x-\Delta x, t) + (1 - \frac{\Delta t}{T}) \cdot c(x, t) \quad (55)$$

In een twee-dimensionaal profiel kan de zone tussen 2 stroomlijnen worden opgevat als een één-dimensionale grondkolom. De begrenzingen van een compartiment worden gevormd door de stroomlijnen en de isochronen (zie fig. 2).

Het transversale dispersie effect kan men op een dergelijke stroombaan superponeren met behulp van het in fig. 18 gegeven concept. De stofverdeling over de aanliggende compartimenten vindt plaats volgens de sleutel:

$$c'(x, y \pm k\Delta y, t) = (1-p) \cdot c(x, y, t) + p \cdot c(x, y \pm k\Delta y, t) \quad (56)$$

$$\text{met: } p = \exp\left\{-\frac{1}{4\Delta t} \frac{(k\Delta y)^2}{D_t}\right\}$$

In appendix 4 is de voortschrijding van een chloridefront in een twee-dimensionaal profiel weergegeven, waarbij het transversale dispersie effect buiten beschouwing is gelaten. In dit rekenvoorbeeld is gerekend met een anisotrope grond waarbij de horizontale doorlatendheid 25 maal zo groot is als de verticale doorlatendheid. Aan de bovenrand worden 3 zones onderscheiden. Van links naar rechts een kwelzone, een regenwaterinfiltratiezone en een Rijnwaterinfiltratiezone. Aan de onderrand is een homogeen verdeelde kwelflux. De linker en rechter randen zijn waterscheidingen.

