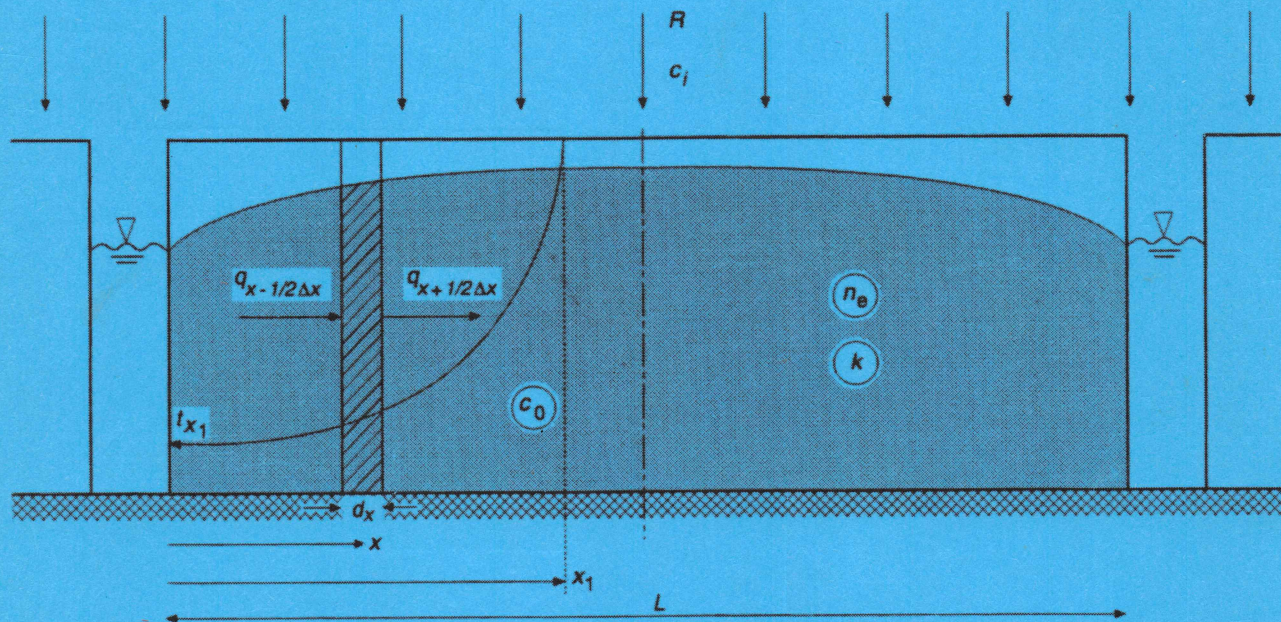


grondwaterstroming en -kwaliteit



R.W.R. Koopmans



WAGENINGEN UNIVERSITEIT
OMGEVINGSWETENSCHAPPEN

Grondwaterstroming en -kwaliteit

R.W.R. Koopmans

Wageningen, september 2000

Sectie Waterhuishouding
Universiteit Wageningen

© Zesde uitgave, tweede druk (50 exemplaren), 2000. Sectie Waterhuishouding, Universiteit Wageningen.

Illustraties: A. van 't Veer, P. Kostense en J. van Brakel.

Reproductie van dit dictaat of een aanzienlijk deel ervan ten behoeve van onderwijsdoeleinden, is alleen toegestaan na schriftelijke toestemming van de sectie Waterhuishouding.

Geschiedenis van dit dictaat:

Titel van de eerste uitgave: Waterkwaliteit, de invloed van mengings- en transportprocessen

Titel van de tweede uitgave: Waterkwaliteit in grondwaterstromingsstelsels

Eerste tot en met vijfde uitgave (600 exemplaren): 1975, 1985, 1990, 1992, 1994.

Zesde uitgave, eerste druk (50 exemplaren): 1999

INHOUDSOPGAVE**pag.**

0 VOORWOORD	v
1 GRONDWATER	1
1.1 Water in de bodem	1
1.1.1 Inleiding	1
1.1.2 De betekenis van grondwater voor de mens	4
1.2 Bodemkundige en landschappelijke indicaties	6
1.2.1 Algemeen	6
1.2.2 Grondwatertrappen	7
1.3 Vectoren en scalaire grootheden	8
1.3.1 Inleiding	8
1.3.2 Vectoralgebra	9
1.3.2.1 Vector operaties in termen van de componenten	11
1.3.3 Variatie van een scalaire functie in de ruimte	13
1.3.4 Differentiaaloperaties met vectoren	17
1.4 Krachten in een vloeistof	18
1.5 De energietoestand van grondwater	24
1.5.1 Inleiding	24
1.5.2 De drijvende kracht	24
1.5.3 Energie en potentiaal	25
1.5.4 De stijghoogte	30
1.5.5 Het druk-equivalent van de potentiaal	32
1.5.6 De kinetische energie van grondwater	32
1.6 De beweging van grondwater	33
1.6.1 De wet van Darcy	33
1.6.2 De effectieve- of poriesnelheid	37
1.6.3 Een andere formulering van de wet van Darcy	38
1.7 De continuüm benadering van poreuze media	40
1.8 De bepaling van de doorlatendheid	43
1.8.1 Laboratoriummethoden	43
1.8.2 Veldmethoden	45
1.8.3 Correlatiemethoden	49
2 DIFFERENTIAALVERGELIJKINGEN EN DE BEREKENING VAN GRONDSTROMING	53
2.1 Inleiding	53
2.2 Het continuïteitsbeginsel en de balansvergelijking	54
2.3 De vergelijking van Laplace	58
2.3.1 Algemeen	58
2.3.2 Vereenvoudigingen bij de afleiding van de Laplace-vergelijking	59
2.4 Equipotentiaallijnen en stroomlijnen	60
2.5 Bergend vermogen	64
2.6 De berekening van grondwaterstromingen	68
2.6.1 Inleiding	68
2.6.2 Berekeningsmethoden	69
2.6.3 Vereenvoudiging van het stroombeeld, veronderstelling van Dupuit	70
2.7 Eenvoudige voorbeelden van stationaire stroming	75
2.7.1 Stationaire stroming tussen twee kanalen	75
2.7.2 Stationaire ontwateringsstroming naar twee evenwijdige sloten	77

2.7.2	Stationaire ontwateringsstroming naar twee evenwijdige sloten	77
2.7.3	Stroming naar een put in afgesloten grondwater	79
2.7.4	Kwel in een polder	81
2.8	Randvoorwaarden	83
2.9	Niet-stationaire stroming van grondwater tussen evenwijdige leidingen	84
3	CONVECTIEF TRANSPORT	89
3.1	Inleiding	89
3.2	Convectie	90
3.2.1	De bewegingsvergelijking	90
3.2.2	De convectievergelijking	90
3.3	De berekening van reistijden	93
3.3.1	De verblijftijd bij eendimensionale stroming	93
3.3.2	Verblijftijden in systemen met verschillen in reistijd	96
3.3.2.1	Oplossingen met behulp van numerieke methoden	96
3.3.2.2	Analytische oplossingen	97
3.4	De invloed van verspreide bronnen van verontreiniging op de kwaliteit van grondwater	101
3.5	De invloed van de dichtheid	105
4	MENGINGSPROCESSEN EN TRANSPORTVERGELIJKINGEN	111
4.1	Menging	111
4.1.1	Inleiding	111
4.1.2	De water- en zoutbalans van een volledig gemengd reservoir	112
4.2	Diffusie	115
4.3	Dispersie	120
4.3.1	Dispersie in enkelvoudige systemen	120
4.3.2	Dispersie in samengestelde systemen	122
4.3.3	De dispersiecoëfficiënt	122
4.4	Beweging van niet-conservatieve stoffen	125
4.4.1	Adsorptie en ionen-uitwisseling	125
4.4.2	Afbraak door chemische en biologische omzetting	130
4.5	De differentiaalvergelijkingen voor het transport van stoffen	133
4.5.1	Transport met dispersie en diffusie van een conservatieve stof	133
4.5.2	Transport met dispersie en diffusie van een niet-conservatieve stof	134
4.6	Stoftransport in een kolom	136
4.6.1	Inleiding	136
4.6.2	Oplossingen voor ontziltling en verziltling	137
4.6.2.1	Algemeen	137
4.6.2.2	Een andere randvoorwaarde	139
4.7	Schaalproblemen bij de modellering van grondwaterstroming en stoftransport	141
5	NUMERIEKE OPLOSSINGEN VAN GRONDWATERSTROMING EN TRANSPORT	143
5.1	Systemen en modellen	143
5.1.1	Systemen	143
5.1.2	Modellen	144
5.2	De eindige differentiebenadering	147
5.3	Voorbeelden van differentievergelijkingen	151
5.3.1	Differentievergelijkingen voor verzadigde grondwaterstroming	151
5.3.2	Differentievergelijkingen voor de convectievergelijking	154

5.4 Oplossingsmethoden voor stelsels differentievergelijkingen	157
5.5 Modelleren van de convectie-dispersievergelijking in twee dimensies	158
5.5.1 Inleiding	158
5.5.2 De numerieke oplossing van de convectie-dispersie vergelijking	159
5.5.3 Het model MOC	163
6 ZOET EN ZOUT GRONDWATER	165
6.1 Het grensvlak tussen zoet en zout water	165
6.1.1 Inleiding	165
6.2.1 Het beginsel van Badon Ghyben en Herzberg	167
6.2 Winning van water uit kustgebieden	168
7 DE KWALITEIT VAN HET GRONDWATER IN NEDERLAND	173
7.1 Inleiding	173
7.2 Verontreinigende stoffen in het grondwater	174
7.2.1 Stoffen voornamelijk afkomstig uit diffuse bronnen	174
7.2.2 Stoffen, voornamelijk afkomstig uit puntbronnen	176
7.3 De verontreiniging van het grondwater in Nederland	178
7.4 Hydrologische afscherming	185
BIJLAGE I	187
I.1 Arbeid en energie	187
BIJLAGE II	192
II.1 De lineaire differentiaalvergelijking van de eerste orde	192
BIJLAGE III Ontziltling door diffusie	195
III.1.1 Differentiaalvergelijking en randvoorwaarden	195
III.1.2 Oplossing via substitutie van Boltzmann	195
III.2.1 De flux-voorwaarde bij $x = 0$	198
BIJLAGE IV Numerieke dispersie als vervanging voor fysische dispersie	200
IV.1 Stofftransport in een kolom	200
BIJLAGE V Lineaire systemen en convolutie	203
V.1 Cascademodel	203
V.2 Convolutie	207
LITERATUUR	213
ANTWOORDEN VAN DE OPGAVEN	216

0 VOORWOORD

Dit dictaat bevat de leerstof voor het vak Grondwaterstroming en -kwaliteit (K150-311). Het is in de eerste plaats bedoeld voor studenten van de Wageningse studierichtingen *Milieuhygiëne* en *Bodem, Water en Atmosfeer*. Het dictaat is geschreven voor zelfstudie en kan daarom ook worden gebruikt door studenten (en afgestudeerden) van andere studierichtingen, zowel van de Wageningse universiteit als van andere universiteiten en hogescholen.

De eerste twee uitgaven van dit dictaat werden verzorgd door prof. W.H. van der Molen (thans emeritus) hoogleraar in de Agrohydrologie. Aan de tweede uitgave heeft ook dr.ir. H.C. van Ommen meegewerkt. Het dictaat behandelt een inleiding in de grondwaterstroming en het transport van opgeloste stoffen in grondwater. In de loop der jaren heeft de inhoud veel veranderingen ondergaan. Bij de derde uitgave werden de hoofdstukken over de kwaliteit van het grondwater in Nederland en over numerieke modellering toegevoegd. In de latere uitgaven is de hoofdstukindeling gewijzigd en zijn nieuwe paragrafen toegevoegd, met als doel de fundamentele onderbouwing te versterken. Het aantal opgaven, bedoeld om kennis en begrip van de bestudeerde stof te toetsen, is in de loop der tijd sterk uitgebreid.

In hoofdstuk 1 worden de grondslagen van grondwaterstroming besproken. Hier worden de begrippen potentiaal, stijghoogte, gradiënt, continuüm benadering en representatief elementair volume geïntroduceerd. Ook de empirische bewegingswet van grondwater (Darcy) en de doorlatendheid worden besproken. In hoofdstuk 2 wordt de algemene differentiaalvergelijking afgeleid door uit te gaan van het continuïteitsbeginsel. Na bespreking van het bergend vermogen worden met behulp van de Dupuit-aanname enkele eenvoudige stromingsvraagstukken berekend. In hoofdstuk 3 wordt de convectievergelijking en de berekening van reistijden in eenvoudige systemen behandeld. De eerste drie hoofdstukken zijn vooral van belang voor studenten van de studierichting Milieuhygiëne, die in hun verplichte programma een college over fysische transportverschijnselen moeten ontberen. In het volgende hoofdstuk worden mengingsmechanismen, die de beweging van opgeloste stoffen beïnvloeden, besproken en wordt de transportvergelijking toegepast op een aantal simpele, meest eendimensionale stromingen. In hoofdstuk 5 wordt een inleiding tot de numerieke oplossing van stromings- en transportproblemen behandeld, die zich beperkt tot de eindige differentie-methode. Na een korte beschouwing over zoet-zout stroming in hoofdstuk 6, wordt in hoofdstuk 7 tenslotte een overzicht gegeven van de verontreinigingstoestand van het grondwater in Nederland. Dit hoofdstuk is deels gebaseerd op een in 1989 door het Rijks Instituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiëne uitgebracht rapport, getiteld: "De kwaliteit van het grondwater in Nederland".

In deze zesde, herziene uitgave worden de spellingregels van de Nederlandse taal (1995) gebruikt. Een uitzondering vormt het gebruik van een punt voor de decimalen.

Om het examen met succes te kunnen afleggen, is het gewenst vraagstukken te oefenen. Extra vragen over hoofdstuk 1 en 2 zijn te vinden in de bundel met uitgewerkte 'sommen', die behoort bij het college *Inleiding Hydrologie* (Centraal Magazijn nr 06140108).

Voor een meer diepgaande behandeling van grondwaterstroming wordt verwezen naar het collegedictaat *Vloeistofmechanica en Grondwaterstroming* (K150-306). Numerieke methoden en grondwatermodellen (computermodellen) worden in de examenvakken K150-230 en K150-232 behandeld. Studenten die geïnteresseerd zijn in het programmeren van numerieke oplossingen, worden verwezen naar het dictaat *Numerieke oplossingen van grondwaterstromingen* (Centraal Magazijn nr 06140810).

Met nadruk wordt er op gewezen, dat grondwaterstroming in dit dictaat wordt beschouwd als een deterministisch proces, dat gebaseerd is op natuurkundige beginselen. Het stochastische karakter van transportprocessen in de bodem, voornamelijk veroorzaakt door de ruimtelijke variatie van hydraulische eigenschappen, komt hier slechts zijdelings aan de orde.

In de tweede druk van deze uitgave zijn kleine wijzigingen aangebracht in de tekst en in enkele figuren.

1 GRONDWATER

Grondwater is de belangrijkste zoetwatervoorraad op aarde. Niet verwonderlijk daarom dat de mens probeert die voorraad te beheersen. Daarvoor is echter nodig dat men begrijpt hoe de processen verlopen die de kwantiteit, de kwaliteit en de veranderingen daarvan bepalen. Voor het beschrijven van dergelijke dynamische processen is wiskunde onontbeerlijk. In paragraaf 1.3 wordt daarom eerst een aantal begrippen besproken uit de vectoralgebra, een wiskundige techniek die veel toepassing vindt bij de beschrijving van transportprocessen. In de volgende twee paragrafen wordt uitvoerig aandacht besteed aan de factoren die de energietoestand van het water bepalen. Dit is noodzakelijk om de bewegingsvergelijking, die in paragraaf 1.6 wordt besproken, te kunnen doorgronden. In de laatste paragraaf komen methoden ter sprake waarmee de doorlatendheid van gronden kan worden bepaald.

1.1 Water in de bodem

1.1.1 Inleiding

In de hydrologie is er sprake van de kringloop van het water¹⁾. Het is gebleken dat het water op aarde door middel van verdamping, neerslag en stroming in een voortdurende circulatie verkeert, waarbij het water via de atmosfeer en door stroming over en in de aardkorst wordt verplaatst. De energie die daarvoor nodig is wordt geleverd door de zon.

97% van al het zoete water op aarde bevindt zich in de grond. Grond kan worden beschouwd als een *poreus materiaal*. Kenmerkend voor een poreus materiaal is, dat in een willekeurig controlevolume een vaste fase aanwezig is, de zogenaamde matrix, die slechts een deel van het volume in beslag neemt. Kiest men het controlevolume niet te klein, dan is de ruimtelijke verdeling van de vaste fase min of meer gelijkmatig. Het overige deel wordt de poriënruimte genoemd. Deze wordt óf door vloeistof (water, aardolie) óf door vloeistof en gas (lucht, aardgas) in beslag genomen. In het eerste geval spreken we van de *verzadigde* toestand in het tweede geval van de *onverzadigde* toestand. De verhouding van het poriënvolume V_v tot het totale controlevolume V noemt men de *porositeit* of *poriënfractie* $n^2)$.

In de hydrologische kringloop blijkt de *stroming* van water door de grond een belangrijke plaats in te nemen. Om de stroming door een poreus materiaal mogelijk te maken, is het nodig dat de poriën met elkaar in verbinding staan. De vloeistof fase wordt dus als een samenhangend geheel beschouwd dat grensvlakken heeft met de gas fase en de vaste fase. Het transport van water en opgeloste stoffen in de bodem vindt plaats door de gehele poriënruimte en wordt beïnvloed, zowel

¹⁾ Zie collegedictaat *Inleiding Hydrologie*, Universiteit Wageningen.

²⁾ Zie collegedictaat *Inleiding Bodemkunde*, Universiteit Wageningen.

door de eigenschappen van de vloeistof als door de eigenschappen van de bodemmatrix.

Als er een open boorgat wordt gemaakt of een put wordt gegraven, zal daarin bij het bereiken van een bepaalde diepte spontaan grondwater stromen. Het niveau van de waterspiegel is de grondwaterstand, ook wel het *freatisch* niveau genoemd. Onder elk terreinpunt komt een grondwaterstand voor. Al deze standen tezamen vormen de grondwaterspiegel, ook wel het freatisch oppervlak genoemd.

