Stoftransportmodellering: gebruik van afgeleide grootheden

MARCEL BOEREFIJN, GRONTMIJ ADVIES & TECHNIEK
LIDWIEN BESSELINK, BODEM+
FRANK VLIEGENTHART, GRONTMIJ ADVIES & TECHNIEK

De concentraties stof welke met een stoftransportmodel berekend worden op puntniveau, hebben vaak een geringe betrouwbaarheid en zijn ook niet altijd relevant voor de beleidsmatige beoordeling van de modelresultaten. In dit artikel wordt daarom een bruikbaar en relatief simpel alternatief beschreven, waarbij gebruik wordt gemaakt van 'afgeleide grootheden'. Voorbeelden hiervan zijn het oppervlak van de verontreiniging en de aanwezige vracht aan verontreiniging. Afgeleide grootheden zijn minder gevoelig voor lokale heterogeniteiten, geven een goede indruk van de (gemiddelde) verspreiding en omvang van de verontreiniging én maken een goede afweging mogelijk tussen de doorgerekende modelvarianten. De toepassing van afgeleide grootheden zal aan de hand van een uitgevoerd onderzoek worden toegelicht.

Bij hydrologisch en milieukundig onderzoek wordt reeds tientallen jaren gebruik gemaakt van numerieke grondwaterstromingsmodellen. Door een combinatie van voortschrijdende kennis op het gebied van stofgedrag, biologische afbraak, een gewijzigde vraagstelling en snelgroeiende computercapaciteit worden de resultaten van een grondwatermodel steeds frequenter gekoppeld aan een stoftransportmodel. Met zo'n model kan de verplaatsing van een (verontreinigende) stof in de bodem worden gesimuleerd. Daarbij kan, afhankelijk van de modelcode, het effect van transportprocessen als dispersie, afbraak, dichtheidsstroming, complexvorming en/of adsorptie worden meegenomen.

De uitkomst van een numeriek stoftransportmodel bestaat uit een berekende stofconcentratie per modelcel en geselecteerde tijdstap. In de praktijk blijkt echter dat deze berekende (punt)concentraties veelal een geringe betrouwbaarheid hebben. De oorzaak hiervan zit doorgaans in de beperkte overeenkomst tussen de heterogene veldsituatie en de homogene en vlakdekkende parameters van het stoftransportmodel. In een aantal gevallen zijn de berekende concentraties (op puntniveau) bovendien niet eens relevant voor de beoordeling van de modelresultaten.

Heterogene veldsituatie

De omvang en de snelheid van het transport van een bepaalde stof wordt bepaald door een groot aantal bodemeigenschappen. Enkele hiervan zijn de zuurgraad, doorlaatfactor, concentratie aan electronenacceptoren, bodemtemperatuur, gehalte organische koolstof, lutumgehalte en de aanwezigheid van overige opgeloste en geadsorbeerde stoffen. Om inzicht te krijgen in deze bodemeigenschappen wordt in de praktijk overwegend gebruik gemaakt van lokale punt- of lijnwaarnemingen zoals boringen, sonderingen, peilbuismetingen en analyses van bodem- en grondwatermonsters.