LITERATUUR

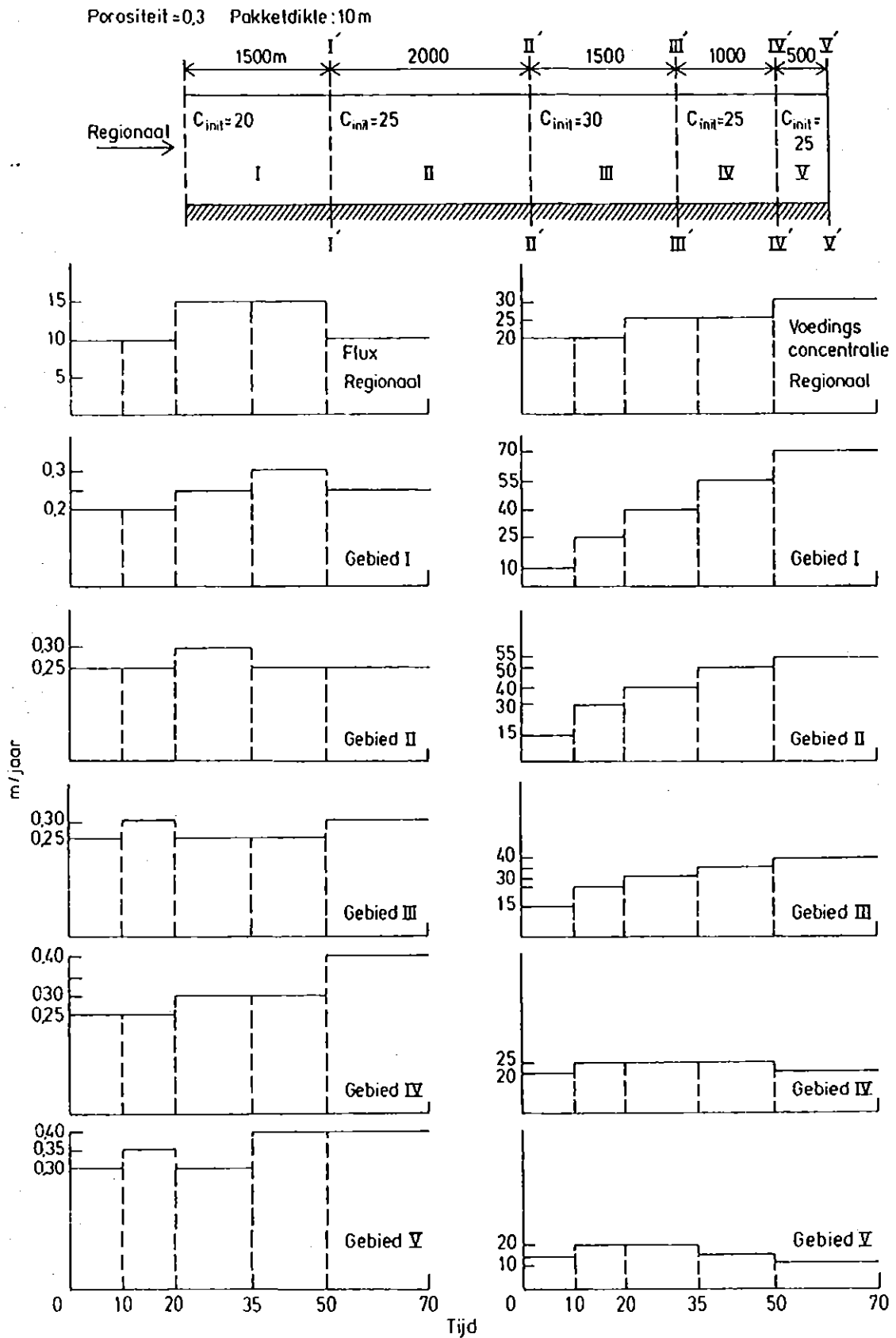
- BERGHUIS-VAN DIJK, J.T., P.E. RIJTEMA en C.W.J. ROEST, 1985. ANIMO, Agricultural Nitrogen Model, ICW nota 1671, Instituut voor Cultuurtechniek en Waterhuishouding, Wageningen.
- CHENG, R.T., V. CASULLI en S.M. MILFORD, 1984. Euler-Lagrangian Solution of the Convection-Dispersion Equation in Natural Coordinates. Water Resources Research, Vol. 20, No. 7:944-952.
- ERNST, J.F., 1971. Analysis of Groundwater Flow to Deep Wells in Areas with a Non-linear Function for the Subsurface Drainage, Journal of Hydrology Vol. 14: 158-180.
- , 1973. De bepaling van de transporttijd van het grondwater in de verzadigde zone, ICW nota 755, Instituut voor Cultuurtechniek en Waterhuishouding, Wageningen.
- GROENENDIJK, P., 1985. A Mixing Cell Solute Transport Model with Exchange of Cations in Soils, Modelling and parameter estimation of transport of Na, Ca and Mg ions in soils applied to microcolumn experiments and to the reuse of drainage water in Egypt, ICW nota 1578, Instituut voor Cultuurtechniek en Waterhuishouding, Wageningen.
- MOLEN, W.H. VAN DER, 1975. Water Quality. Influence of Transport and Mixing Processes, Agricultural University, Dept. of Land and Water Management, Wageningen.
- , 1977. Beheer van Grondwater Voorraden. Agricultural University, Dept. of Land and Water Management, Wageningen.
- OMMEN, H.C. VAN, 1985. Invloed van diffuse verontreinigingen op de kwaliteit van gewonnen of afstromend grondwater: een analogie met een eenvoudig mengproces (1). H2O(18) 1985, nr 14: 313-316.
- , 1985. The "MIXING-CELL" Concept Applied to Transport of Non-reactive and Reactive Components in Soils and Groundwater. Journal of Hydrology, Vol. 78: 201-233.
- ROEST, C.W.J. en P.E. RIJTEMA, 1983. Analysis of a Model for Transport, Adsorption and Decomposition of Solutes in the Soil. ICW nota 1404, Instituut voor Cultuurtechniek en Waterhuishouding, Wageningen.

- SAUTY, J.P., 1980. An Analysis of Hydrodispersive Transfer in Aquifers. Water Resources Research, Vol.16: 145-158.
- SCHULZ, H.D., and E.J. REARDON, 1983. A Combined Mixing Cell/Analytical Model to Describe Two-Dimensional Reactive Solute Transport for Unidirectional Groundwater Flow, Water Resources Research, Vol.19, No.2: 493-502.
- SUDICKY, E.A., J.A. CHERRY and E.O. FRIND, 1983. Migration of Contaminants in Groundwater at a Landfill: a Case Study, 4. A Natural-Gradient Dispersion Test, Journal of Hydrology, Vol.63: 81-108.