We kunnen onderscheid maken tussen het water in de *onverzadigde zone* en in de *verzadigde zone*. De grens tussen beide zones wordt gevormd door het freatisch oppervlak. Het water in de verzadigde zone wordt *grondwater* genoemd. In de onverzadigde zone spreken we van *bodemvocht*. Beneden de waterspiegel zijn alle poriën gevuld met water. De druk van het water p , (ten opzichte van de atmosferische druk) is er positief. In de onverzadigde zone is slechts een deel van de poriën gevuld met water (het andere deel is gevuld met lucht) en overheersen in het algemeen de matrixkrachten. Dat zijn de krachten die op de waterdeeltjes worden uitgeoefend door de vaste fase¹⁾. Deze krachten binden het water aan de vaste fase. Om het daarvan los te maken moet een externe kracht worden uitgeoefend. De binding van water aan de bodemdeeltjes kan worden gemeten als een (negatieve) druk.

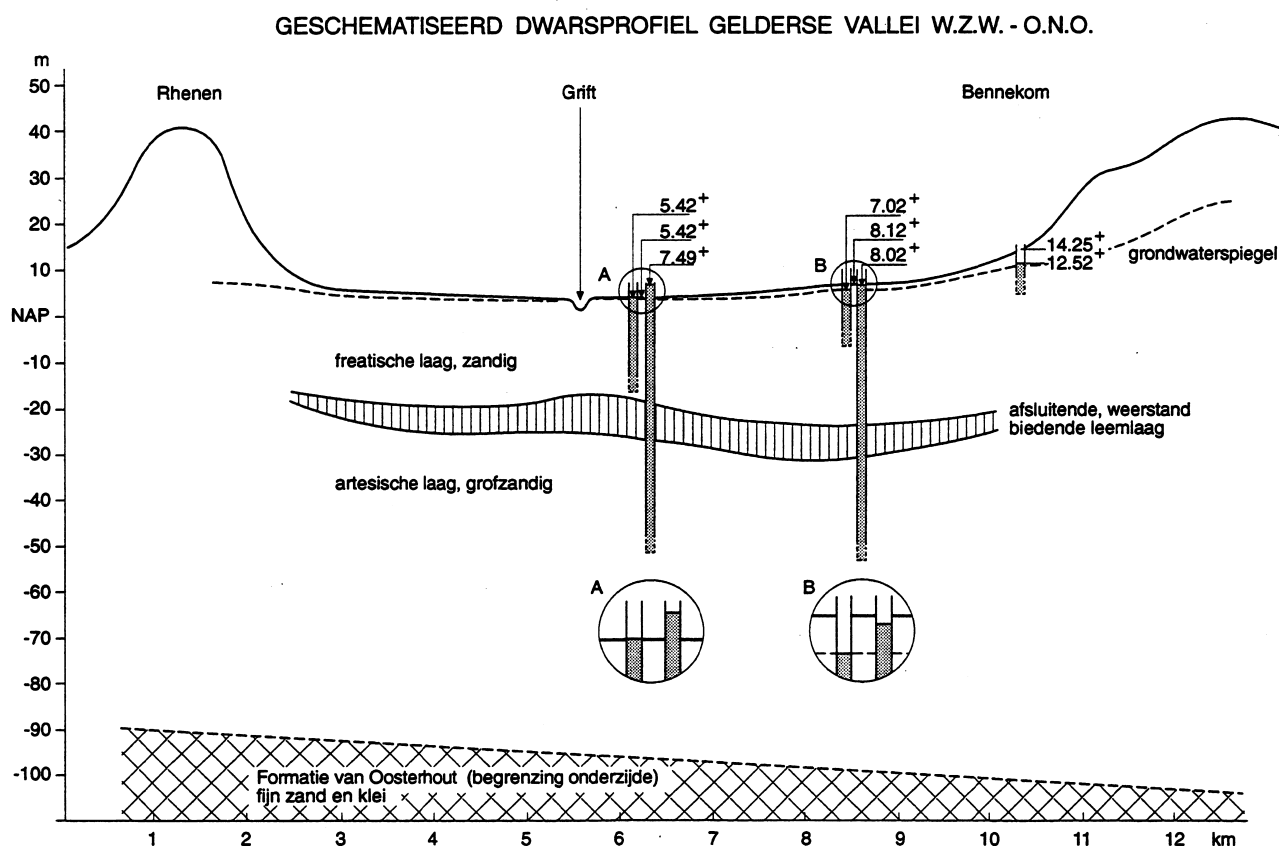
Aan het freatisch oppervlak is de absolute waterdruk gelijk aan de atmosferische druk. Het is dus een isobaar vlak (vlak met overal dezelfde druk).

Grondwater dat aan de bovenzijde begrensd wordt door een freatisch oppervlak, wordt *freatisch water* genoemd. Als aan de onder- én bovengrens van een watervoerende laag ondoorlatende lagen voorkomen, spreken we van *afgesloten grondwater*. Bevinden zich aan de onder- en bovenzijde van een watervoerende laag slecht doorlatende lagen, of één ondoorlatende en één slecht doorlatende laag, dan spreken we van *gedeeltelijk afgesloten grondwater*.

We kunnen de druk in een punt van het grondwater meten met een zogenaamde stijgbuis of piëzometer. Dat is een buis (meestal van plastic en met een doorsnede van circa 5 cm), die alleen aan de uiteinden open is. De onderkant van de buis, meestal voorzien van een filter, bevindt zich op de plaats waar we de druk willen meten. De bovenkant steekt boven het maaiveld uit en verschaft toegang voor de meting. Door de positieve druk vult de buis zich met water. De lengte van de waterkolom in de buis wordt de drukhoogte genoemd en is een directe maat voor de waterdruk. Plaatsen we een stijgbuis in (gedeeltelijk) afgesloten grondwater (zie figuur 1.1-1) dan zal het water in de buis hoger stijgen dan de bovenzijde van de watervoerende laag. We noemen zulk grondwater daarom ook wel spanningswater. Het niveau in een diepe stijgbuis zal meestal afwijken van de hoogte van de grondwaterspiegel in het bovenliggende freatisch water. In een buis

¹⁾ Zie collegedictaat *Inleiding Bodemkunde*, Universiteit Wageningen

die in (gedeeltelijk) afgesloten grondwater is geplaatst, kan het water zelfs boven het maaiveld komen. We spreken dan van *artesisch grondwater*, zo genoemd naar de regio Artois in Noordwest-Frankrijk waar dit verschijnsel voor het eerst werd beschreven. Een stijgbuis met een filter in dergelijk water levert dus spontaan water tot boven het maaiveld. In de Gelderse Vallei worden dergelijke putten gebruikt voor het drenken van vee.



Figuur 1.1-1 Stijghoogten in verschillende typen grondwater.

In de Haarlemmermeerpolder bijvoorbeeld komt op ongeveer 1 m beneden het maaiveld freatisch grondwater voor. Dit freatisch water is van groot belang voor de landbouw. Het wordt op peil gehouden door een uitgebreid systeem van landbouwdrainages, sloten en poldervaarten, waarin door bemaling een vast polderpeil wordt gehandhaafd. Het freatisch water bevindt zich in het doorlatende bovenste gedeelte van een dikke holocene kleilaag. Het diepere gedeelte van de holocene klei is een moeilijk doorlatende, semi-permeabele laag. Daaronder komt een zeer dik en goed doorlatend pakket pleistocene zanden voor. Het grondwater in dit pakket is gedeeltelijk afgesloten grondwater. De stijghoogte ervan ligt boven het polderpeil. Via de semi-permeabele lagen treedt daarom in deze polder een opwaartse waterstroming (kwel) op.

De voorraad zoet grondwater is heel groot, in Nederland is de exacte hoeveelheid niet bekend,

waarschijnlijk meer dan $750 \times 10^9 \text{ m}^3$. Dat is ruim tienmaal de jaarlijkse Rijn-afvoer of 75 maal de jaarlijkse nuttige neerslag. De gemiddelde verblijftijd is dus 75 jaar. Een groot deel verblijft veel korter in de bodem. Diep grondwater heeft vaak zeer lange verblijftijden. Zo wint het pompstation Pey (Limburg) op 120 m diepte water van 5000 jaar oud. Ouderdomsbepaling kan onder andere geschieden met ^{14}C (natuurlijke radio-actieve koolstofisotoop). Een verhoogd tritiumgehalte (^3H , halfwaardetijd is 12,5 jaar), ontstaan door atoombom-proeven in 1963-'64, is in het verleden gebruikt als aanwijzing voor betrekkelijk jong grondwater.

Elders in de wereld komen zeer grote voorraden zoet water voor. Deze zijn gevormd in vroegere, regenrijkere tijden. Als dit water wordt opgepompt voor drinkwater en bevoeiing, kan worden gesproken van 'mijnbouw', omdat de aanvulling nu zeer gering is. Naar schatting bedraagt de voorraad bruikbaar water onder de Sahara $600 \times 10^{12} \text{ m}^3$. Bij het huidige verbruik is dit voldoende voor 40.000 jaar. Overigens is niet al dit water winbaar.

In Nederland bestaat een uitgebreid net van grondwaterstandbuizen. Dat zijn geperforeerde buizen (meestal 2 à 4 m lang) die reiken tot beneden de laagste te verwachten grondwaterstand. De waterstand in de buizen wordt gewoonlijk tweemaal per maand (op de 14e en de 28e) gemeten; de meeste gegevens zijn opgeslagen in het archief van het Nederlands Instituut voor Toegepaste Geowetenschappen TNO te Delft.

Om snel een indruk te krijgen van de grondwaterstand in een gebied, zijn open boorgaten bruikbaar. Zij blijven in klei en veen goed in stand, maar lopen in zand dicht, ongeveer tot aan het freatisch niveau. Boorgaten en geperforeerde buizen zijn niet bruikbaar in slecht doorlatende gronden vanwege de lange insteltijd en de mogelijkheid van relatief grote stijghoogteverschillen over kleine afstand. Daardoor zijn zij weinig geschikt op plaatsen met een gestoorde waterhuishouding zoals plekken met zichtbare wateroverlast, die dikwijls veroorzaakt wordt door 'dichte' bodemlagen, zoals leemlagen en inspoelingslagen.

1.1.2 De betekenis van grondwater voor de mens

Zoet grondwater wordt in Nederland gebruikt in het huishouden, de industrie en de landbouw. De totale hoeveelheid grondwater die in Nederland op duurzame wijze kan worden gewonnen, wordt geschat op ruim 1900 miljoen m^3 per jaar. Grondwater vormt in Nederland de voornaamste bron voor de *drinkwatervoorziening*. De voorkeur voor grondwater vindt zijn oorzaak in de goede kwaliteit. Pathogene bacteriën en virussen komen in grondwater van nature niet voor. Ook in fysisch en chemisch opzicht is de samenstelling van grondwater meestal van dien aard dat zuivering nauwelijks nodig is. Sinds kort echter wordt de kwaliteit van het drinkwater op verscheidene plaatsen in Nederland ernstig bedreigd door de toenemende bodemverontreiniging (Duijvenbooden, 1989).

Waterleidingbedrijven zijn in West-Europa ontstaan omstreeks het midden van de negentiende eeuw. Medici hadden ontdekt dat epidemieën van cholera, tyfus, dysenterie en dergelijke in de dichtbevolkte stadswijken werden veroorzaakt door (bacteriën in) het drinkwater. Hiervoor werd dikwijls vrijwel ongezuiverd rivierwater gebruikt of werd water uit open putten getapt, zodat besmetting door fecaliën gemakkelijk kon optreden. De openbare waterleidingbedrijven hebben, omdat het geleverde water aan bepaalde bacteriologische en chemische normen moet voldoen, een grote bijdrage geleverd aan de volksgezondheid.

De *industrie* gebruikt grondwater als proces- en koelwater. Voor het proceswater is een goede kwaliteit van belang. In de papierindustrie bijvoorbeeld is de beschikbaarheid van zuiver water bepalend geweest voor de locatiekeuze van papierfabrieken. In Nederland zijn 'papiermolens' vooral ontstaan langs de relatief steile randen van de Veluwe en nog steeds bevinden zich daar belangrijke papierindustrieën. Vanaf de vroege Middeleeuwen werd het water voor de molens voornamelijk verkregen door de aanleg van kunstmatige bronnen of sprengen, die een gestage en betrouwbare aanvoer verzekerden. Het water werd vervolgens in gegraven beken met weinig hoogteverval naar de watermolens geleid, waar het werd gebruikt om energie op te wekken én als proceswater dienst deed. Op de Veluwe zijn zo in de loop der eeuwen honderden sprengen gegraven, die een groot aantal molens van waterkracht hebben voorzien. Veel molens hebben een lange staat van dienst gehad en zijn voor verscheidene industriële activiteiten gebruikt.¹⁾

Met de groei van de industriële bedrijvigheid is ook de behoefte aan grondwater sterk gestegen. Veel bedrijven zijn ertoe overgegaan eigen putten te slaan. Behalve het door de openbare waterleidingbedrijven onttrokken grondwater, dat in de industrie vooral als proceswater wordt gebruikt, worden er ook grote hoeveelheden water opgepompt door eigen waterwinningen van bedrijven. Het grootste deel hiervan wordt als koelwater gebruikt. Voor zulke onttrekkingen zijn vergunningen nodig die door de provinciale overheden worden verstrekt.

Als derde grote gebruiker staat in Nederland de *landbouw* te boek. Bij een ondiepe grondwater-spiegel (tot circa 1.5 m) kan water in het groeiseizoen langs natuurlijke weg capillair opstijgen naar de wortelzone. Ligt de waterspiegel dieper, dan wordt het kunstmatig onttrokken en voornamelijk voor beregening aangewend. In perioden van neerslagtekort ($R - ET_{act} < 0$) kan die hoeveelheid aanzienlijk oplopen; in droge jaren tot 25 à 30% van het waterleidingverbruik.

In 1995 werd door de openbare waterleidingbedrijven in Nederland 1290 miljoen m³ water afgeleverd voor huishoudens en industrie (Dufour, 1998). Ongeveer tweederde deel daarvan werd gewonnen uit grondwater, de rest kwam uit oppervlaktewater waarvan een belangrijk deel eerst (in de duinen) werd geïnfiltrerd. Door besparingscampagnes is het huishoudelijk verbruik in

¹⁾ Het gemiddelde vermogen van een watermolen met bovenslagrad komt overeen met dat van een stofzuiger.

Nederland de laatste jaren ongeveer gelijk gebleven (per hoofd van de bevolking circa 130 liter per dag). De verwachtingen zijn dat de totale levering door de waterleidingbedrijven, als gevolg van bevolkingsgroei en economische groei, zal toenemen tot 1400 miljoen m³ in 2005, terwijl de hoeveelheid grondwater weinig zal veranderen. De totale hoeveelheid grondwater die in Nederland jaarlijks wordt opgepompt voor huishoudens, industrie en agrarische sector, bedraagt nu ongeveer 1550 miljoen m³ (Dufour, 1998).

In het zuidwesten van de Verenigde Staten (woestijnklimaat) worden grote hoeveelheden diep grondwater opgepompt, onder andere voor de bevoeiing van citrusboomgaarden. Deze vorm van mijnbouw heeft tot gevolg dat het freatisch vlak ter plaatse in enkele decennia meer dan 100 m is gedaald. Ook op andere plaatsen in de wereld (Midden-Oosten, Afrika, Azië en Australië) neemt door de *toenemende vraag* de beschikbare voorraad grondwater af. De toenemende vraag wordt voornamelijk veroorzaakt door de bevolkingsgroei en het streven naar meer welvaart. Daardoor stijgt de vraag naar water voor irrigatie, de industrie en het huishouden. In een aantal landen heeft dit al geleid tot een acute watercrisis. In 1994 werd op de aarde ruim $6.1 \cdot 10^{10}$ m³ grondwater gewonnen uit watervoerende lagen die niet of nauwelijks worden aangevuld. Dit heeft tot gevolg dat de zeespiegel met 0.2 mm per jaar stijgt.

1.2 Bodemkundige en landschappelijke indicaties

1.2.1 Algemeen

Hoge grondwaterstanden, dat wil zeggen: grondwaterstanden op geringe diepte onder het maaiveld, zijn in het landschap zichtbaar door de aanwezigheid van veel beekjes, sloten en greppels. Ook de vegetatie geeft aanwijzingen. De zogenaamde blauwgraslanden bijvoorbeeld zijn vochtige graslanden (natte hooilanden) met ondiepe grondwaterstanden, terwijl veengebieden zijn ontstaan onder zeer natte omstandigheden. De afwezigheid van natuurlijke of kunstmatige ontwateringsmiddelen (bijvoorbeeld in grote delen van de Veluwe) duidt op een diepe grondwaterstand.

In het bodemprofiel kunnen we de laagste grondwaterstand aflezen aan de aanwezigheid van totale reductie. De niet-geaëreerde horizont is meestal herkenbaar aan de kleur. Bij mineraal materiaal donkergrijs of blauwzwart (klei) of grijs (zand); bij moerig materiaal, dat veen bevat, is de kleur bruin tot donkerbruin. Vaak zijn de kenmerken moeilijk te zien en zijn er overgangszones waar afwisselend reductie en oxidatie plaatsvindt. Hierdoor worden ijzer- en mangaanvlekken gevormd en verandert de kleur van moerig materiaal in grijs tot donkergrijs. De kleurkenmerken kunnen bovendien overblijfselen zijn van toestanden uit het verleden. Daarom is controle via grondwaterstandmetingen steeds noodzakelijk.

De diepte van de grondwaterspiegel beneden maaiveld wordt op de bodemkaarten van Nederland aangegeven met behulp van het systeem van grondwatertrappen, de zogenaamde Gt's (Cultuurtechnisch Vademecum, 1988), zie tabel 6.2-1. Men maakt daarbij gebruik van de gemiddeld hoogste (GHG) en gemiddeld laagste grondwaterstand (GLG). Deze worden berekend als het gemiddelde over tenminste 8 jaren, van de 3 hoogste respectievelijk 3 laagste gemeten grondwaterstanden per jaar.