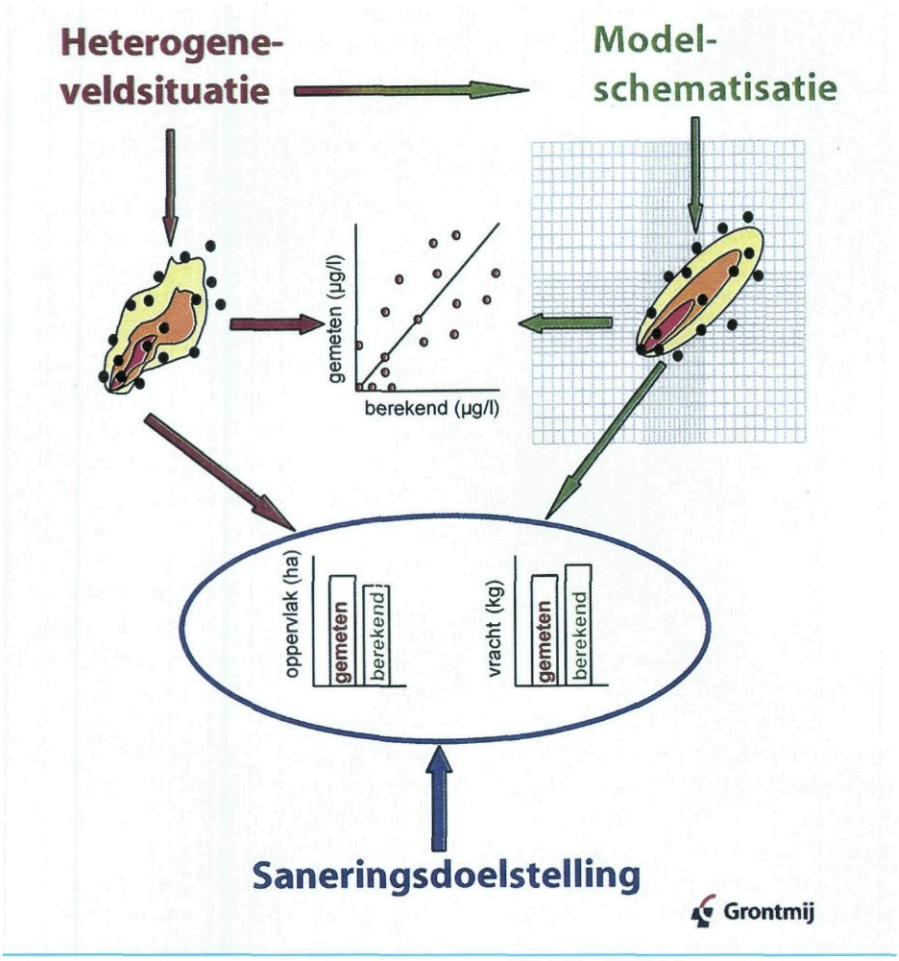
Gebleken is echter dat de bodem meestal een sterk heterogeen karakter vertoond: op een afstand van enkele (deci)meters kan er sprake zijn van geheel andere bodemeigenschappen[6]. Hierdoor kunnen de op punt/lijn-niveau waargenomen bodemeigenschappen en de waargenomen concentraties aan verontreiniging in grond en grondwater niet per definitie representatief worden verondersteld voor hun directe omgeving. Daarnaast kan ook de monstername en analyse fouten veroorzaken waarvan de omvang in grote mate onzeker is[5]. Waargenomen bodemeigenschappen en stofconcentraties worden dus gekenmerkt door een zekere mate van onbetrouwbaarheid en zijn slechts representatief voor een beperkt gebied. Bij de modelschematisatie en de analyse van de modeluitkomsten dient hiermee rekening te worden gehouden.

Modelschematisatie

Afhankelijk van de complexiteit van de optredende bodemprocessen moet een stoftransportmodel worden 'gevoed' met een groot aantal invoerparameters (onder andere bodemeigenschappen). Bij een heterogene bodem is het echter, mede in verband met de hoge kosten, praktisch gezien niet mogelijk om van het gehele modelgebied exacte waarden voor alle invoerparameters te bepalen. In de praktijk blijkt dan ook dat de benodigde data veelal slechts in beperkte mate aanwezig zijn. Als bij de modellering geen gebruik wordt gemaakt van een (tijdrovende) stochastische techniek zal één en ander resulteren in een homogene en vlakdekkende modelinvoer. Om deze reden mag van een stoftransportmodel op puntniveau veelal geen betrouwbare voorspelling van de berekende stofconcentraties worden verwacht.

Bovenstaande kan eenvoudig worden aangetoond middels stoftransportberekeningen, waarbij de huidige situatie wordt gekalibreerd en het moment van ontstaan van de verontreiniging als startpunt van de modelberekening is gehanteerd. Voor bepaling van het kalibratieresultaat wordt daarbij doorgaans gekeken naar de verschillen tussen gemeten en berekende concentraties. Gelet op de beperkte overeenkomst tussen de heterogene veldsituatie en de homogene modelschematisatie zal dit in de meeste gevallen een grote bandbreedte en slechts een matige fit opleveren (afbeelding 1).