APPENDIX 1. HP41CV REKENPROGRAMMA VOOR VGL. (8c)

01*LBL "BTCSH1"	62*LBL 02	111*LBL "FX1"	163*LBL "FXX1"
02 CLRG	63 XEQ "FX1"	112 RCL 10	164 RCL 12
03 RRD	64 XEQ "FXX1"	113 PI	165 X12
04 ADV	65 RCL 13	114 *	166 I
05 "dT?"	66 RCL 14	115 RCL 05	167 +
06 PROMPT	67 /	116 /	168 SQRT
07 STO 01	68 ABS	117 STO 11	169 RCL 11
08 "NO. 1?"	69 I E-04	118 TAN	170 SIN
09 PROMPT	70 XYY?	119 I/X	171 X12
10 STO 02	71 GTO 03	120 CHS	172 *
11 "POR?"	72 RCL 10	121 STO 12	173 I/X
12 PROMPT	73 RCL 13	122 X12	174 RCL 12
13 STO 03	74 RCL 14	123 I	175 +
14 "R?"	75 /	124 +	176 RCL 06
15 PROMPT	76 -	125 SQRT	177 *
16 STO 04	77 STO 10	126 RCL 12	178 RCL 05
17 "L/2?"	78 GTO 02	127 +	179 X12
18 PROMPT		128 LH	180 /
19 STO 05	79*LBL 03	129 2	181 RCL 05
20 "H?"	80 RCL 10	130 LH	182 RCL 10
21 PROMPT	81 RCL 05	131 -	183 -
22 STO 06	82 /	132 RCL 11	184 I/X
23 "CFEED?"	83 STO 09	133 SIN	185 +
24 PROMPT		134 LH	186 RCL 03
25 STO 15	84*LBL 01	135 -	187 *
26 "CINIT?"	85 ADV	136 PI	188 RCL 06
27 PROMPT	86 FIX 2	137 /	189 *
28 STO 16	87 "T ="	138 I	190 RCL 04
29 I	88 RCL 08	139 +	191 /
30 STO 07	89 ARCL X	140 RCL 06	192 STO 14
	90 AVIEW	141 *	193 RTN
31*LBL 00	91 FIX 4	142 RCL 05	194 END
32 RCL 01	92 RCL 15	143 /	
33 RCL 07	93 RCL 16	144 RCL 05	
34 *	94 -	145 RCL 06	
35 STO 08	95 RCL 09	146 -	
36 RCL 04	96 *	147 RCL 05	
37 *	97 RCL 16	148 RCL 10	
38 PI	98 +	149 -	
39 /	99 STO 09	150 /	
40 RCL 03	100 "C ="	151 LH	
41 /	101 RCL 09	152 +	
42 RCL 05	102 ARCL X	153 RCL 03	
43 /	103 AVIEW	154 *	
44 SQRT	104 I	155 RCL 06	
45 2	105 ST+ 07	156 *	
46 *	106 RCL 02	157 RCL 04	
47 STO 09	107 RCL 07	158 /	
48 RCL 06	108 X<=Y?	159 RCL 08	
49 RCL 05	109 GTO 00	160 -	
50 /	110 GTO "BTCSH1"	161 STO 13	
51 RCL 09		162 RTN	
52 X<=Y?			
53 GTO 01			
54 0			
55 RCL 10			
56 X*Y?			
57 GTO 02			
58 RCL 09			
59 RCL 05			
60 *			
61 STO 10			

APPENDIX 2. REKENVOORBEELD MET STOFTRANSPORT ONDER INVLOED VAN REGIONALE STROMING



APPENDIX 2 (vervolg)