GT	I	II	III	IV	V	VI	VII
GHG	(<20)	(<40)	<40	>40	<40	40-80	> 80
GLG	<50	50-80	80-120	80-120	>120	>120	>160

Toelichting

GT: grondwatertrap van nat (I) naar droog (VII)
 GHG: gemiddeld hoogste grondwaterstand cm beneden maaiveld
 GLG: gemiddeld laagste grondwaterstand cm - maaiveld

Voorbeelden

I: zeer nat veengrasland; natte natuurgebieden
 II: veengrasland, natte zandgronden, slecht ontwaterde polders
 III: lage zandgronden
 IV: kwelgebieden (geringe fluctuatie)
 V: goed ontwaterde polders op zeeklei
 VI: middelhoge zandgronden
 VII: hoge zandgronden

Varianten:

natte varianten I_n, II_n GHG < 15
 droge varianten II_d, III_d, V_d GHG 25-40
 VII_d GHG > 140

De natte varianten I_n en II_n zijn vooral te vinden bij natte natuurterreinen. Bij de droge varianten is in de regel de ontwatering door recent menselijk ingrijpen gewijzigd.

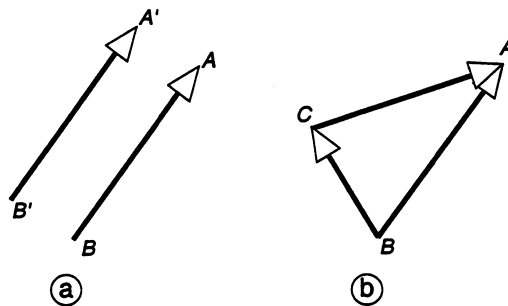
1.3 Vectoren en scalaire grootheden

1.3.1 Inleiding

Om de stroming van grondwater te beschrijven, wordt gebruik gemaakt van onderdelen uit de natuurkunde. Zoals de klassieke mechanica het evenwicht en de beweging van vaste lichamen beschrijft, zo behandelt het onderdeel *vloeistofmechanica* het evenwicht en de beweging van vloeistoffen. Is de vloeistof water het onderwerp van studie, dan spreken we van *hydrostatica* en *hydrodynamica*. Wiskunde is in de vloeistofmechanica een belangrijk hulpmiddel en in het bijzonder wordt daarbij gebruik gemaakt van de *vectoranalyse*.

De positieverandering van een deeltje noemen we de *verplaatsing*. Als een deeltje beweegt van punt B (begin) naar punt A, kunnen we de verplaatsing weergeven met een pijl van B naar A. De werkelijk afgelegde weg van het deeltje hoeft niet per se langs de pijl te zijn, het gaat om het netto effect van de verplaatsing gedurende een tijdstap Δt . Een verplaatsing B'A' in dezelfde richting en van dezelfde lengte, maar niet langs hetzelfde pad, wordt gelijk gesteld aan de verplaatsing BA (zie figuur 1.3-1a). Een verplaatsing wordt dus gekenmerkt door een lengte en een richting.

De achtereenvolgende verplaatsingen BC en CA (zie figuur 1.3-1b) hebben hetzelfde netto effect als de verplaatsing van B naar A. We zeggen, dat de som van beide verplaatsingen gelijk is aan BA.



Figuur 1.3-1 Verplaatsingsvectoren (naar Resnick, Halliday en Krane, 1992).

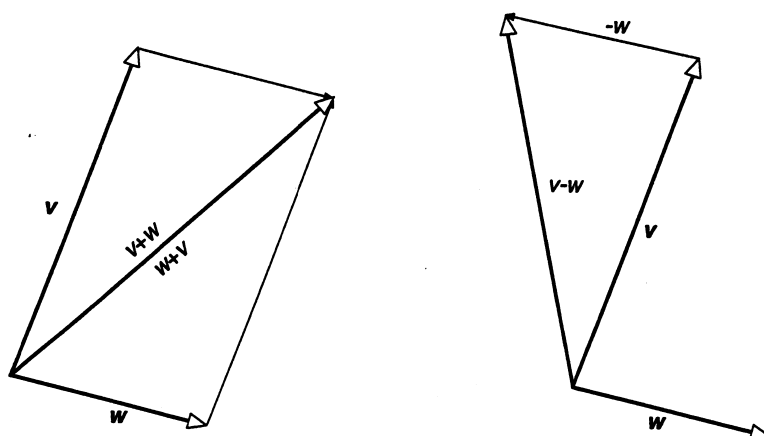
Grootheden die zich gedragen als verplaatsingen noemen we vectoren. (In het latijn betekent het woord vector 'drager'). Andere natuurkundige grootheden zoals kracht, snelheid en versnelling zijn ook een vector. Kenmerk van een vector is dat hij wordt gedefinieerd door een getalwaarde (de lengte van de vector) en een richting. Grootheden die alleen door een getal (en de bijbehorende

eenheden) worden gekarakteriseerd noemen we een *scalaire grootheid*. Voorbeelden zijn: temperatuur, druk, energie, dichtheid en concentratie.

Voor het rekenen met vectoren gelden bijzondere regels, die het mogelijk maken veel natuurkundige wetten en -principes op een eenvoudige en korte manier te noteren. Ook in dit dictaat wordt daarvan veelvuldig gebruik gemaakt. In de volgende paragrafen wordt een korte samenvatting gegeven van de basisregels van de vectoralgebra.

1.3.2 Vectoralgebra

Een vector is gedefinieerd als een pijl met een gegeven lengte en richting. Twee vectoren zijn gelijk als ze dezelfde lengte hebben en in dezelfde richting wijzen. In een coördinatenstelsel zijn we gewend de richting langs een coördinaat-as aan te geven met een plus- of minteken. Op dezelfde wijze is de vector $-v$ gelijk, maar tegengesteld van richting, aan de vector v ¹⁾. De *eenheidsvector* in een bepaalde richting heeft de lengte 1. Eenheidsvectoren worden in dit boek geschreven als e_i , waarbij het subscript i de coördinaatrichting aangeeft. In een cartesiaans coördinatenstelsel met x -, y - en z - richtingen, worden de eenheidsvectoren ook wel i , j en k genoemd. Voor de eenheidsvector loodrecht op een lijn of een vlak is het symbool n gebruikelijk. Uit het voorbeeld van figuur 1.3-1 volgt, dat voor het optellen (en aftrekken) van vectoren andere regels gelden dan voor scalaire grootheden. Omdat een vector wordt gekarakteriseerd door grootte (lengte van de pijl) en richting, wordt bij optellen en aftrekken de "staart-aan-kopmethode" of de *parallellogrammethode* gebruikt, zie figuur 1.3-2.



Figuur 1.3-2 Constructiemethoden voor optellen en aftrekken van twee vectoren.

¹⁾ Vectoren worden met vet gedrukte symbolen aangegeven.

Vectorsommatie is dus een meetkundige operatie, die gehoorzaamt aan de volgende regels:

$$\mathbf{v} + \mathbf{w} = \mathbf{w} + \mathbf{v} \quad (1.3-1)$$

$$(\mathbf{v} + \mathbf{w}) + \mathbf{u} = \mathbf{v} + (\mathbf{w} + \mathbf{u}) \quad (1.3-2)$$

De eerste regel is een zogenaamde commutatieve eigenschap, de tweede een associatieve eigenschap. $\mathbf{w}$ aftrekken van $\mathbf{v}$ gebeurt door het teken van $\mathbf{w}$ te veranderen en op te tellen:

$$\mathbf{v} - \mathbf{w} = \mathbf{v} + (-\mathbf{w}).$$

Controleer de bovenstaande regels door toepassing van de parallellogrammethode.

Bij het vermenigvuldigen van een vector met een scalaire grootte blijft de richting gelijk maar verandert de grootte. Er gelden de volgende regels:

$$a\mathbf{v} = \mathbf{v}a \quad (1.3-3)$$

$$a(b\mathbf{v}) = (ab)\mathbf{v} \quad (1.3-4)$$

$$(a + b + c)\mathbf{v} = a\mathbf{v} + b\mathbf{v} + c\mathbf{v} \quad (1.3-5)$$

In bovenstaande vergelijkingen zijn a , b en c scalaren, dat wil zeggen een getal of een scalaire functie. Vermenigvuldiging van een vector met een scalair heeft dus commutatieve, associatieve en distributieve eigenschappen.

Vectoren kunnen op twee manieren met elkaar worden vermenigvuldigd: *het inwendig en het uitwendig product*.

Het in(wendig) product is gedefinieerd als:

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{w} = |\mathbf{v}| |\mathbf{w}| \cos \phi \quad (1.3-6)$$

waarin $|\mathbf{v}|$ en $|\mathbf{w}|$ de lengte zijn van $\mathbf{v}$ en $\mathbf{w}$ en $\cos \phi$ de cosinus van de kleinste hoek tussen de twee vectoren. De uitkomst van het inproduct is een scalair, het staat daarom ook wel bekend als het *scalairproduct*. Een voorbeeld van het gebruik van een scalairproduct, is de berekening van de arbeid W die door een kracht F wordt verricht bij de verplaatsing van een voorwerp over een

afstand d : $W = F \cdot d$ (zie bijlage I). Het inwendig product is commutatief en distributief, zie opgave 1.3.1.

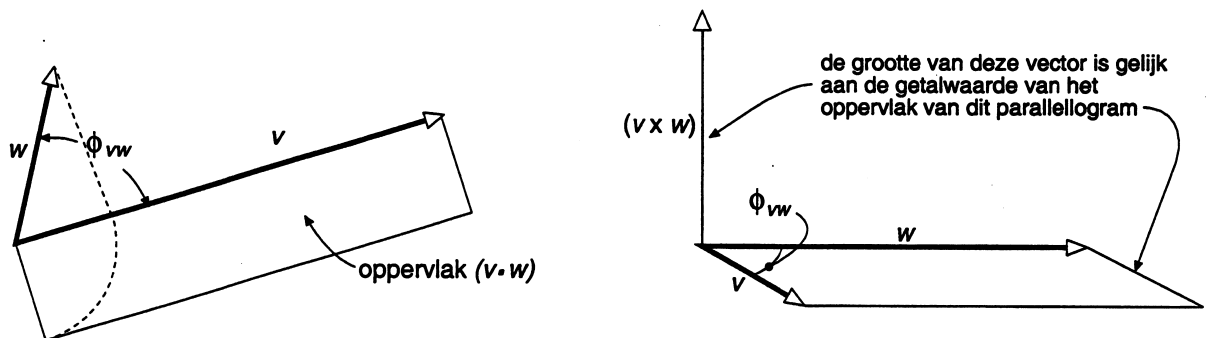
Het uitwendig product is gedefinieerd als:

$$\mathbf{v} \times \mathbf{w} = (|\mathbf{v}| |\mathbf{w}| \sin \phi) \mathbf{n} \quad (1.3-7)$$

waarin $\mathbf{n}$ de eenheidsvector is, loodrecht op het vlak dat door de vectoren $\mathbf{v}$ en $\mathbf{w}$ wordt opgespannen. De positieve richting van $\mathbf{n}$ volgt uit de 'rechterhandregel' als $\mathbf{v}$ over de kleinste hoek naar $\mathbf{w}$ wordt gedraaid. De uitkomst van het uitwendig product is een vector, daarom staat het uitwendig product ook wel bekend als het *vectorproduct*. Een voorbeeld van het vectorproduct is het draaimoment van een kracht rond een as: $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}$.

Het uitwendig product is een belangrijk hulpmiddel bij de beschrijving van relaties in de (vloeistof) mechanica, electriciteit en magnetisme. In dit dictaat wordt het uitwendig product verder niet gebruikt. In het onderstaande wordt daarom geen aandacht besteed aan de berekening van vectorproducten.

Figuur 1.3-3 geeft de meetkundige betekenis van de beide producten.



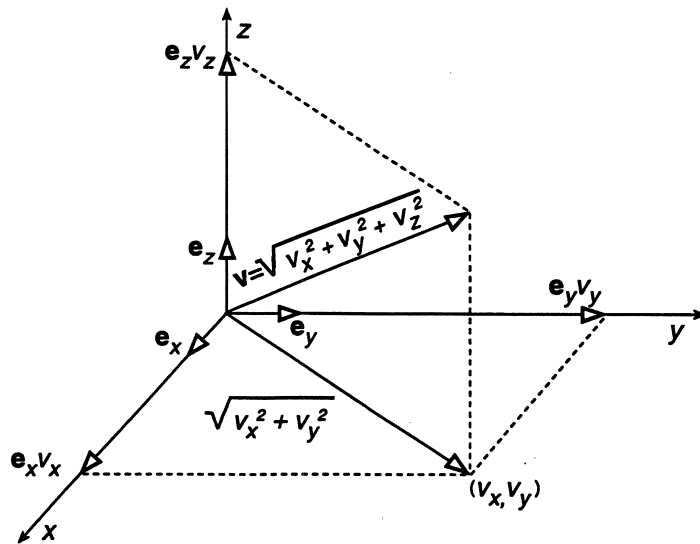
Figuur 1.3-3 Meetkundige betekenis van het inwendig- en uitwendig product (naar Bird, Stewart en Lightfoot, 1960).

1.3.2.1 Vectoroperaties in termen van de componenten

Hoewel de definitie van een vector oorspronkelijk een meetkundige grondslag heeft, is het uitvoeren van vectorberekeningen meestal eenvoudiger met behulp van algebra in termen van de componenten. Een vector kan de resultante zijn van een aantal andere. Omgekeerd kan elke vector worden ontbonden in basisvectoren langs (projecties op) de orthogonale coördinaatassen. Een

vector $\mathbf{v}$, die in de oorsprong begint en in de drie coördinaatrichtingen eindigt in v_1 , v_2 en v_3 , kan worden ontbonden in: $\mathbf{v}_1 = \mathbf{e}_1 v_1$, $\mathbf{v}_2 = \mathbf{e}_2 v_2$ en $\mathbf{v}_3 = \mathbf{e}_3 v_3$, zie figuur 1.3-4. Het is voor de beschrijving van een vector echter niet nodig dat het aangrijpingspunt in de oorsprong ligt. De vector $\mathbf{v}$ is ondubbelzinnig gedefinieerd door zijn componenten (v_1, v_2, v_3) :

$$\mathbf{v} = \mathbf{e}_1 v_1 + \mathbf{e}_2 v_2 + \mathbf{e}_3 v_3 = \sum_1^3 \mathbf{e}_i v_i \quad (1.3-8)$$



Figuur 1.3-4 Projectie van een vector $\mathbf{v}$ op de coördinaatassen x , y en z .

De schrijfwijze met het sommatieteken kan nog verder worden vereenvoudigd door het gebruik van de zogenoemde *Einstein-notatie of sommatieconventie*. Deze houdt in dat wanneer dezelfde index tweemaal voorkomt in één term, er voor die index gesommeerd moet worden van 1 tot 3:

$$\mathbf{v} = \mathbf{e}_i v_i \quad (1.3-9)$$

Bij het toepassen van de sommatieconventie is het handig om gebruik te maken van de 'kronecker delta' die gedefinieerd is door:

$$\begin{aligned} \delta_{ij} &= 1 & \text{als } i &= j \\ \delta_{ij} &= 0 & \text{als } i &\neq j \end{aligned} \quad (1.3-10)$$

Uit de gegeven definities volgt:

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij} \quad (1.3-11)$$

Vermenigvuldiging van een vector met een scalair wordt nu:

$$a\mathbf{v} = a \mathbf{e}_i v_i = \mathbf{e}_i (a v_i) \quad (1.3-12)$$

Omdat het inwendig product distributieve eigenschappen heeft, kan het inproduct van $\mathbf{v}$ en $\mathbf{w}$ worden geschreven als:

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{w} = (\mathbf{e}_i v_i) \cdot (\mathbf{e}_j w_j) = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j v_i w_j = \delta_{ij} v_i w_j = v_i w_i \quad (1.3-13)$$

Het inwendig product van een vector $\mathbf{v}$ met een eenheidsvector $\mathbf{e}_i$ is de grootte van de component van $\mathbf{v}$ in de richting i .

1.3.3 Variatie van een scalaire functie in de ruimte¹⁾

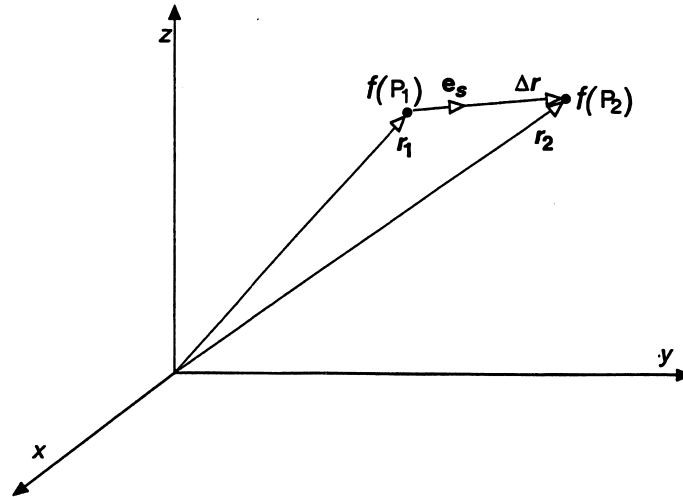
In het voorgaande werd het onderscheid vermeld tussen scalaire grootheden en vectoren. De variatie van een scalaire functie in een driedimensionale ruimte hangt af van de richting waarin de verandering wordt gemeten. Stel, dat de temperatuur T , in een vast lichaam varieert met de coördinaten x , y en z . De grootte van verandering van T per lengte-eenheid in de x -richting, terwijl y en z constant blijven, duiden we in de wiskunde aan met de partiële afgeleide $\frac{\partial T}{\partial x}$. Om

de variatie van T te beschrijven, is het nodig richting en grootte op te geven. Met andere woorden aan de variatie kunnen we dezelfde eigenschappen toekennen als aan een vector.