In deze situaties is het daarom beter om gebruik te maken van 'afgeleide grootheden' waarbij random afwijkingen (meetfouten, lokale heterogeniteiten en toevalstreffers) worden 'weggemiddeld'. Voorbeelden van 'afgeleide grootheden' zijn het pluimoppervlak, de aanwezige stofvracht of de lengte van de verontreinigingspluim. Doordat deze afgeleide grootheden zijn gebaseerd op een middeling van de waargenomen concentraties, hebben ze overwegend een grotere betrouwbaarheid dan elke afzonderlijke stofconcentratie[3] (bij beschikbaarheid van voldoende metingen). Bovendien, en dit is wellicht het meest belangrijk, kunnen de afgeleide grootheden veelal direct vertaald en gekoppeld worden aan gestelde saneringsdoelstellingen (afbeelding 1). Hierop wordt bij het uitgewerkte praktijkvoorbeeld nader ingegaan.



Afb. 1: Schematische weergave van het in dit artikel beschreven principe.

Praktijkvoorbeeld

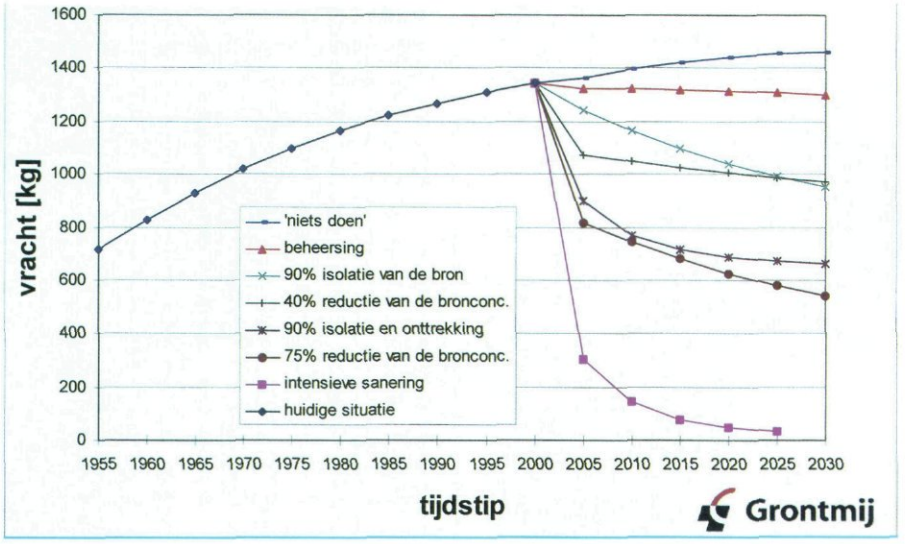
Het gebruik van afgeleide grootheden, gekoppeld aan saneringsdoelstellingen, is recent toegepast bij de modellering van de verspreiding nabij de NS-locatie 'Vetgasfabriek Amersfoort'[4]. Het betreft een grondwaterverontreiniging van overwegend BTEX (benzeen, tolueen, ethylbenzeen en xylenen) en naftaleen in zowel het eerste als het tweede watervoerende pakket. In het eerste watervoerende pakket is sprake van een overwegend noordoostelijke grondwaterstroming. Typerend voor de locatie is echter het uitwiggen van de scheidende Eemklei-laag tussen beide watervoerend pakketten in het zuidwestelijk deel van de locatie (afbeelding 4). Dit resulteert voor het eerste watervoerend pakket in een waterscheiding ter plaatse van het brongebied. Hierdoor vindt in zuidwestelijke richting tevens direct verspreiding plaats naar het onderliggende pakket ten gevolge van het ontbreken van de Eemklei. In het tweede watervoerend pakket verspreidt de verontreiniging zich momenteel meer naar het noorden.

Vanuit het beleidskader zijn voor de locatie Vetgasfabriek door het kernteam (Stichting Bodemsanering NS samen met enkele adviesbureaus) enkele mogelijke saneringsdoelen ontwikkeld. Dit gebeurde tijdens intensief overleg tussen de direct betrokkenen (bevoegd gezag, ministerie van VROM, gemeente, omwonenden en NS Vastgoed). Voor elke saneringsvariant moet antwoord gegeven worden op de volgende vragen: hoeveel vrachtverwijdering (kg) en emissiereductie vanuit de bron treedt op (kg/jaar), hoeveel schoon bodemvolume wordt gecreëerd (ha) en wordt een 'stand-still' situatie bereikt met betrekking tot de omvang van de verontreiniging (pluimoppervlak)?