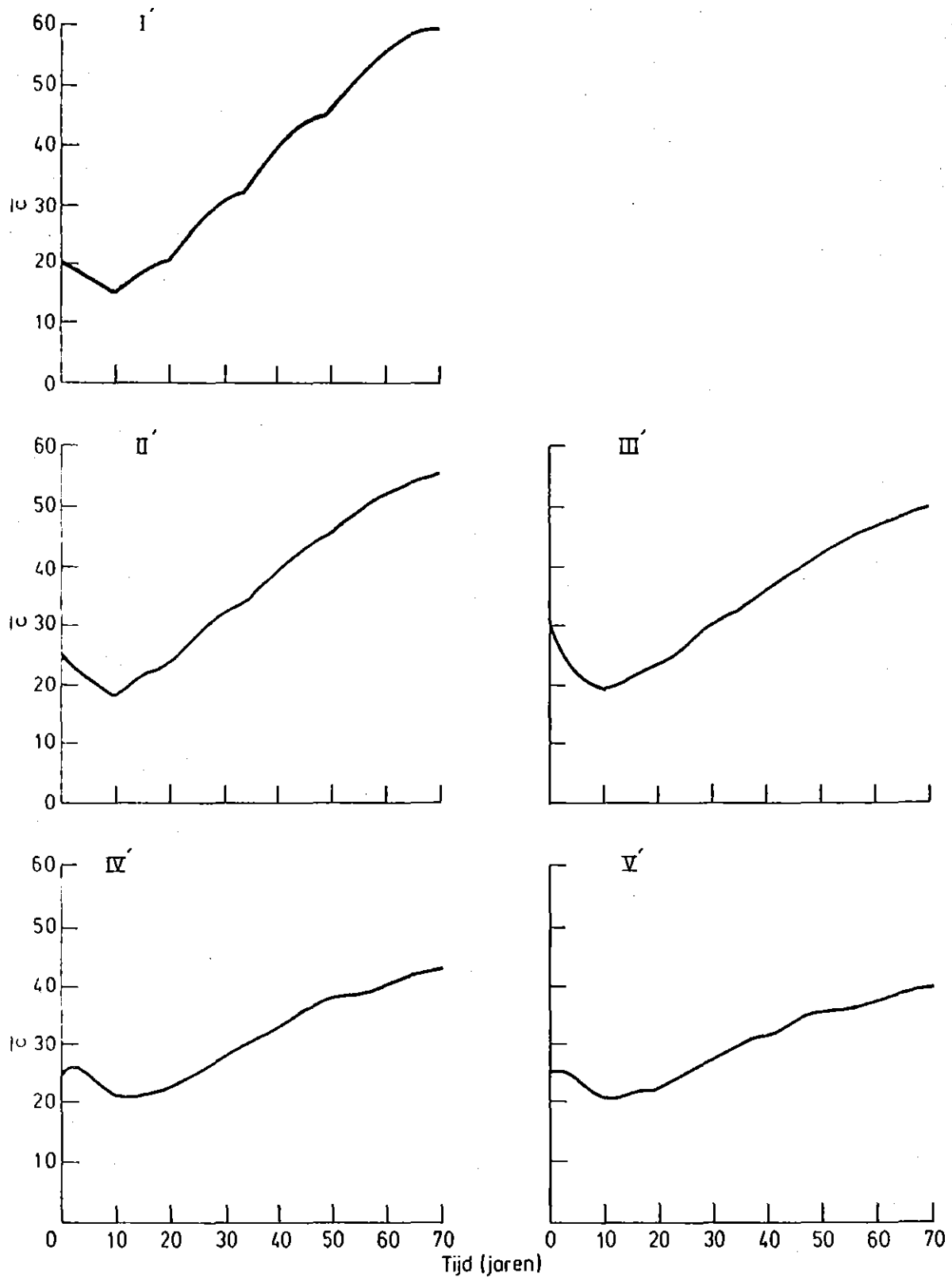


Fig. 2-1. Gemiddelde concentraties op de aangegeven doorsneden in het freatisch pakket

APPENDIX 3. TAYLORREEKS ONTWIKKELING VAN ENKELE CONCENTRATIETERMEN

1. Dimensionaal

- Achterwaarts:

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{c(x,t) - c(x-\Delta x,t)}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{2!} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \frac{\partial^3 c}{\partial x^3} + \dots \quad (3-1)$$

- Voorwaarts:

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{c(x+\Delta x,t) - c(x,t)}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{2!} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \frac{\partial^3 c}{\partial x^3} + \dots \quad (3-2)$$

- Impliciet:

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{c(x,t) - c(x,t-\Delta t)}{\Delta t} + \frac{\Delta t}{2!} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{(\Delta t)^2}{3!} \frac{\partial^3 c}{\partial t^3} + \dots \quad (3-3)$$

- expliciet:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{c(x,t+\Delta t) - c(x,t)}{\Delta t} + \frac{\Delta t}{2!} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{(\Delta t)^2}{3!} \frac{\partial^3 c}{\partial t^3} - \dots \quad (3-4)$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t} \left(-u \frac{\partial c}{\partial x} + D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) \quad (3-5)$$

Als transport domineert over dispersie: $D \approx 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} &= -u \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right) = -u \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) = -u \frac{\partial}{\partial x} \left(-u \frac{\partial c}{\partial x} + D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) = \\ &= u^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (3-6)$$

2. Dimensionaal

$$\frac{c(x,y,t) - c(x-\Delta x,y,t)}{\Delta x} = \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{\Delta x}{2!} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{(\Delta x)^2}{3!} \frac{\partial^3 c}{\partial x^3} - \dots \quad (3-7)$$

APPENDIX 3 (vervolg)

$$\frac{c(x, y, t) - c(x, y - \Delta y, t)}{\Delta x} = \frac{\partial c}{\partial y} - \frac{\Delta y}{2!} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{(\Delta y)^2}{3!} \frac{\partial^3 c}{\partial y^3} - \dots \quad (3-8)$$

$$\frac{c(x + \Delta x, y, t) - 2c(x, y, t) + c(x - \Delta x, y, t))}{(\Delta x)^2} = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + 2 \frac{(\Delta x)^2}{4!} \frac{\partial^4 c}{\partial x^4} + \dots \quad (3-9)$$

$$\frac{c(x, y + \Delta y, t) - 2c(x, y, t) + c(x, y - \Delta y, t))}{(\Delta y)^2} = \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + 2 \frac{(\Delta y)^2}{4!} \frac{\partial^4 c}{\partial y^4} + \dots \quad (3-10)$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t} \left(-u_x \frac{\partial c}{\partial x} - u_y \frac{\partial c}{\partial y} + D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right)$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial t^2} = -u_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) - u_y \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right)$$

$$= -u_x \frac{\partial}{\partial x} \left(-u_x \frac{\partial c}{\partial x} - u_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) - u_y \frac{\partial}{\partial y} \left(-u_x \frac{\partial c}{\partial x} - u_y \frac{\partial c}{\partial y} \right)$$

$$= u_x^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + 2u_x u_y \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial y} + u_y^2 \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \quad (3-11)$$

$$\begin{aligned} c(x + \Delta x, y + \Delta y, t) &= c(x, y, t) + \Delta x \frac{\partial c}{\partial x} + \Delta y \frac{\partial c}{\partial y} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \\ &+ \frac{(\Delta y)^2}{2!} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \dots \end{aligned} \quad (3-12)$$

$$\begin{aligned} c(x - \Delta x, y + \Delta y, t) &= c(x, y, t) - \Delta x \frac{\partial c}{\partial x} + \Delta y \frac{\partial c}{\partial y} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \\ &+ \frac{(\Delta y)^2}{2!} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \end{aligned} \quad (3-13)$$

APPENDIX 3 (vervolg)

$$\begin{aligned}
 c(x+\Delta x, y-\Delta y, t) = & c(x, y, t) + \Delta x \frac{\partial c}{\partial x} - \Delta y \frac{\partial c}{\partial y} + \frac{(\Delta y)^2}{2!} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \\
 & + \frac{(\Delta y)^2}{2!} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}
 \end{aligned}
 \tag{3-14}$$

$$\begin{aligned}
 c(x-\Delta x, y-\Delta y, t) = & c(x, y, t) - \Delta x \frac{\partial c}{\partial x} - \Delta y \frac{\partial c}{\partial y} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \\
 & + \frac{(\Delta y)^2}{2!} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}
 \end{aligned}
 \tag{3-15}$$