Omdat de onderstaande beschouwing geldt voor een willekeurige scalaire grootheid, maken we gebruik van een scalaire functie $g(x,y,z)$ (dit is niet de versnelling van de zwaartekracht) die gedefinieerd is in een gebied G . De verandering van g in een punt $P_1(x_1, y_1, z_1)$ kunnen we vinden door behalve naar de functiewaarde in P_1 ook naar de functiewaarde in een naburig punt $P_2(x_2, y_2, z_2)$ te kijken. De positie van een willekeurig punt $P(x,y,z)$ kan worden weergegeven met de

¹⁾ Bij de samenstelling van deze paragraaf werd gebruik gemaakt van de collegehandleiding *Vloeistofmechanica* van prof. J.A.Battjes, 1990, vakgroep Waterbouwkunde, TUD.

plaatsvector: $\mathbf{r} = \mathbf{e}_x x + \mathbf{e}_y y + \mathbf{e}_z z$. Voor de punten P_1 en P_2 hebben we dus de positievectoren $\mathbf{r}_1$ en $\mathbf{r}_2$ en de verplaatsingsvector $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 = \Delta \mathbf{r}$, zie figuur 1.3-5.



Figuur 1.3-5 Functiewaarden in naburige punten P_1 en P_2 op afstand Δs van elkaar gelegen.

De verplaatsingsvector $\Delta \mathbf{r}$ kunnen we schrijven als:

$$\Delta \mathbf{r} = \mathbf{e}_x \Delta x + \mathbf{e}_y \Delta y + \mathbf{e}_z \Delta z \quad (1.3-14)$$

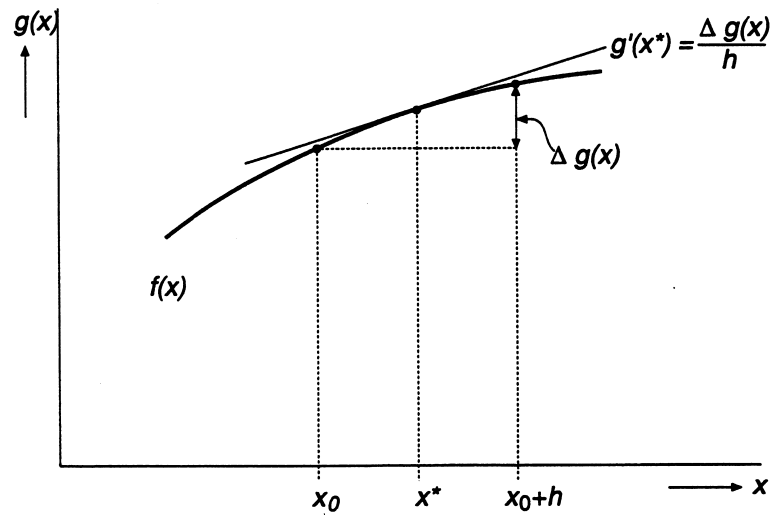
De verplaatsingsvector kan evenwel ook geschreven worden als $\mathbf{e}_s \Delta s$, met $\mathbf{e}_s$ de eenheidsvector in de richting s vanuit P_1 naar P_2 en Δs de afstand tussen beide punten.

Het verschil tussen de functiewaarden $g(P_1)$ en $g(P_2)$ berekenen we met behulp van de Middelwaarde Stelling van de differentiaalrekening.

Volgens deze stelling geldt voor een willekeurige, continu differentieerbare functie $g(x)$:

$$g(x_0+h) - g(x_0) = \Delta g = \left(\frac{\partial g}{\partial x} \right)_{x^*} h \quad (1.3-15)$$

waarbij de partiële afgeleide is genomen in een punt x^* , dat ligt in het interval $(x_0 - x_0+h)$ (zie figuur 1.3-5). Een functie is continu differentieerbaar in een interval, als de functie en alle afgeleiden bestaan. Voor een driedimensionale functie wordt vergelijking (1.3-15) uitgebreid met analoge termen in y en z .



Figuur 1.3-6 Illustratie van de Middelwaarde stelling voor een functie $g(x)$.

Het verschil tussen de functiewaarden $g(P_1)$ en $g(P_2)$ is dus gelijk aan:

$$\Delta g = \left(\frac{\partial g}{\partial x} \right)_* \Delta x + \left(\frac{\partial g}{\partial y} \right)_* \Delta y + \left(\frac{\partial g}{\partial z} \right)_* \Delta z \quad (1.3-16)$$

waarbij de partiële afgeleiden gelden in een punt (x^*, y^*, z^*) tussen P_1 en P_2 en voor de intervallen h op de x -, y - en z - as, de componenten van de verplaatsingsvector zijn genomen.

In de vectoranalyse *definieert* men de gradiëntvector als volgt:

$$\text{grad } g = \nabla g = \mathbf{e}_x \frac{\partial g}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial g}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial g}{\partial z} \quad (1.3-17)$$

Het ∇ teken staat voor de zogenaamde nabla- of del-operator:

$$\nabla = \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \quad (1.3-18)$$

De rechterzijde van vergelijking (1.3-16) kan nu worden beschouwd als het inwendig product van de gradiëntvector in het punt (x^*, y^*, z^*) en de verplaatsingsvector $\Delta \mathbf{r}$:

$$\Delta g = \text{grad } g \cdot \Delta \mathbf{r} = \nabla g \cdot \mathbf{e}_s \Delta s \quad (1.3-19)$$

De verandering van g per eenheid van lengte in de richting s , is gedefinieerd door de richtingsafgeleide van g in de richting s :

$$\frac{\partial g}{\partial s} = \lim_{\Delta s \rightarrow 0} \frac{\Delta g}{\Delta s} \quad (1.3-20)$$

In de limiet als $\Delta s \rightarrow 0$, valt (x^*, y^*, z^*) samen met (x_1, y_1, z_1) en zijn de partiële afgeleiden van (1.3-16) de waarden in P_1 . Met behulp van (1.3-19) kunnen we dus schrijven:

$$\frac{\partial g}{\partial s} = \nabla g \cdot \mathbf{e}_s \quad (1.3-21)$$

De verandering van g in de richting s is dus gelijk aan de component van de gradiëntvector ∇g in de richting s . De verandering is het grootst, wanneer beide vectoren in dezelfde richting wijzen (dan is de cosinus van de ingesloten hoek maximaal en dus ook het inproduct).

Hieruit volgt dat $\text{grad } g$ de vector is, die wijst in de richting van de grootste verandering van g .

De gradiënt van de scalaire functie $g(x, y, z)$ vertegenwoordigt in richting en grootte de grootste verandering van g . Men kan eenvoudig aantonen dat de gradiënt van g gelijk is aan $\frac{dg}{dn}$, dat wil

zeggen in de richting loodrecht op een vlak $g(x, y, z) = \text{constant}$.

In paragraaf 1.5, waarin de energietoestand van grondwater wordt besproken, laten we zien dat de totale drijvende kracht (voor zuiver water) kan worden geformuleerd als de gradiënt van één variabele.

Er wordt met nadruk op gewezen dat de definitie van de gradiëntvector in (1.3-17) alleen geldt in een cartesiaans coördinatenstelsel. In cilindrische coördinaten of in bolcoördinaten krijgt de operator ∇ een andere vorm!¹⁾

¹⁾ Zie bijvoorbeeld Bird, Stewart en Lightfoot, 1960, Aris, 1962 of Koopmans, 1995.

1.3.4 Differentiaaloperaties met vectoren

De gradiëntvector wordt in de vloeistofmechanica veelvuldig gebruikt. De toepassing van ∇ , tezamen met de Einstein-notatie, leidt tot een verkorte schrijfwijze die (meestal) verhelderend werkt. De volgende regels zijn van toepassing op de gradiëntvector:

$$\nabla f \neq f \nabla \quad (1.3-22)$$

$$(\nabla f)g \neq \nabla(fg) \quad (1.3-23)$$

$$\nabla(f + g) = \nabla f + \nabla g \quad (1.3-24)$$

waarin f en g scalaire functies zijn. Operaties van de gradiëntvector op een scalaire functie zijn dus *niet* commutatief, *niet* associatief, maar wel distributief.

Als g een functie is van een scalaire grootte p , dan geldt:

$$\nabla g = \frac{dg}{dp} \nabla p \quad (1.3-25)$$

Het scalairproduct van ∇ en een vector $\mathbf{v}$ staat bekend als de *divergentie van $\mathbf{v}$* . Op dezelfde wijze als in vergelijking (1.3-13) volgt:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \mathbf{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot \mathbf{e}_j v_j = \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \quad (1.3-26)$$

Een natuurkundige interpretatie van de divergentie wordt besproken in paragraaf 2.2.

De divergentie van de gradiëntvector is:

$$\nabla \cdot \nabla g = \mathbf{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot \mathbf{e}_j \frac{\partial g}{\partial x_j} = \delta_{ij} \frac{\partial^2 g}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 g}{\partial x_i^2} = \nabla^2 g \quad (1.3-27)$$

Het symbool ∇^2 is de zogenaamde Laplace-operator.

Opgaven

1.3.1. Drie vectoren u , v en w liggen in het x - y vlak, toon aan dat het inwendig product commutatief en distributief is. Met andere woorden: $v \cdot w = w \cdot v$ en $u \cdot (v + w) = u \cdot v + u \cdot w$

1.3.2. a. Wat is de betekenis van $u \cdot v \cdot w$? b. Waarom is het inwendig product niet associatief; met andere woorden, waarom is $(u \cdot v)w \neq u(v \cdot w)$?

1.3.3. Bewijs dat grad g loodrecht staat op oppervlakken van gelijke g ; g is een scalaire functie.

1.3.4. Bewijs vergelijking (1.3-25).

1.3.5. Bewijs dat $\nabla \cdot (g\mathbf{v}) = g(\nabla \cdot \mathbf{v}) + \nabla g \cdot \mathbf{v}$

1.3.6. Bewijs dat $\nabla \cdot \mathbf{r} = 3$

1.4. Krachten in een vloeistof

Wanneer op een vast lichaam een schuifkracht wordt uitgeoefend ontstaat er in principe een kleine vervorming van het materiaal. De elektromagnetische bindingskrachten tussen de moleculen werken de vervorming echter tegen, waardoor er een evenwicht ontstaat en de vervorming stopt.

Een vloeistof is door zijn geaardheid niet in staat een schuifkracht te weerstaan. De stof gaat vloeien. Door de beweging ontstaan in de vloeistof wrijvingskrachten die de aandrijvende kracht tegenwerken, maar niet groot genoeg zijn om de beweging tot staan te brengen. Dit is vergelijkbaar met de wrijvingskrachten die optreden bij de beweging van een voorwerp over een vast oppervlak. Een ingesloten vloeistof in rust kan alleen een normaalkracht weerstaan, dat wil zeggen een kracht loodrecht op het grensvlak van de vloeistof. In een statische situatie is er dus geen netto kracht *langs* een oppervlak.

Druk is gedefinieerd als de normaalkracht per oppervlak. In een gas kan de druk worden beschouwd als het resultaat van miljarden botsingen van gasmoleculen tegen de wand. Hoewel in een vloeistof de bewegingsvrijheid van de moleculen veel kleiner is dan in een gas, kan dit model ook bij vloeistoffen worden toegepast. Bij een elastische botsing is er sprake van *verandering van impuls* (mv) en wel van een omkering van de richting van de component loodrecht op het oppervlak. Volgens de tweede wet van Newton is de verandering van impuls per seconde een

kracht ($\frac{dmv_n}{dt} = f_n$). Tijdens een botsing wordt er dus een normaalkracht uitgeoefend. Het netto

resultaat van een zeer groot aantal botsingen geeft aanleiding tot een meetbare kracht loodrecht op het oppervlak. De grootte van de normaalkracht per eenheid van oppervlak is de druk. Bij een vloeistof in rust (statische situatie) geldt dat de krachten op elk deel van de vloeistof in evenwicht zijn, en dientengevolge dat de netto kracht nul is.

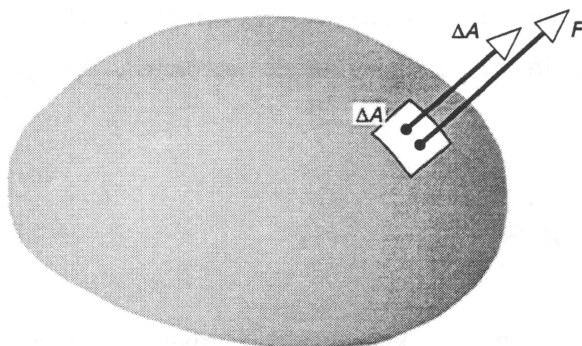
Stel we beschouwen een klein oppervlak ΔA waarop een drukkracht F werkt, dan geldt:

$$F = p \Delta A \quad (1.4-1)$$

De SI eenheid van druk is de Pascal (Pa), die gelijk is aan één Newton per m^2 . Druk is een scalaire grootheid, hoewel de definitie, kracht per oppervlak, anders zou doen vermoeden.

Volgens het principe dat Pascal in 1652 formuleerde, werkt de druk die op een ingesloten vloeistof wordt uitgeoefend naar alle richtingen in dezelfde mate. Dit betekent dat druk in een willekeurig punt van een vloeistof wel een bepaalde grootte heeft, maar niet één bepaalde richting. Een oppervlakte-element kan echter wél als een vector worden beschouwd. De getalwaarde van de vector is de grootte van het element en de 'richting' is die van de naar buiten (vanuit de vloeistof gezien) gerichte normaal. In figuur (1.4-1) wijzen de vectoren F en ΔA in dezelfde richting en is p een positieve scalaire factor.

We zullen nu een uitdrukking afleiden voor de kracht die op een vloeistofdeeltje werkt als gevolg van drukverschillen. Daartoe beschouwen een klein kubusvormig controlevolume $\Delta x \Delta y \Delta z = \Delta V$ op een willekeurige plaats. In het volume ΔV , bevindt zich een bepaalde massa water Δm . De relatie tussen massa en volume wordt gegeven door de dichtheid.



Figuur 1.4-1 Een oppervlakte-element als vector beschouwd (naar Resnick, Halliday en Krane, 1992).

De dichtheid ρ van een vloeistof is de massa Δm , gedeeld door het volume ΔV .

$$\rho = \frac{\Delta m}{\Delta V} \quad (1.4-2)$$

De dichtheid in een punt is uiteraard de waarde wanneer we het elementaire volume laten krimpen tot een punt. De dichtheid van een stof is in het algemeen een functie van druk en temperatuur. De invloed van de druk is bij vloeistoffen meestal groter dan bij vaste stoffen, maar veel minder dan bij gassen. De mate waarin het volume verandert met de druk, staat bekend als de samendrukbaarheidscoëfficiënt β_p ($\text{m}^3 \text{ m}^{-3} \text{ Pa}^{-1}$). Voor water is die gering, bij 10°C en atmosferische druk bijvoorbeeld $-4.79 \cdot 10^{-10} \text{ Pa}^{-1}$, dat wil zeggen dat bij een verhoging van de druk met één Pa het volume van één kubieke meter water vermindert met $4.79 \cdot 10^{-10} \text{ m}^3$.

We bezien eerst welke krachten er werken op het volume ΔV en onderzoeken daarna wat het effect is van het krimpen van het volume tot een punt. De coördinaten van het 'middelpunt' M van het kubusje noemen we $x = a$, $y = b$ en $z = c$, zie figuur 1.4-2. In horizontale richting werken alleen krachten die het gevolg zijn van de druk. In verticale richting werken de drukkrachten op de onder- en bovenzijde plus het gewicht van het volume-element (de zwaartekracht).

De horizontale kracht op de achterzijde van het kubusje is gelijk aan:

$$F_{a-\frac{1}{2}\Delta x} = p_{a-\frac{1}{2}\Delta x} \Delta y \Delta z \quad (1.4-3)$$

Het subscript $a-\frac{1}{2}\Delta x$ geeft aan dat bedoeld wordt de waarde van F of p in het punt $(a-\frac{1}{2}\Delta x, b, c)$. De oppervlaktevector $\Delta y \Delta z$ van het achtervlak wijst in de positieve x -richting.

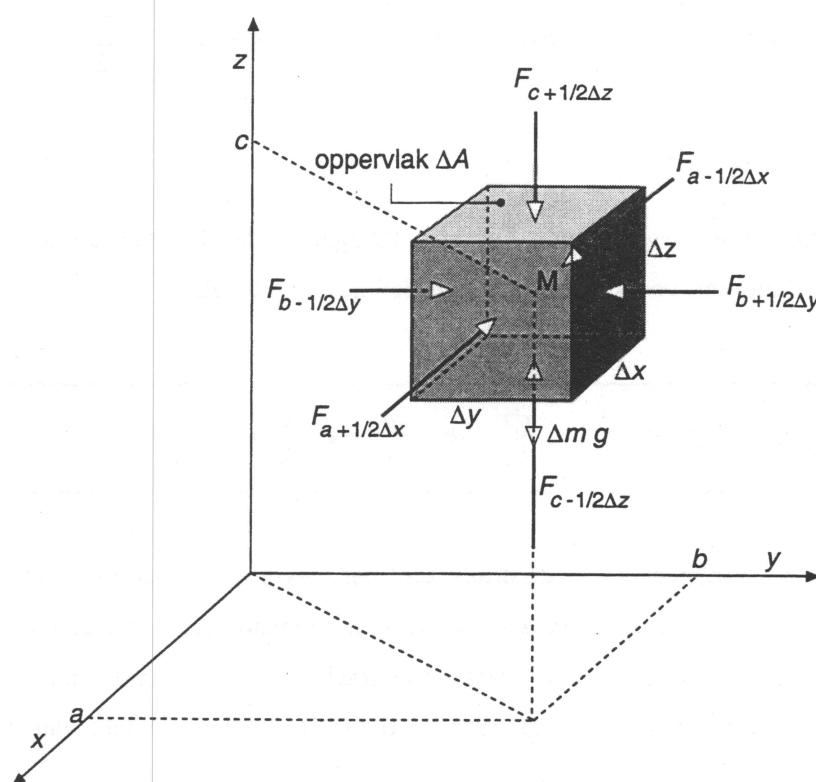
Op de voorzijde werkt, in tegengestelde richting, ook een drukkracht die op overeenkomstige wijze kan worden geschreven. In de x -richting is de *nettokracht ten gevolge van drukverschillen* derhalve:

$$F_x = (p_{a-\frac{1}{2}\Delta x} - p_{a+\frac{1}{2}\Delta x}) \Delta y \Delta z \quad (1.4-4)$$

Het drukverschil $(p_{a-\frac{1}{2}\Delta x} - p_{a+\frac{1}{2}\Delta x})$ kunnen we schrijven als functie van de druk in M door gebruik te maken van de Middelwaarde stelling van de differentiaalrekening, zie vergelijking (1.3-15).