De mogelijke saneringsdoelstellingen hebben dus niet zozeer betrekking op de berekende concentratie op een bepaalde locatie en op een zeker tijdstip als wel op de afgeleiden daarvan (ontwikkeling van vracht en oppervlak in de tijd). Om de vier bovenstaande vragen te kunnen beantwoorden is allereerst een grondwaterstromingsmodel opgezet met behulp van MODFLOW. Vervolgens is voor zowel benzeen als naftaleen met behulp van RT3D een stoftransportmodel gemaakt. Voor het opzetten van de modellen en aansturing van bovenstaande programma's is gebruik gemaakt van de grafische schil GMS[1]. Met behulp van de twee verspreidingsmodellen zijn de beschouwde saneringsvarianten doorgerekend, waarbij per variant de modelresultaten zijn beoordeeld op de criteria vrachtverwijdering, emissiereductie, schoon bodemvolume en pluimoppervlak. Mede op basis van deze beoordeling zijn weer nieuwe saneringsvarianten ontwikkeld, doorgerekend en beoordeeld.

Het voorbeeld in dit artikel handelt over de stof naftaleen. Het verontreinigde oppervlak met concentraties boven de interventiewaarde bedraagt voor deze stof in het eerste en tweede watervoerend pakket respectievelijk

Afb. 2: Omgeving NS-station Amersfoort (foto: Studio Honing bv).



Afb. 3: Ontwikkeling in de tijd van een afgeleide grootheid (opgeloste vracht) voor verschillende saneringsvarianten.

12 en 7,5 ha. De opgeloste vracht (gebaseerd op vrachtberekeningen)[2] betreft voor het eerste en tweede watervoerend pakket respectievelijk circa 1.350 en 150 kg. De emissie van naftaleen uit het brongebied is gebaseerd op dezelfde vrachtberekening en bedraagt circa 120 kg/jaar.

Voor de uitvoering van (voorspellende) stoftransportberekeningen is het van belang om in eerste instantie het ontstaan van de momenteel aanwezige verontreinigingspluim zo goed mogelijk te verklaren. Om deze reden is allereerst een basismodel voor het stoftransport opgezet voor de periode 1950-2000. Met dit model is een gevoeligheidsanalyse uitgevoerd die aangeeft in welke mate onzekerheden in de modelinvoer doorwerken in de berekende modeluitkomsten (vracht, pluimoppervlak en bronemissie). Vervolgens is het model gekalibreerd. Hierbij is, overeenkomstig de mogelijke saneringsdoelstellingen, gestreefd naar een optimale overeenkomst tussen de gemeten en berekende afgeleide grootheden (vracht, pluimoppervlak en bronemissie) voor het jaar 2000.

Uiteindelijk zijn voor zeven saneringsvarianten voorspellende berekeningen uitgevoerd voor de periode 2000-2030. Een voorbeeld van de resultaten is te zien in afbeelding 3. Hieruit blijkt dat met behulp van afgeleide grootheden de effecten van verschillende saneringsvarianten goed met elkaar kunnen worden vergeleken. Bij de vertaling van de met RT3D berekende stofconcentraties per modelcel en per tijdstap (afbeelding 4) naar afgeleide grootheden is gebruik gemaakt van het programma CONvert.