APPENDIX 4. SIMULATIE VAN DE VOORTSCHREIDING VAN EEN Cl^- FRONT BIJ
GEBRUIK VAN EEN PSEUDO 2-DIMENSIONALE REKENWIJZE

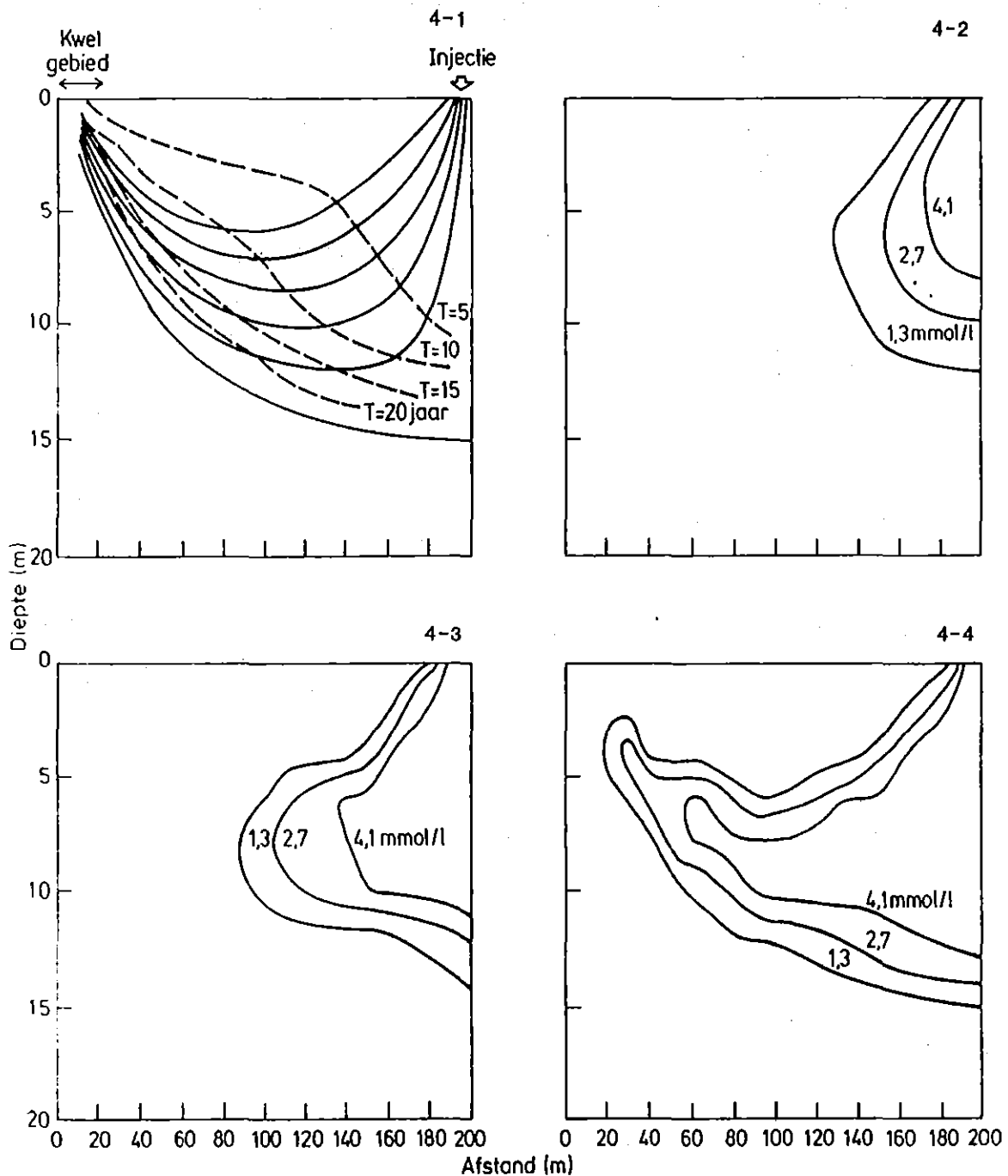


Fig. 4-1. Stroomlijnenpatroon met isochronen bij injectie van
gebiedsvreemd water

Fig. 4-2. Voortschreiding van het front na 5 jaar

Fig. 4-3. Voortschreiding van het front na 10 jaar

Fig. 4-4. Voortschreiding van het front na 25 jaar