De vloeistofdruk p , is een continu differentieerbare functie (alleen bij schokgolven niet). Kiezen we nu voor het interval h de ribbe van de kubus Δx , dan kan in vergelijking (1.4-3)

$$(p_{a-\frac{1}{2}\Delta x} - p_{a+\frac{1}{2}\Delta x}) \text{ worden vervangen door } -\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_{x^*} \Delta x.$$



Figuur 1.4-2 Krachten op een elementair volume vloeistof in rust.

Bij het nemen van de limiet, dat wil zeggen het alzijdig krimpen van het volume-element naar M en dus van Δx naar 0, valt x^* samen met a . Hieruit volgt dat in het punt $x = a$ de netto drukkracht in de x -richting gelijk is aan:

$$F_a = - \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_a \Delta x \Delta y \Delta z \quad (1.4-5)$$

De netto drukkracht in de x -richting is dus gelijk aan minus de richtingsafgeleide van p maal het volume vloeistof. In een vloeistof in rust (de zogenaamde hydrostatische toestand) geldt dat de krachten op elk deel van de vloeistof in evenwicht zijn en dientengevolge dat de netto kracht nul is. Dit betekent dat de afgeleide van de druk in een horizontale richting gelijk is aan nul. Omdat de plaats van het controlevolume willekeurig gekozen werd, volgt hieruit dat (bij een vloeistof in rust) de druk in elk punt van een horizontaal vlak hetzelfde is.

Voor de drukkracht in de x -richting kunnen we dus ook schrijven:

$$F_x = - \frac{\partial p}{\partial x} \frac{\Delta m}{\rho} \quad (1.4-6)$$

De drukkracht in de x -richting *per volume* in een punt is gelijk is aan $-\frac{\partial p}{\partial x}$, en *per massa* aan

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x}.$$

In de y - en z -richting gelden overeenkomstige uitdrukkingen, zodat de totale drukkracht per massa (in een punt) met behulp van vectornotatie kan worden geschreven als:

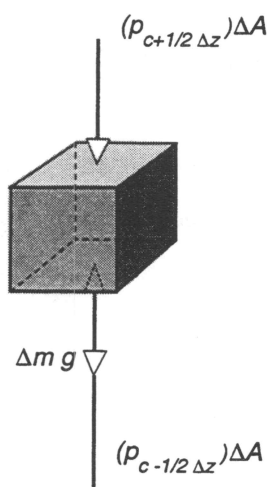
$$\mathbf{f} = \mathbf{e}_x f_x + \mathbf{e}_y f_y + \mathbf{e}_z f_z = -\frac{1}{\rho} \left(\mathbf{e}_x \frac{\partial p}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial p}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial p}{\partial z} \right) = -\frac{1}{\rho} \nabla p \quad (1.4-7)$$

waarin f_x , f_y en f_z de componenten van de drukkracht per massa zijn, in de x -, y - en z -richting.

Uit het bovenstaande volgt dat de drukkracht per volume vloeistof gelijk is aan $-\nabla p$.

In de verticale richting werkt behalve de netto drukkracht ook de zwaartekracht. Het krachten-
diagram (van verticale krachten) wordt getoond in figuur 1.4-3, het gewicht van het element is

$$\Delta m g = \rho \Delta A \Delta z g, \text{ waarin } \Delta A = \Delta x \Delta y.$$



Figuur 1.4-3 Verticale krachten op een vloeistofelement in rust.

De krachtenbalans in de verticale richting luidt:

$$\sum F_z = (p_{c-1/2 \Delta z} - p_{c+1/2 \Delta z}) \Delta A - \rho g \Delta A \Delta z = 0 \quad (1.4-8)$$

waaruit volgt:

$$\frac{dp}{dz} = -\rho g \quad (1.4-9)$$

Dit noemt men de hydrostatische drukverdeling. Omdat in deze toestand p alleen een functie is van z schrijven we de gewone afgeleide. De verandering van de druk met de verticale coördinaat z is constant, en voor water van 10 °C gelijk aan -9807 N m^{-3} . Het drukverschil tussen twee punten onder statische omstandigheden, kan eenvoudig gevonden worden door integratie van vergelijking (1.4-9).

Als er een vrije waterspiegel aanwezig is, heerst daar atmosferische druk. Dit betekent dat de absolute druk in een willekeurig punt *van een vloeistof in rust* gelijk is aan:

$$p_{\text{abs}} = p_{\text{atm}} + \rho g h \quad (1.4-10)$$

waarin h de verticale afstand is van het onderhavige punt tot de waterspiegel. De term $\rho g h$ geeft de bijdrage aan de druk als gevolg van het gewicht van de bovenliggende vloeistof.

In een stromende vloeistof treden steeds wrijvingskrachten op. Zonder aandrijvende kracht zouden bewegende vloeistofdeeltjes worden afgeremd en tot stilstand komen. Wanneer het water blijft bewegen, moet er dus een netto drijvende kracht zijn die op de vloeistof werkt.

In stromend water zijn de krachten ten gevolge van zwaarte en druk niet in balans.

Dit betekent dat wanneer het vloeistofelement van figuur 1.4-3 in de x -richting beweegt, de netto drukkracht in die richting niet gelijk is aan nul:

$$F_x = (p_{a-\frac{1}{2}\Delta x} - p_{a+\frac{1}{2}\Delta x}) \Delta y \Delta z = -\frac{\partial p}{\partial x} \Delta V \neq 0 \quad (1.4-11)$$

Opgaven.

1.4.1. In plaats van de Middelwaarde stelling te gebruiken, kan vergelijking (1.4-4) ook worden verkregen met behulp van de Taylor-reeks, namelijk door in vergelijking (1.4-3) de twee waarden van p te schrijven als een Taylor-reeks ten opzichte van a . Probeer dat.

1.4.2. In een laboratoriumopstelling bevindt zich een met grond gevulde horizontale buis van 1,0 m lengte, tussen twee waterreservoirs waarvan het waterpeil 0,2 m verschilt. Bereken de kracht op het water (per volume vloeistof). De grond is homogeen, de dichtheid van water is 999 kg m^{-3} en de zwaartekrachtsversnelling $9,81 \text{ m s}^{-2}$.

1.5 De energietoestand van grondwater¹⁾

1.5.1 Inleiding

Grondwater in de bovenste lagen (honderden meters) van de aardkorst is meestal in beweging. Dit komt door invloeden van buiten, zoals de infiltratie van neerslag en wisselende waterstanden in rivieren en meren én door menselijk handelen. Grondwaterstudies zijn er vooral op gericht uit te vinden hoe de stroming plaatsvindt. Voor het beheer is het dikwijls gewenst de grondwaterbeweging te kunnen *voorspellen*. Zoals reeds opgemerkt in paragraaf 1.3, kan de beweging van vloeistoffen worden bestudeerd met een bijzonder onderdeel van de klassieke mechanica de zogenaamde vloeistofmechanica. Ook daarin spelen de wetten van Newton en de begrippen arbeid, energie en impuls een belangrijke rol. De beweging van vloeistoffen door poreuze media, zoals grond, neemt een bijzondere plaats in. Enerzijds wordt dit veroorzaakt door de (onbekende) geometrie van de poriën, anderzijds door de onmiddellijke nabijheid van vaste stof en vloeistof én door het zeer grote contactoppervlak tussen de stoffen in beide fasen. Het eerste betekent dat in de poriën zelf de stroming niet exact kan worden beschreven, het tweede dat de wrijvingskracht tussen vloeistof en vaste stof gelijk wordt aan de drijvende kracht.

In de klassieke mechanica kunnen bepaalde vraagstukken (waarbij de versnelling afhankelijk is van de plaatscoördinaten) worden opgelost zonder het pad van een voorwerp in detail te berekenen. Dit gebeurt door gebruik te maken van de begrippen arbeid en energie. Ook voor de berekening van grondwaterstroming biedt deze methode voordelen. Hieronder wordt daarom eerst besproken hoe de krachten die op een waterdeeltje werken, de energietoestand van grondwater bepalen. Daarna komt in paragraaf 1.6 de beweging van grondwater als gevolg van energiever verschillen aan de orde.

1.5.2 De drijvende kracht

De beweging van een waterdeeltje wordt veroorzaakt door een kracht die op het deeltje wordt uitgeoefend. *Gebleken is dat voor de berekening van grondwaterstroming kennis van de drijvende krachten voldoende is.* Voor verzadigde grondwaterstroming hoeven bovendien de krachten die voortvloeien uit de adhesie tussen water en bodemdeeltjes en de (osmotische) krachten die het gevolg zijn van de zogenaamde 'dubbellaag' van ionen, niet in beschouwing te worden genomen (Koorevaar, Menelik en Dirksen, 1983). De drijvende krachten die bij verzadigde grondwater-

¹⁾ Voor een goed begrip van deze paragraaf is elementaire kennis van de mechanica vereist. Daarvoor wordt verwezen naar de vwo-leerboeken natuurkunde of naar *Klassieke Mechanica*, deel 1, Stichting Teleac, 1989, zie ook bijlage I.

stroming een rol spelen, zijn:

- de zwaartekracht;
- de kracht die het gevolg is van *drukverschillen* in de vloeistof¹⁾

Op een bepaalde plaats op aarde werkt de zwaartekracht altijd in dezelfde richting. Om de richting te beschrijven, is het nodig een coördinatenstelsel te kiezen. Als standaard kiezen we een Cartesisch coördinatenstelsel waarvan de positieve z -as verticaal naar boven wijst. In zo'n stelsel werkt de zwaartekracht in de negatieve z -richting. De zwaartekracht op een massa m is $-mge_z$, waarin het minteken de richting aangeeft. Volgens de tweede wet van Newton heeft een kracht een verandering van beweging (versnelling) tot gevolg. Als op een voorwerp alleen de zwaartekracht werkt, is de versnelling $-g$ en kan de beweging nauwkeurig worden beschreven met de wetten van de klassieke mechanica.

In paragraaf 1.4 hebben we gezien dat de drukkracht in een bepaalde richting evenredig is met de richtingsafgeleide en dat de totale drukkracht per volume vloeistof gelijk is aan minus de gradiënt van p . Drukverschillen in het horizontale vlak zijn het resultaat van externe condities, zoals peilverschillen tussen open waterlopen, onttrekking door pompstations of de topografie (infiltratie van regenwater in hoge en lage delen).

De resultante van de zwaarte- en drukkracht is de drijvende kracht.

Zoals al opgemerkt, kunnen grondwaterproblemen het beste worden opgelost door gebruik te maken van de begrippen arbeid en energie. We kunnen de oplossing in de meeste gevallen aanmerkelijk vereenvoudigen door gebruik te maken van het begrip *potentiaal*.

1.5.3 Energie en potentiaal

In de mechanica staat het product van kracht en verplaatsing bekend als de *arbeid* van de kracht op een voorwerp²⁾. Het verrichten van arbeid op een voorwerp leidt tot een verandering van de energie. Omgekeerd is *energie het vermogen om arbeid te verrichten*. Door arbeid te verrichten kunnen verschillende soorten energie in elkaar worden omgezet. Als bijvoorbeeld de zwaartekracht de gelegenheid krijgt een massa in beweging te zetten, wordt potentiële zwaarte-energie omgezet in kinetische energie en als er wrijving optreedt, ook in interne energie (warmte).

In het zwaarteveld wordt op iedere massa een kracht uitgeoefend. De plaats van een voorwerp bepaalt dus hoeveel arbeid de zwaartekracht kan verrichten als het van die plaats naar het aardoppervlak valt. We zeggen dat het voorwerp *potentiële energie* in het zwaarteveld heeft.

¹⁾ In dit dictaat korthedshalve de drukkracht genoemd.

²⁾ Zie voetnoot op blz. 24.

In het algemeen geldt:

Een voorwerp heeft potentiële energie als het zich in een omgeving bevindt waarin op het voorwerp een kracht werkt, die de mogelijkheid heeft om arbeid te verrichten.

Een voorwerp bezit (potentiële) *zwaarte-energie* als de mogelijkheid bestaat om de zwaartekracht arbeid te laten verrichten. De arbeid (W) die een kracht verricht wanneer die werkt op een voorwerp, is gedefinieerd als het product van de grootte van de kracht (*in de richting van de verplaatsing*) en de afstand waarover het voorwerp wordt verplaatst. Arbeid kan worden geschreven als het inwendig product van de krachtvector en de verplaatsingsvector¹⁾. Omdat de zwaartekracht zowel in grootte als richting constant is, is de arbeid van de zwaartekracht gelijk aan het product van *kracht en verplaatsing in de richting van de zwaartekracht*. Het zwaarteveld is een conservatief krachtveld, dat wil zeggen dat de arbeid alleen afhankelijk is van de verticale afstand tussen begin- en eindpunt, maar niet van de weg die wordt afgelegd. In deze paragraaf wordt aangetoond dat, onder bepaalde voorwaarden, het drukveld van grondwater ook een conservatief krachtveld is. Dit betekent dat de arbeid van de drukkracht alleen afhankelijk is van het drukverschil tussen twee punten.

Een grondwaterdeeltje op een bepaalde plaats bezit potentiële energie als gevolg van de zwaarte- en de drukkracht. Bij de stroming van grondwater wordt arbeid verricht door de drijvende kracht. De potentiële energie van een massa m , wordt gedefinieerd door *het verschil in potentiële energie tussen twee punten (ΔU), gelijk te stellen aan minus de arbeid die wordt verricht door de conservatieve kracht bij verplaatsing van de massa van het ene naar het andere punt*. De getalwaarde van de potentiële energie is afhankelijk van de (arbitraire) keuze van de referentietoestand. Hieruit volgt dat energie een relatief begrip is: ten opzichte van een andere referentietoestand bezit de massa een andere potentiële energie. Uit de definitie volgt dat de afgeleide van de potentiële energie naar de afstand een kracht is. Als we de potentiële energie van het water op een bepaalde plaats kennen, is minus de richtingsafgeleide gelijk aan de drijvende kracht die wordt uitgeoefend in die richting.

De potentiaal (ψ) is gedefinieerd als: potentiële energie per massa.

De potentiaal heeft dus te maken met de energietoestand van het water.

¹⁾ Zie bijlage I.

De getalwaarde van de potentiaal in een bepaald punt is gelijk aan minus de arbeid die per kg water wordt verricht door de conservatieve krachten die op het water werken, als een zeer kleine hoeveelheid water vanuit het nulniveau wordt verplaatst naar het onderhavige punt (eenheden: J kg⁻¹).

Het nulniveau voor de zwaarte-energie kan willekeurig worden gekozen. Voor de drukenergie is het gebruikelijk de atmosferische druk p_{atm} te kiezen, dat wil zeggen: $p = p_{\text{abs}} - p_{\text{atm}}$.

We zullen nu de potentiaal van grondwater berekenen afhankelijk van de plaats en de druk.

Bij het verplaatsen¹⁾ van een massa water m van beginpunt B naar punt A wordt door de zwaarte-kracht F_g , arbeid verricht ter grootte van:

$$W_g = \int_B^A F_g \cdot d\mathbf{r} = -m g \Delta z \quad (1.5-1)$$

waarin $\int_B^A$ staat voor de *lijnintegraal* $\int_{\mathbf{r}(B-A)} d\mathbf{r}$, de infinitesimale verplaatsingsvector is langs het pad van B naar A en Δz het hoogte verschil ($z_A - z_B$). Arbeid is een scalaire grootheid, de punt in de integrand mag niet weggelaten worden, omdat zij het *inwendig product* aangeeft van de vectoren F_g en $d\mathbf{r}$. Het minteken komt tevoorschijn, omdat de zwaartekracht in de negatieve z -richting wijst.

Omdat de zwaartekracht in de verticale richting werkt, wordt er alleen arbeid verricht tijdens verplaatsing in die richting. Als we het aardoppervlak als nulniveau kiezen, is de zwaarte-energie van een massa m op een hoogte h boven het aardoppervlak gelijk aan $m \cdot g \cdot h$.

Het potentiaalverschil tussen A en B ten gevolge van de zwaartekracht is minus de verrichte arbeid per massa en bedraagt dus:

$$\Delta \psi_g = \frac{mg \Delta z}{m} = g \Delta z \quad (1.5-2)$$

en als de z -coördinaat van B als nulniveau wordt gekozen:

$$\psi_g = g z_A \quad (1.5-3)$$

Vervolgens berekenen we de component van de potentiaal als gevolg van het drukveld.

¹⁾ Dit is geen werkelijke verplaatsing door stroming, maar een fictieve verplaatsing alleen tegen de krachten van zwaarte en druk.