Conclusies en aanbevelingen

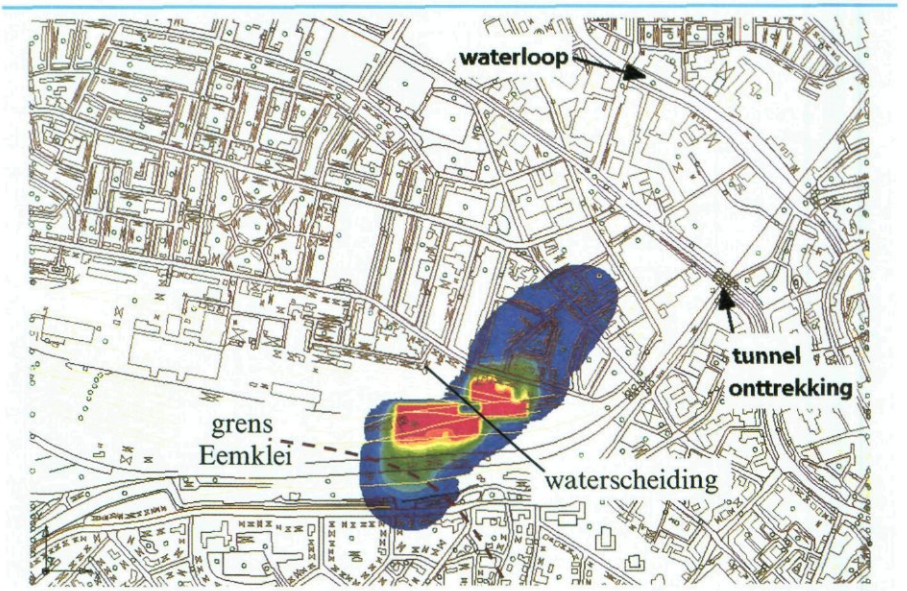
Lokaal gemeten concentraties zijn veelal sterk afhankelijk van lokale heterogeniteiten waarover meestal onvoldoende (veld)metingen bekend zijn. In verband hiermee zullen bij een stoftransportmodellering de berekende puntconcentraties veelal een geringe betrouwbaarheid hebben. De in dit artikel gepresenteerde afgeleide grootheden zijn minder gevoelig voor lokale heterogeniteiten, geven een goede indruk van de (gemiddelde) verspreiding en omvang van de verontreiniging en zijn veelal beter toepasbaar voor relevante beleidskeuzes.

Presentatie van modeluitkomsten in de vorm van afgeleide grootheden maakt een meer eenvoudige beoordeling van doorgerekende saneringsvarianten mogelijk. Een afgeleide grootheid bevat immers meer informatie dan een afzonderlijk berekende puntconcentratie. Voorwaarde is wel dat deze grootheden (vracht, oppervlakte en bronemissie) op een verantwoorde wijze kunnen worden berekend met de beschikbare veldgegevens.

In enkele gevallen zal sprake zijn van een relatief homogene veldsituatie met bekende bodemeigenschappen, grondwaterstroming, verontreinigingsbron etc. In deze gevallen kan een goede overeenkomst gerealiseerd worden tussen de veldsituatie en de modelschematisatie. In dat geval heeft het gebruik van afgeleide grootheden mogelijk minder voordelen. Daarnaast zijn afgeleide grootheden niet toepasbaar indien de saneringsdoelstelling betrekking heeft op een te bereiken concentratieniveau nabij een lokaal beschermd object. In deze situaties wordt juist wel gekeken naar de modelmatige voorspelling van een stofconcentratie op een bepaalde locatie.

Zeker in het geval van heterogene bodemeigenschappen dient dan wel terdege rekening gehouden te worden met de geldende onzekerheden.

LITERATUUR

1) Department of Defense (1999). Groundwater Modeling System version 3.0.
2) DHV (1997). Vetgasfabriek Amersfoort. Vrachtbenadering.
3) French H. (1999). Transport and degradation of deicing chemicals in a heterogeneous unsaturated soil. Thesis for Department of Soil and Water Sciences, Agrucultural University of Norway.
4) Grontmij (2000). Vetgasfabriek Amersfoort. Grondwater- en stoftransportmodellering.
5) NOBIS (1997). Ontwikkeling van een beslismodel ten behoeve van de acceptatie van natuurlijke afbraak als saneringsvariant, fase 1: modelleren. NOBIS 97-1-02.
6) Van der Schuit N., S. Vriend en J. Hoogendoorn (1989). Een fundamenteel onderzoek naar een optimale bemonsteringsdichtheid voor ondiep grondwater. H_2O nr. 24.

Afb. 4: RT3D berekeningsresultaat voor variant 'niets doen' (autonome ontwikkeling) voor het eerste watervoerend pakket (zichtjaar 2030).