In paragraaf 1.4 werd de drukkracht op een vloeistofdeeltje berekend per massa, zie vergelijking (1.4-6). Bij het verplaatsen van een massa water m van beginpunt B (druk = p_B) naar punt A (druk = p_A) wordt door de drukkracht arbeid verricht ter grootte van:

$$W_p = \int_B^A \mathbf{F}_p \cdot d\mathbf{r} = m \int_B^A -\frac{\nabla p}{\rho} \cdot d\mathbf{r} \quad (1.5-4)$$

Beschouwen we zuiver water, dan is de dichtheid alleen een functie van druk en temperatuur. Omdat de temperatuur van grondwater meestal constant is, resteert slechts de druk. De integrand is dus alleen een functie van p . Uitgeschreven is de integraal:

$$\begin{aligned} W_p &= -m \int_B^A \frac{1}{\rho(p)} \left(\frac{\partial p}{\partial x} dx + \frac{\partial p}{\partial y} dy + \frac{\partial p}{\partial z} dz \right) = \\ &= -m \int_B^A \frac{1}{\rho(p)} dp = -m \int_{p_B}^{p_A} dfu(p) = -m(fu(p_A) - fu(p_B)) \end{aligned} \quad (1.5-5)$$

$fu(p)$ is de primitieve van $\frac{1}{\rho(p)}$, met andere woorden, de functie waarvan $\frac{1}{\rho(p)}$ de afgeleide naar

p is. Uit het laatste deel van de vergelijking volgt dat de drukkracht een conservatieve kracht is, omdat de arbeid alleen afhangt van de druk in het begin- en eindpunt van de lijnintegraal en niet van het gevolgde pad. *Dit geldt alleen bij een constante temperatuur en een constante concentratie van opgeloste stoffen (die nul is in het geval van zuiver water).*

De drukpotentiaal in punt A is derhalve:

$$\psi_p = \int_0^{p_A} \frac{1}{\rho(p)} dp = fu(p_A) \quad (1.5-6)$$

en indien de dichtheid constant is:

$$\psi_p = \frac{p_A}{\rho} \quad (1.5-7)$$

De totale potentiaal van grondwater in punt A is gelijk aan de som van de zwaarte- en drukpotentiaal:

$$\psi = \psi_g + \psi_p = gz_A + \frac{p_A}{\rho} \quad (1.5-8)$$

waarin:

- z = de hoogte boven het referentie niveau (m)
 ρ = de dichtheid van water (kg m^{-3})
 g = de zwaarteveldsterkte ($\text{N kg}^{-1} = \text{m s}^{-2}$)
 p = de waterdruk ten opzichte van de atmosferische druk (N m^{-2}).

Samenvattend: de potentiële energie van grondwater ($W_g + W_p$), is het gevolg van twee krachten die op een massa water aangrijpen. De potentiaal werd zo gedefinieerd dat:

- de resultante van de krachten werkt in de richting van afnemende potentiaal;
- de grootte van de drijvende kracht gelijk is aan minus de gradiënt van de potentiaal.

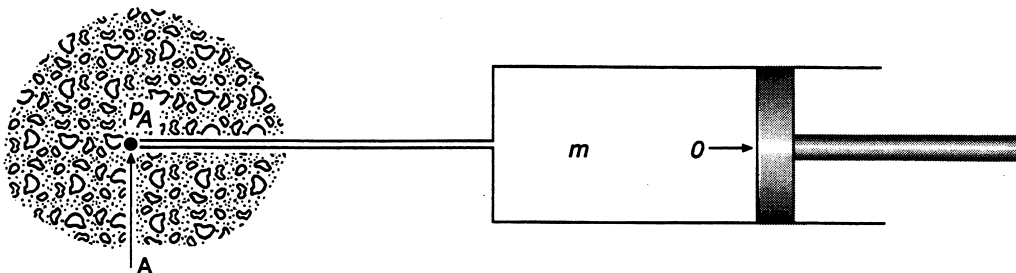
De kracht per massa in de richting x_i is daarom gelijk aan:

$$f_{x_i} = - \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \quad (1.5-9)$$

Opgaven.

1.5.1. Voer de berekeningen uit van het inwendig product in de vergelijkingen (1.5-1) en (1.5-4).

1.5.2. De berekening van de drukcomponent van de potentiaal kan ook op een andere manier geschieden. Daartoe voeren we in gedachten het volgende experiment uit: vanuit een gelijkblijvende plaatshoogte (dus geen arbeid in het zwaartekrachtsveld) wordt een massa water m geïnjecteerd in een punt A (druk p_A) van het grondwater. De druk van het te injecteren water is oorspronkelijk gelijk aan de atmosferische druk; de zuiger én de waterstroming zijn wrijvingsloos (zie figuur 1.5-1).



Figuur 1.5-1 Injectie van water vanuit een gelijke plaatshoogte.

Aanwijzing: Bereken eerst de arbeid die het kost om het water te injecteren en vervolgens de potentiaal. Uit het volume water en de oppervlakte van de zuiger volgt de afgelegde afstand.

1.5.3.. Waarom wordt bij het berekenen van de potentiaal geen rekening gehouden met de wrijvingskrachten?

1.5.4. Bij de stroming van verontreinigd grondwater kan het voorkomen dat de dichtheid van de vloeistof aanmerkelijk afwijkt van de dichtheid van water als gevolg van de concentratie van opgeloste stoffen. Is de uitkomst van de lijnintegraal in vergelijking (1.5.5) nu nog ondubbelzinnig? Wat betekent dat voor bruikbaarheid van de potentiaal of de stijghoogte?

1.5.4 De stijghoogte

Tot dusver hebben we gesproken over potentialen op massabasis (J kg^{-1}). We kunnen de potentiaal ook uitdrukken op gewichtsbasis ($\text{J N}^{-1} = \text{m}$), dat wil zeggen: potentiële energie per gewicht. Dit is in de hydrologie de gebruikelijke maat voor de potentiaal en wordt de stijghoogte H , genoemd.

De stijghoogte is de potentiële energie per gewicht.

Uit het voorgaande volgt:

$$H = \frac{\psi}{g} = z + \int_0^p \frac{1}{\rho(p)g} dp \quad (1.5-10)$$

Wordt voor de dichtheid een constante genomen dan is de stijghoogte:

$$H = z + \frac{P}{\rho g} \quad (1.5-11)$$

De dimensie van H is lengte, in de praktijk: meters waterkolom.

Uit de definitie volgt dat $\psi = g H$.

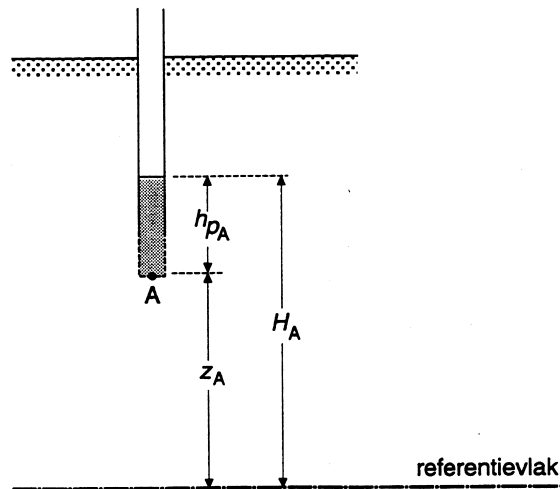
De stijghoogte in een bepaald punt (A) kan men meten door een *piëzometer* te plaatsen met een klein filter in A. De hoogte tot waar het water in de buis stijgt is dan de stijghoogte in A. Men kan deze uitdrukken ten opzichte van een referentieniveau bijvoorbeeld N.A.P.

De waarneembare stijghoogte H_A is opgebouwd uit twee componenten (zie figuur 1.5-2):

- de hoogte van het meetpunt A boven het referentieniveau, de zogenaamde plaatshoogte z_A ;
- de lengte van de waterkolom in de stijgbuis, de zogenaamde drukhoogte h_{pA} .

Hieruit volgt:

$$H_A = z_A + h_{p_A} \quad (1.5-12)$$



Figuur 1.5-2 De componenten van de stijghoogte H .

De kolom water van lengte h_{p_A} (in rust), oefent in A een vloeistofdruk uit die gelijk is aan¹⁾:

$$p_A = \rho g h_{p_A} \quad (1.5-13)$$

Uit (1.5-12), (1.5-13) en (1.5-11) volgt dat de stijghoogte op deze wijze correct wordt gemeten.

De stijghoogte H is een goede maat voor de potentiaal als g en ρ constant zijn. Voor de berekening van meer-vloeistoffen problemen (olie en water, zoet en zout water), waarbij men te maken heeft met verschillende dichtheden, is de stijghoogte niet geschikt.

Aangezien het freatisch vlak is gedefinieerd als de meetkundige plaats van punten waar de absolute waterdruk gelijk is aan de atmosferische druk ($p = 0$) geldt daar: $H = z$.

De stijghoogte van grondwater is in het algemeen een functie van plaats en tijd. Het grondwater van de Veluwe bijvoorbeeld, heeft in de hoge delen (van de Veluwe) een hogere stijghoogte dan in de lage delen en varieert bovendien ten gevolge van variatie in bodemeigenschappen en de

¹⁾ Zie paragraaf 1.4.

ontwateringstoestand. Fluctuaties in de tijd zijn voornamelijk het gevolg van de weersomstandigheden. In paragraaf 1.3.3 werd uiteengezet dat variatie van een scalaire functie in de ruimte kan worden beschreven met behulp van de gradiënt. Minus de afgeleide van H naar x is de kracht per gewicht in de richting x . De gradiënt van H is de vectorsom van de componenten in de drie coördinaatrichtingen en vertegenwoordigt in richting en grootte de grootste verandering van de stijghoogte. De natuurkundige betekenis van $-\nabla H$ volgt uit de definitie van de stijghoogte: het is de drijvende kracht per gewicht water. Bij constante dichtheid heeft H de volgende voordelen:

- de stijghoogte is eenvoudig meetbaar;
- minus de gradiënt van H is de drijvende kracht per gewicht.

Bij de bespreking van de bewegingswet van grondwater (paragraaf 1.6) zal blijken dat in een punt (x,y,z) de gradiënt van H ook de richting aangeeft waarin de stroming plaatsvindt.

Opgave 1.5.5. Maak een schatting van de stijghoogtegradiënt in de freatische- en in de artesische laag ten westen van Bennekom met behulp van de gegevens van figuur 1.1.-1.

1.5.5 *Het druk-equivalent van de potentiaal*

Een derde maat voor de potentiaal is het *druk-equivalent dat gedefinieerd als potentiële energie per volume* (dimensie Pa).

Uit de eerder gegeven definities volgt:

$$p^* = \rho\psi = \rho gH = \rho gz + p \quad (1.5-14)$$

p^* is dus niet gelijk aan de vloeistofdruk (die is gelijk aan p), maar is de potentiaal uitgedrukt in Pascal. Deze potentiaalmaat wordt bijvoorbeeld gebruikt in de plantenfysiologie.

Op het grensvlak van twee vloeistoffen is alleen de druk continu (niet het druk-equivalent!).

1.5.6 *De kinetische energie van grondwater*

Uit de elementaire stromingsleer blijkt dat bij de stroming van water door buizen en kanalen, naast de potentiële energie, ook de kinetische energie een rol speelt (de wet van Bernouilli)¹⁾. Vergeleken met de snelheden van open water (orde van grootte in rivieren en kanalen is 0.01-1.0 m per

¹⁾ Zie tekstboeken natuurkunde of vloeistofmechanica.

seconde) zijn de snelheden van grondwater heel klein, namelijk in de orde van grootte van 0.01 - 1.0 m per dag, wat overeenkomt met ongeveer 10^{-5} - 10^{-7} m per seconde. Door deze kleine snelheden is ook de kinetische energie van grondwater zeer gering, de snelheidshoogte (de kinetische energie per gewicht, J N^{-1}) is gelijk aan:

$$h_k = \frac{\frac{1}{2}mv^2}{mg} = \frac{v^2}{2g} \quad (1.5-15)$$

Vergeleken met de stijghoogte kan men daarom de snelheidshoogte verwaarlozen. Dit betekent dat voor de beweging van grondwater alleen de potentiële energie van belang is.

Opgaven

1.5.6. In een weiland wordt een piëzometer geplaatst met een opening (filter) op 2.0 m beneden het maaiveld. Als er evenwicht is bereikt, staat er 1.40 m water in de buis. **a.** Wat is de stijghoogte ten opzichte van het maaiveld? **b.** Hoe groot is de druk van het water onder in de buis? **c.** Hoe groot is het druk-equivalent (t.o.v. maaiveld)? **d.** Als het grondwater in rust is, wat is dan de stijghoogte in een punt 1.0 m beneden het maaiveld?

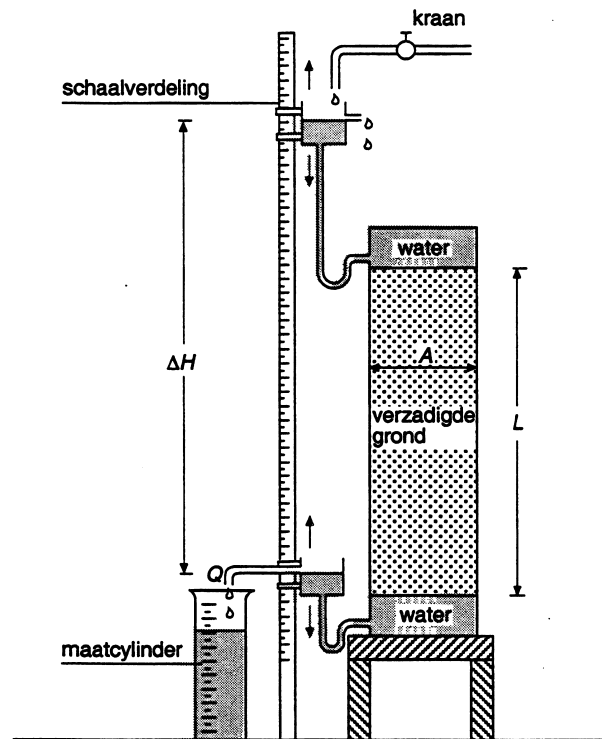
1.5.7. In een capillair van 1.0 m lengte en een straal van 1.0 mm stroomt water onder invloed van een stijghoogte verschil van 5 cm met een constante snelheid van 540 m per dag. Bereken de verhouding van de kinetische energie en (het verschil in) de potentiële energie per kg gewicht.

1.6 De beweging van grondwater

1.6.1 De wet van Darcy

De bewegingswet voor grondwater, die algemeen wordt toegepast voor de stroming van vloeistoffen door poreuze media, werd in 1855-56 experimenteel vastgesteld door Darcy. Darcy was een Frans ingenieur die belast was met de aanleg van de waterleiding voor de stad Dijon. Bij zijn proeven om het water te filteren door een zandbed, maakte hij gebruik van zandkolommen (zie figuur 1.6-1) en ontdekte de volgende relatie:

$$Q = k \frac{\Delta H}{L} A = k i A \quad (1.6-1)$$



Figuur 1.6-1 Schematische voorstelling van de proef van Darcy.

waarin:

- Q = het debiet $(\text{m}^3 \text{s}^{-1})$
- k = de doorlaatfactor (m s^{-1})
- ΔH = het verschil in stijghoogte (m)
- L = de lengte van de kolom (m)
- i = het verhang van de stijghoogte $(-)$
- A = het oppervlak van de dwarsdoorsnede van de kolom (m^2) .

In woorden luidt de wet van Darcy: de hoeveelheid water, die door een dwarsdoorsnede A van een poreus medium stroomt, is evenredig met het oppervlak, het verhang van de stijghoogte en een karakteristieke waarde k die doorlaatfactor of doorlatendheid wordt genoemd. De doorlaatfactor is een maat voor het gemak waarmee de vloeistof door het poreuze medium kan bewegen. Merk op

dat het stijghoogteverschil tussen boven en onderzijde van het grondmonster gelijk wordt gesteld aan het verschil tussen de waterniveaus in de overloopbakjes. Dit betekent dat we aannemen dat het energieverlies van de stroming buiten het grondmonster kan worden verwaarloosd.

De wet van Darcy kunnen we ook schrijven als:

$$v = k i \quad (1.6-2)$$

met:

$$v = \frac{Q}{A} = \text{de filtersnelheid (m s}^{-1}\text{)}$$

De filtersnelheid is een *volume-fluxdichtheid*, dat is het volume getransporteerde stof per eenheid van tijd en per eenheid van oppervlak van de doorsnede.

Omdat grondwatersnelheden in het algemeen zeer klein zijn, wordt meestal de dag als eenheid van tijd genomen, de filtersnelheid en de doorlatendheid worden dan opgegeven in m d⁻¹.

Darcy deed zijn proeven met een verticale grondkolom; voor het debiet maakt het echter niet uit wat de richting van de kolom is. De filtersnelheid wordt uitsluitend bepaald door de factoren k en i , en wel zo dat het water *stroomt in de richting van afnemende stijghoogte*. In figuur 1.6-1 verloopt de stroming daarom van boven naar beneden. Omdat snelheid een vector is, moet men aan de snelheid ook een teken voor de richting toekennen. De snelheid langs een coördinaatas, noemen we positief in de positieve richting van de as en we moeten daarom schrijven:

$$v = -k i = -k \frac{dH}{ds} \quad (1.6-3)$$

In vergelijking (1.6-3) is *de wet van Darcy als puntvergelijking* geschreven. Dat wil zeggen dat zij in elk punt van de grondkolom de fluxdichtheid beschrijft als functie van (de afgeleide van) de stijghoogte. Het minteken geeft aan dat de stroming verloopt in de richting van afnemende H .

In paragraaf 1.5 werd besproken dat de drijvende kracht in de richting s , gelijk is aan $-\frac{dH}{ds}$.

De filtersnelheid (een vector) is dus volgens Darcy recht evenredig met de krachtvector.

Het Darcy experiment is eendimensionaal, omdat het aangelegde stijghoogteverhang en de stroming slechts in één richting kunnen verlopen.

Hoewel de wet van Darcy gebaseerd is op empirie en waarneming, kunnen we haar als volgt verklaren: In de klassieke mechanica wordt aangetoond dat de snelheid van een voorwerp op ieder moment volgt uit de effecten van de netto kracht (die een verandering van de beweging tot gevolg heeft) én de kinetische energie. Bij grondwaterstroming is de kinetische energie verwaarloosbaar klein ten opzichte van de potentiële energiever verschillen die de drijvende kracht veroorzaken (zie opgave 1.5.7). De snelheid die een grondwaterdeeltje heeft op een bepaald tijdstip t , speelt dan ook geen rol bij de berekening van de snelheid op $t + \Delta t$. Met andere woorden: *richting en grootte van de snelheidsvector worden alleen bepaald door de drijvende kracht*. Bovendien blijkt dat de drijvende kracht in een poreus medium onmiddellijk een wrijvingskracht oproept van gelijke grootte. Hierdoor treedt geen versnelling op en blijft de filtersnelheid constant zolang ∇H constant is.

In paragraaf 1.5.3 werd besproken dat de totale drijvende kracht (per gewicht) gelijk is aan $-\nabla H$. De stroming vindt dus plaats in de richting van $-\nabla H$ en we kunnen schrijven:

$$\mathbf{v} = -k \nabla H \quad (1.6-4)$$

en uit de definitie van de gradiënt volgt:

$$\mathbf{v} = -\mathbf{e}_x k \frac{\partial H}{\partial x} - \mathbf{e}_y k \frac{\partial H}{\partial y} - \mathbf{e}_z k \frac{\partial H}{\partial z} \quad (1.6-5)$$

De fluxdichtheidsvector kan ook worden geschreven als:

$$\mathbf{v} = \mathbf{e}_x v_x + \mathbf{e}_y v_y + \mathbf{e}_z v_z \quad (1.6-6)$$

Uit vergelijking (1.6-5) en (1.6-6) volgt, dat voor ieder van de coördinaatrichtingen geldt:

$$\begin{aligned} v_x &= -k \frac{\partial H}{\partial x} \\ v_y &= -k \frac{\partial H}{\partial y} \\ v_z &= -k \frac{\partial H}{\partial z} \end{aligned} \quad (1.6-7)$$

De wet van Darcy is een 'lineaire wet' waar we hier bedoelen dat de fluxdichtheid een lineaire functie is van de stijghoogtegradiënt. Dit is het kenmerk van *laminare stroming* waarbij de opeenvolgende waterdeeltjes zich langs een voorspelbare vloeiende lijn voortbewegen. Bij stroming van water in beken, rivieren, kanalen en buizen kan *turbulente stroming* optreden waarbij wervels voorkomen (college Hydraulica). Wervels zijn onregelmatige, deels draaiende bewegingen, waardoor de opeenvolgende waterdeeltjes zich langs verschillende en niet exact voorspelbare lijnen bewegen.

De wet van Darcy is een empirische wet die volgt uit een groot aantal experimenten. Het is geen fundamentele wet van de natuur. De wet van Darcy is voor grondwater algemeen geldig, maar bij grote verhangen in zeer doorlatende media zoals grind, gescheurde basalt en verkarste kalksteen, treden afwijkingen op, omdat turbulente stroming een rol gaat spelen. Ook in weinig doorlatende klei en bij kleine verhangen kunnen afwijkingen optreden van de wet van Darcy, omdat het water zich als gevolg van de overheersing van matrixkrachten (Koorevaar, Menelik en Dirksen, 1983) niet meer als een Newton vloeistof gedraagt.

Een *verticale stroming over een eindige afstand d*, kan men met behulp van de wet van Darcy ook als volgt formuleren:

$$v = -\frac{k \Delta H}{d} = -\frac{\Delta H}{c} \quad (1.6-8)$$

met $c = \frac{d}{k}$ = de weerstand tegen verticale stroming (eenheid: dag).

De weerstand tegen verticale stroming van een grondlaag is gedefinieerd als het quotiënt van de dikte en de doorlatendheid van de doorstroomde laag.

In woorden luidt (1.6-8):

fluxdichtheid = stijghoogteverschil gedeeld door de weerstand.

Deze 'algemene fluxwet' is ook van toepassing in andere deelgebieden van de natuurkunde (elektriciteit - wet van Ohm, warmtestroming - wet van Fourier). Het - teken wordt bij formulering over eindige afstand meestal weggelaten.

1.6.2 De effectieve- of poriesnelheid

Omdat het water in de bodem alleen door de poriën stroomt, is slechts een gedeelte van de dwarsdoorsnede beschikbaar. De werkelijke snelheid in de poriën is daarom groter dan de

filtersnelheid. De fluxdichtheid uit de wet van Darcy is een fictieve snelheid alsof de gehele doorsnede beschikbaar is voor vloeistofstroming. Men kan bewijzen dat de relatieve oppervlakte van de doorsneden poriën in een dwarsdoorsnede gelijk is aan de volumefractie poriën. De gemiddelde werkelijke macroscopische snelheid is daarom:

$$v_e = \frac{v}{n_e} \quad (1.6-9)$$

waarin n_e = de effectieve porositeit, meestal gelijk aan de volumefractie poriën in de grond.

De effectieve snelheid is ook de snelheid waarmee conservatieve stoffen in het grondwater worden verplaatst. Conservatief wil zeggen dat de stoffen niet aan chemische reacties deelnemen en niet door de bodemdeeltjes worden geadsorbeerd. Bij de berekening van het transport van opgeloste stoffen is v_e daarom van groot belang.

1.6.3 Een andere formulering van de wet van Darcy

In paragraaf 1.5.3 vonden we dat de potentiaal alleen gedefinieerd is als de dichtheid ρ , een functie is van p , of constant is. Hebben we te maken met de stroming van verontreinigd grondwater, dan blijkt soms dat de concentratie van opgeloste stoffen zo hoog is, dat de dichtheid daardoor wordt beïnvloed, ofwel: $\rho = \rho(p, c)$. Omdat nu de dichtheid niet meer alleen afhangt van de druk, volgt uit vergelijking 1.5-5 dat de potentiaal in zulke gevallen een onbruikbare grootheid is. De reden daarvoor is dat er nu twee variabelen zijn, de dichtheid en de druk, die beide afhankelijk zijn van plaats en tijd, maar niet eenduidig aan elkaar gerelateerd. Met andere woorden: de dichtheid kan variëren onafhankelijk van de druk, waardoor de uitkomst van de lijnintegraal niet meer onafhankelijk is van de weg. De hoeveelheid arbeid en dus de potentiële energie in een punt, is in zulke gevallen niet ondubbelzinnig te berekenen uit de waarden van druk en dichtheid in begin- en eindpunt van de integraal (zie opgave 1.5.4.). Dat wil zeggen dat de wet van Darcy niet meer geschreven kan worden als vergelijking (1.6-4) waarin de fluxdichtheid een functie is van de gradiënt van één variabele. We moeten dus zoeken naar een andere formulering voor de wet van Darcy, en wel zo dat de invloed van beide variabelen daarin tot uiting komt. Zo'n formulering kan worden afgeleid uit de algemene bewegingsvergelijking voor laminaire stroming van newtoniaanse vloeistoffen, die bekend staat als de *Navier-Stokes vergelijking*. Daaruit volgt dat in poreuze media de filtersnelheid gelijk is aan:

$$\mathbf{v} = -\frac{\kappa}{\eta}(\nabla p + \rho g \nabla z) \quad (1.6-10)$$

waarin:

$$\begin{aligned} \kappa &= \text{de intrinsieke doorlatendheid} & (\text{m}^2) \\ \eta &= \text{de viscositeit van de vloeistof} & (\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}) \end{aligned}$$

De Navier-Stokes vergelijking (Bird, Stewart en Lightfoot, 1960; Koopmans, 1999) is een partiële differentiaalvergelijking, die wordt verkregen uit de krachtenbalans op een willekeurig controle-volume vloeistof. Uit de formule kan men lezen, dat de fluxdichtheid gelijk is aan $\frac{\kappa}{\eta}$ maal de som

van de krachten, respectievelijk ten gevolge van druk en zwaarte (per volume, zie paragraaf 1.3). Op de vloeistof werkt, behalve de aandrijvende kracht, uiteraard ook een wrijvingskracht. De grootte van de laatste wordt bepaald door de afstand tot de vaste fase. Omdat in een poreus medium die afstand zeer klein is, is de wrijvingskracht (relatief gezien) zeer groot, en wel gelijk aan de aandrijvende kracht. Er treedt daarom geen versnelling op. *In de poriën* bestaat dus een evenwichtstoestand. De intrinsieke doorlatendheid beschrijft alleen de eigenschappen van het poreuze medium (porositeit, poriëngrootte). De viscositeit is een maat voor de stroperigheid van het water. Wordt de dichtheid als een constante beschouwd, dan kan de experimentele vergelijking (1.6-10) gelijk worden gesteld aan (1.6-4). Invullen van (1.5-11) leert dat:

$$k = \frac{\rho g}{\eta} \kappa \quad (1.6-11)$$

Als de doorlatendheid k in alle coördinaatrichtingen hetzelfde is, spreken we van een *isotrope grond*. In de natuur komt het vaak voor dat de doorlatendheid in één richting sterk afwijkt van die in de andere richtingen. Men noemt dit *anisotropie*.

Zo kan in sedimentaire lagen de doorlatendheid in de verticale richting veel kleiner zijn door de aanwezigheid van zeer dunne (horizontale) kleibandjes. Strikt gesproken hebben we te maken met een heterogene grond, maar als de bodemlaag als één geheel wordt beschouwd noemen we haar anisotroop. Door tectonische- of glaciële krachten kunnen oorspronkelijk horizontale afzettingen scheef gesteld zijn. Hierdoor kan de anisotropie in willekeurige richtingen optreden.

Opgaven.

1.6.1. De energie van het water aan de onderzijde van de grondkolom van figuur 1.6-1 is kleiner dan aan de bovenzijde. a. Hoe groot is het verschil? b. Volgens de wet van het behoud van energie kan energie niet 'verdwijnen'. Wat is de oorzaak van het energieverval?

1.6.2. Waarom is het (in de opstelling van figuur 1.6-1) toelaatbaar om het energieverlies buiten het grondmonster te verwaarlozen?

1.6.3. Is vergelijking (1.6-3) ook juist als de positieve s -richting naar beneden wijst?

1.6.4. In een punt van een watervoerende laag varieert de stijghoogte in de x - en y -richting zodanig dat $\frac{\partial H}{\partial x} = 3 \cdot 10^{-3}$ en $\frac{\partial H}{\partial y} = 4 \cdot 10^{-3}$. Bereken grootte en richting van de vector grad H .

1.6.5. Bereken de weerstand van een 2.0 m dikke leemlaag waarvan de (verticale) doorlatendheid $0,005 \text{ m d}^{-1}$ bedraagt.

1.6.6. Een student antwoordt op een examen dat bij verticale grondwaterstroming de reistijd gelijk is aan de weerstand. Is dat in het algemeen juist? Zo niet, kan het onder bepaalde voorwaarde wel juist zijn?

1.6.7. Wat is de betekenis van ∇z in vergelijking (1.6-10)?

1.6.8. Bereken de intrinsieke doorlatendheid (bij 10°C) die overeenkomt met een doorlaatfactor van 1.0 m d^{-1}

voor η zie tabel 1.8-1, paragraaf 1.8.1.

1.6.9. Bereken de gemiddelde afstand van een waterdeeltje tot de vaste fase in een verzadigd poreus medium, dat bestaat uit bolletjes met een diameter van 1 mm (grof zand). Neem aan dat de porositeit 0.35 bedraagt. De inhoud van een bol is $\frac{4}{3} \pi r^3$ en de oppervlakte $4 \pi r^2$. Herhaal de berekening voor een diameter van 0.1 mm (fijn zand).

1.7 De continuum benadering van poreuze media

Grond is een poreus materiaal. Karakteristiek voor een poreus materiaal is, dat in een willekeurig controlevolume vaste fase én poriënruimte voorkomt. Kiest men het controlevolume niet te klein, dan is de verspreiding van beide min of meer gelijkmatig. Een volume van voldoende grootte bevat dus altijd vaste fase en poriënruimte. Is de poriënruimte gevuld met lucht en water, dan zijn er drie fasen en we spreken van de onverzadigde toestand. Is er alleen water aanwezig en dus een twee-fasen systeem, dan spreekt men van de verzadigde toestand.

We nemen aan dat de poriën met elkaar in verbinding staan. De beweging van water en opgeloste

stoffen vindt plaats door de gehele poriënruimte. De vloeistof fase wordt dus als een samenhangend geheel beschouwd dat grensvlakken heeft met de gasfase en de vaste stof.

Men zou nu de waterstroming en het stoftransport kunnen bestuderen door de natuurkundige verschijnselen te beschrijven in de poriën. Dit noemen we *de microscopische schaal*. Voor de waterstroming betekent het dat we de Navier-Stokes vergelijking moeten oplossen.

Voor de oplossing van een differentiaalvergelijking is het nodig de randvoorwaarden te kennen. In ons geval betekent het onder andere dat de afmetingen van de poriën overal bekend moeten zijn en analytisch kunnen worden beschreven. De vorm en afmetingen van de poriën kunnen echter, zonder speciale hulpmiddelen zoals NMR-spectroscopie¹⁾, niet worden waargenomen en zijn bovendien te gecompliceerd om meetkundig te beschrijven. Met andere woorden: een beschrijving van de stroming op microscopische schaal is niet mogelijk.

Om dit dilemma te omzeilen gebruiken we de zogenaamde continuumbenadering. Volgens de continuumbenadering wordt de werkelijke structuur, waarin verschillende fasen naast elkaar voorkomen, vervangen door een model waarin elke fase beschouwd wordt als een continuum dat het gehele stroomdomein in beslag neemt. De eigenschappen van het poreuze materiaal en de toestandsvariabelen (druk, stijghoogte, concentratie e.d.) van het continuum water kunnen nu in ieder punt worden gedefinieerd. Daartoe beschrijven we het probleem op de zogenaamde *macroscopische schaal*. Dat wil zeggen dat we rond een punt een volume grond kiezen waarvan de gemiddelde waarden van grondeigenschappen en toestandsvariabelen worden toegeschreven aan het punt. Zo'n volume moet zo groot zijn ten opzichte van de porie-afmetingen, dat de verhouding vaste fase : poriënruimte constant is. Anderzijds moeten we het volume klein kiezen ten opzichte van de afmetingen van het stroomdomein, maar zo dat het representatief is voor een gekozen (homogene) bodemlaag. Een dergelijk volume grond noemen we een representatief elementair volume (rev).

Bij de bespreking van de wet van Darcy werd deze benadering al toegepast. Vergelijking (1.6-4) beschrijft namelijk een relatie tussen macroscopische grootheden. Dat wil zeggen dat we bestuderen hoe *de grondkolom als geheel* invloed uitoefent op de hoeveelheid water die er door stroomt tengevolge van het opgelegde stijghoogteverschil. De grondkolom wordt als een 'zwarte doos' beschouwd: we proberen niet te achterhalen wat zich precies in de kolom afspeelt, maar zijn tevreden met de betrekking tussen stijghoogteverhang en fluxdichtheid.

In paragraaf 1.6 werd onderscheid gemaakt tussen de fluxdichtheid en de poriesnelheid. Daarmee werd al aangegeven dat de fluxdichtheid een fictieve snelheid is, alsof de gehele doorsnede voor vloeistofstroming beschikbaar is. De fluxdichtheid wordt in elk punt van het controlevolume

¹⁾ Nuclear Magnetic Resonance.

gedefinieerd, hoewel de vloeistofstroming alleen plaatsvindt in de poriën. Ook de vloeistofdruk en de stijghoogte bestaan in feite alleen in de met water gevulde poriën. Toch werd bij het schrijven van de wet van Darcy in vergelijking (1.6-3) en volgende, stilzwijgend aangenomen dat zij geldig zijn in ieder punt van het stroomdomein.

Door een rev te kiezen als kleinste eenheid, verkrijgen we voor de bodemeigenschappen volume gemiddelde coëfficiënten. Eigenschappen die afhankelijk zijn van de poriegeometrie, zoals de doorlatendheid, komen tot uiting door middel van één coëfficiënt die een macroscopisch volume-gemiddelde is van de effecten op microscopische schaal.

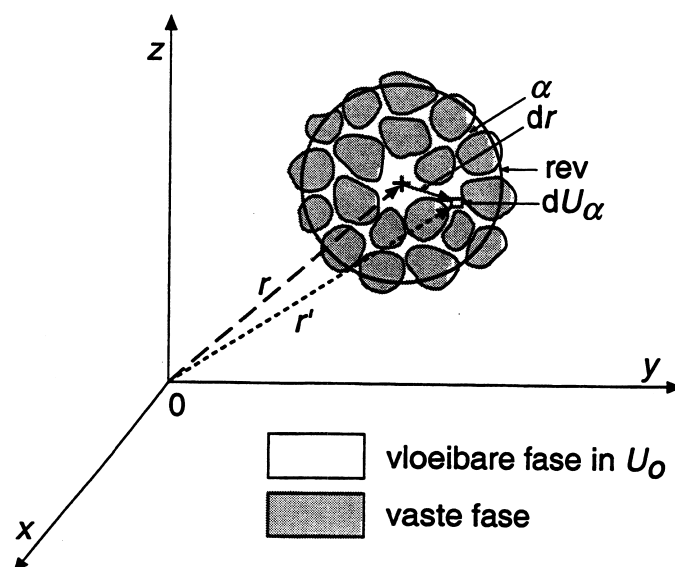
In de hydrologie wordt het transport van water en stoffen beschreven op macroscopische schaal. De toestandsvariabelen die we gebruiken zijn macroscopische (gemiddelde) grootheden.

We maken onderscheid tussen fase gemiddelden en intrinsieke fase gemiddelden. De eerste worden gemiddeld over het gehele rev $U_0(r)$, de laatste over het volume van de betreffende fase in het rev.

Het volumegemiddelde van een eigenschap B wordt als volgt berekend:

$$\bar{b}_\alpha(r,t) = \frac{1}{U_0} \int_{U_{0\alpha}} b_\alpha(r',t;r) dU_\alpha(r') \quad (1.7-1)$$

$\bar{b}_\alpha$ is het gemiddelde in fase α van eigenschap B per volume van het poreuze medium.



Figuur 1.7-1 Doorsnede door een rev (naar Bear, 1993).

Het intrinsieke fase gemiddelde volgt uit:

$$\bar{b}_\alpha^\alpha(r,t) = \frac{1}{U_{0\alpha}} \int_{U_{0\alpha}} b_\alpha(r',t;r) dU_\alpha(r') \quad (1.7-2)$$

waarin nu gemiddeld wordt over het volume van fase α , $U_{0\alpha}(r)$.

Eén en ander wordt verduidelijkt met behulp van figuur 1.7-1.

Opgave 1.7.1. Benoem de volgende grootheden als volume- of intrinsieke fase gemiddelden: fluxdichtheid, poriesnelheid, waterdruk, concentratie van opgeloste stoffen.

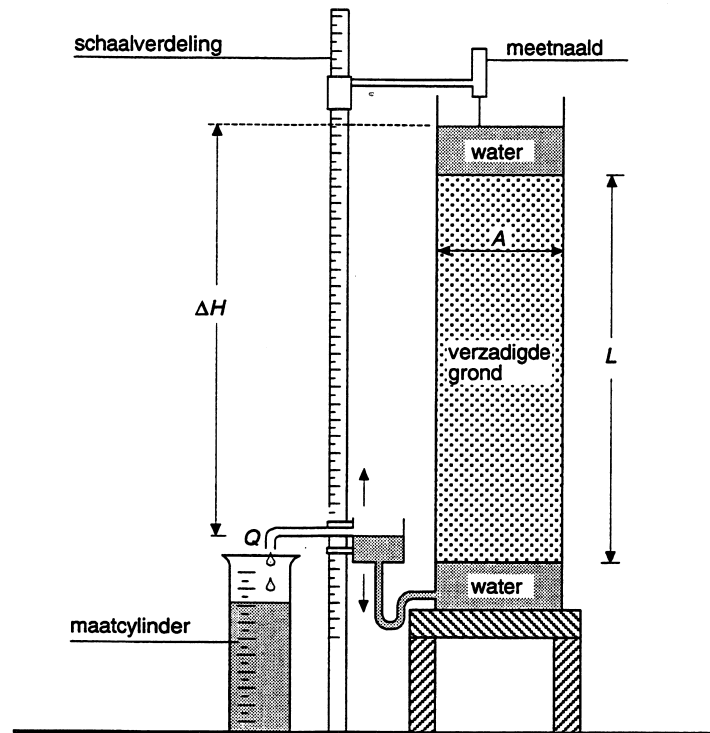
1.8 De bepaling van de doorlatendheid

De doorlatendheid van grond kunnen we op verschillende manieren bepalen en wel met behulp van:

- ☐ laboratoriummethoden
- ☐ veldmethoden
- ☐ empirische en correlatieve methoden.

1.8.1 Laboratoriummethoden

In het laboratorium maakt men gebruik van onberoerde grondmonsters die in het veld worden verzameld. Om een monster te nemen worden meestal de zogenaamde Kopecky ringen gebruikt, met een inhoud van 100 cm³. Om een gemiddelde waarde te vinden, is het nodig op één locatie meerdere monsters te nemen. Enerzijds door de geringe afmetingen van de ringen, anderzijds door de variabiliteit van de doorlatendheid in het veld. Dat wil zeggen dat op korte afstand van elkaar gemeten waarden, aanmerkelijke verschillen kunnen vertonen. Nadat de grondmonsters verzadigd zijn, wordt een stijghoogteverschil aangelegd en de doorstromende hoeveelheid water gemeten. Bij een gelijkblijvend stijghoogteverschil spreken we van een stationaire methode, als tijdens de proef het stijghoogteverschil verandert, zoals in de 'falling head method', van een niet-stationaire methode (zie figuur 1.8-1).



Figuur 1.8-1 Schematische voorstelling van een niet-stationaire laboratoriumproef.

In het laboratorium gemeten waarden moet men in het algemeen corrigeren, omdat de viscositeit (en in mindere mate ook de dichtheid) afhankelijk is van de temperatuur, zie tabel 1.8-1. In Nederland is de temperatuur van het grondwater 10-12 °C en dus veel lager dan de kamertemperatuur. De correctie kan men vinden met behulp van vergelijking 1.6-11 en is:

$$k_{10} = k_T \frac{\eta_T}{\eta_{10}} \quad (1.8-1)$$

waarin:

k_T = de doorlaatfactor gemeten bij T °C

k_{10} = de doorlaatfactor bij 10 °C

η_T = de viscositeit bij T °C

η_{10} = de viscositeit bij 10 °C

Tabel 1.8-1 Verandering van de viscositeit en de dichtheid met de temperatuur.

$T (^{\circ}\text{C})$	$\eta \text{ (kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}\text{)}$	$\rho \text{ (kg m}^{-3}\text{)}$
0	1.79×10^{-3}	999.841
5	1.57×10^{-3}	999.965
10	1.31×10^{-3}	999.700
15	1.14×10^{-3}	999.099
20	1.00×10^{-3}	998.203
25	0.89×10^{-3}	997.044

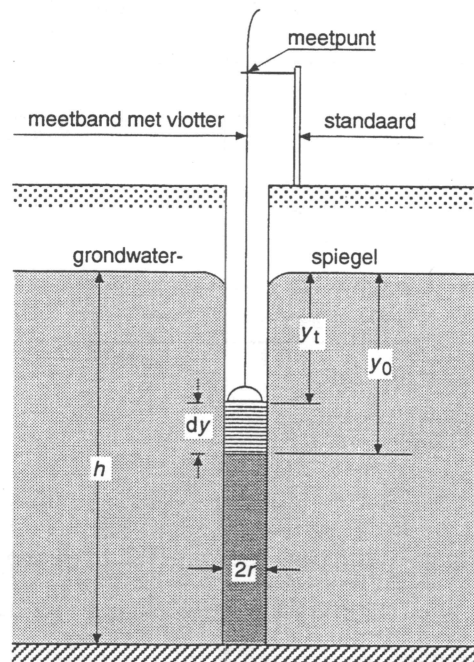
1.8.2 Veldmethoden

Bij metingen in het veld kunnen boorgaten, piëzometers of pompproeven worden gebruikt. De eerste twee geven een aanwijzing omtrent de doorlatendheid van de bovenste grondlagen, terwijl pompproeven voornamelijk gebruikt worden om de doorlatendheid van diepere lagen te meten.

Het principe van alle drie methoden is dat de toestroming van water, gehoorzamen aan de wet van Darcy, een functie is van de doorlatendheid en het aangelegde potentiaalverschil dat ontstaat door het uitpompen van water. Bij boorgaten en piëzometers is de stijgsnelheid van de waterspiegel in boorgat of piëzometer een maat voor de doorlatendheid van de directe omgeving. Bij pompproeven is dat het debiet van de put en de daardoor ontstane verlaging van de stijghoogte in een gebied rondom de put.

De *boorgatmethode* werd ontwikkeld door Hooghoudt (1936). Stel we hebben een situatie zoals schematisch weergegeven in figuur 1.8-2, met een grondlaag die aan de onderzijde wordt begrensd door een ondoorlatende laag. In het boorgat laten we de waterspiegel tot evenwicht komen, zodat de waterspiegel staat op een hoogte h , boven de ondoorlatende laag. Wordt nu op $t = 0$ de waterstand in het boorgat verlaagd (over een afstand y_0), door met een puls plotseling water te verwijderen, dan begint er water toe te stromen. Hooghoudt nam aan dat het water het boorgat binnenstroomt over de natte oppervlakte $2\pi rh$. Gedurende een tijdstap dt is de hoeveelheid dQ die in het boorgat stroomt:

$$dQ = - \pi r^2 dy = -A v dt = 2\pi rhk idt \quad (1.8-2)$$



Figuur 1.8-2 Boorgatmethode bij ondiepe ondoorlatende laag.

Het eerste - teken geeft aan dat dQ een positief getal is bij afnemende y , het tweede - teken geeft aan dat v in de negatieve richting wijst bij positieve dQ , i is de gradiënt van de stijghoogte op de rand van het boorgat. Hooghoudt vond uit metingen in zandtank, dat i een functie is van y , r en

$$h: i = \frac{0.19y}{rh}$$

Na invullen en oplossen van (1.8-2) vond Hooghoudt voor k :

$$k = \frac{523000 r^2 \log y_1/y_2}{t_2 - t_1} \quad \text{m d}^{-1} \quad (1.8-3)$$

waarin y_1 en y_2 de waarden van y zijn op t_1 en t_2 . De uitkomst k staat in m d^{-1} als de tijd $(t_2 - t_1)$ in seconden wordt ingevuld en r in m. De doorlatendheid kan dus worden berekend als direct na het verwijderen van het water op verschillende tijdstippen t de afstand y wordt gemeten. Dit kan met behulp van een vlotter waaraan een meetband is bevestigd.

Hooghoudt ontwikkelde ook een formule voor het geval de onderzijde van het boorgat niet tot de ondoorlatende laag reikt.

Ernst (zie Van Beers, 1958) heeft grafieken geconstrueerd die gebaseerd zijn op de relatie:

$$k = - C \frac{dy}{dt} \quad (1.8-4)$$

waarin C een factor is afhankelijk van:

- de ligging van de ondoorlatende laag ten opzichte van de bodem van het boorgat;
- de diameter van het boorgat;
- de diepte van het boorgat ten opzichte van het freatisch vlak h ;
- de plaats van de waterspiegel in het boorgat ten opzichte van het freatisch vlak y .

Figuur (1.8-3) is een voorbeeld voor een boorgat met een diameter van 8 cm.

Bij de *piëzometermethode* (Luthin en Kirkham, 1949) wordt eerst een boorgat gemaakt tot vlak boven de diepte waar we de doorlatendheid willen meten. In het boorgat wordt vervolgens een buis geplaatst van dezelfde diameter als het boorgat die alleen aan de onderzijde open is. Daarna wordt het boorgat over een geringe afstand (bijvoorbeeld 10 cm) verder uitgediept met een boor van kleinere diameter. Na verwijdering van een hoeveelheid water uit het boorgat, wordt de stijgsnelheid in de buis gemeten. Met de door Kirkham ontwikkelde formule kan daaruit de doorlatendheid worden berekend. (Zie Handleiding Veldpracticum Hydrologie, vakgroep Waterhuishouding, Universiteit Wageningen).

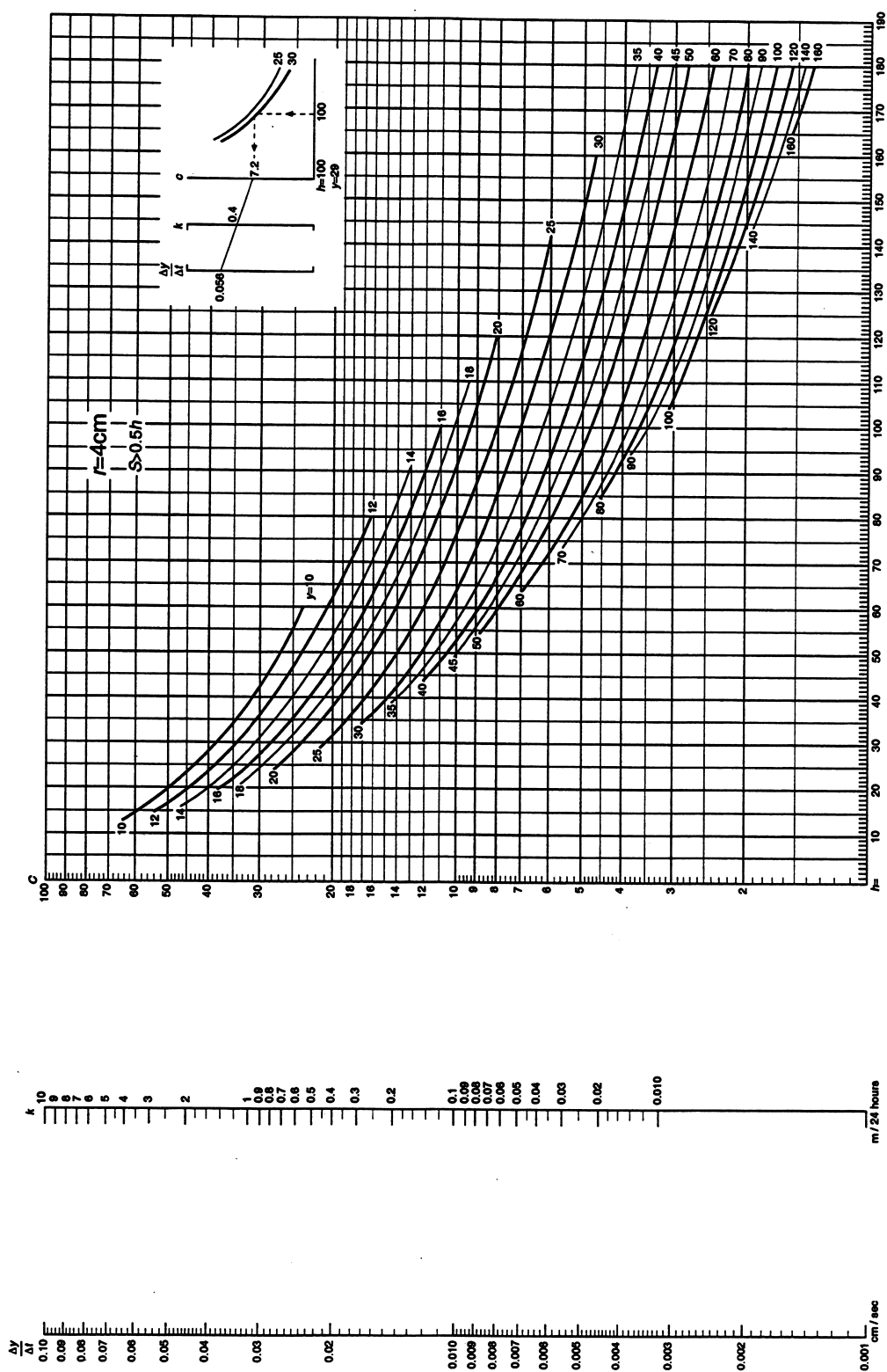
De voordelen van de piëzometermethode zijn:

- de doorlatendheid van afzonderlijke lagen kan gemakkelijk worden gemeten;
- de piëzometer kan worden gebruikt bij water op het maaiveld (veen- en moerasgebieden, slecht ontwaterde landbouwgronden et cetera).

Vergeleken met de boorgatmethode wordt in een kleiner volume grond gemeten, waardoor toevallige afwijkingen groter zijn dan bij de boorgatmethode.

Uit *pompproeven* (Kruseman en De Ridder, 1991) verkrijgen we gegevens over een groter areaal dan bij de voorgaande twee veldmethoden. In feite wordt bij pompproeven niet de doorlatendheid bepaald, maar het product kD , het zogenaamde *doorlaatvermogen* (Engels: transmissivity T), waarin D de dikte is van de watervoerende laag. Een pompproef is als het ware de boorgatmethode op grote schaal. Er wordt nu echter gedurende de proef voortdurend water uit de put gepompt en de daling van de stijghoogte die daar het gevolg van is in de omgeving van de put, wordt gemeten met behulp van waarnemingsfilters die op verschillende afstanden van de put worden geplaatst.

Behalve het doorlaatvermogen, kan men met een pompproef ook de weerstand c van een boven liggende slecht doorlatende laag bepalen.



Figuur 1.8.3 Bepaling van de doorlaatfactor volgens de boorgatmethode; diameter boorgat 8 cm, bodem boorgat ver boven ondoorlatende laag (naar Ernst, 1950).

1.8.3 Correlatiemethoden

De doorlatendheid bij zand wordt vooral bepaald door de poriën tussen de korrels. De doorlatendheid van fijn zand is bij eenzelfde stapeling van de korrels kleiner dan bij grof zand (hoewel het poriëngehalte in beide gevallen gelijk is).

Men kan daarom de doorlatendheid van zandgronden ook relateren aan de korrelgrootte analyse. Volgens Kozeny (1933) geldt de empirische vergelijking:

$$k = \frac{C}{\eta U^2} \frac{n^3}{(1-n)^2} \quad \text{m d}^{-1} \quad (1.8-5)$$

waarin:

C = een constante $(\text{kg m}^{-2}\text{s}^{-2})$

n = poriënfractie $(-)$

Het specifiek oppervlak is gedefinieerd als de verhouding van het gesommeerde oppervlak van korrels met diameter d tot het gesommeerde oppervlak van eenzelfde massa korrels van 1 cm doorsnede. Worden de korrels als ronde bolletjes beschouwd, dan is gemakkelijk aan te tonen dat $U = 1/d$, als d in cm en $U = 0.01/d$, als d in m.

Hooghoudt (1934) en Fahmy (1961) hebben voor zandige gronden schattingen gegeven voor de constante C , respectievelijk 320 en 340. Worden alle dimensies in het SI stelsel opgegeven behalve k (m d^{-1}), dan kan men gemiddeld $C \approx 330$ aanhouden.

Voor mariene zandgronden heeft Fahmy doorlaatfactoren geschat als functie van het U -cijfer en het lutumgehalte (fractie $< 2 \mu\text{m}$). Het is gebleken dat het lutumgehalte een grote invloed uitoefent.

Bij klei wordt de doorlatendheid vooral bepaald door de structuur. Door de aanwezigheid van scheuren of gangen (bio-poriën) kan klei een zeer grote doorlatendheid hebben. Zijn deze macro-poriën afwezig dan is de doorlatendheid zeer klein, vooral in 'ongerijpte' toestand of als de klei - in de ondergrond - is samengeperst. Sommige kleien zijn in droge toestand sterk gescheurd, maar zwellen bij bevochtiging zo sterk, dat de scheuren zich sluiten en de klei nagenoeg ondoorlatend kan worden (knipklei, sommige montmorilloniet-kleien, kleien met veel geadsorbeerd Na).

Bij veen hangt de doorlatendheid sterk af van de veensoort: mosveen is meestal weinig doorlatend, rietveen goed doorlatend.

Vaste gesteenten zijn zeer weinig doorlatend, tenzij scheuren of gangen voorkomen. De meeste

gesteenten vertonen barsten (diaklazen), maar deze dragen niet veel bij aan de doorlatendheid.

Bazalt (krimpscheuren!) kan zeer doorlatend zijn. Kalksteen, indien verkarst, is buitengewoon doorlatend.

Tabel 1.8-2 geeft een overzicht van de doorlatendheid van een aantal gronden.

Tabel 1.8-2 Doorlaatfactoren (orde van grootte).

Grondsoort	k (m d ⁻¹)
klei, sterk gescheurd (Zuiderzeepolders)	10 - 100
klei, sterk doorgroeid (Suriname)	> 10
zand, grof met enig grind	10 - 50
zand, middelfijn (dekzand)	1 - 5
klei, enige poriën of scheuren	0.5 - 2
zand, uiterst fijn (Blokzand)	0.2 - 0.5
licht zavel, gerijpt	0.02 - 0.2
klei, zeer dicht (Komklei, slechte laag)	0.005 - 0.05
klei, zeer dicht (Knipklei)	< 0.005
klei, slap, ongerijpt	10 ⁻⁴ - 10 ⁻⁵
klei, ongerijpt, samengeperst	10 ⁻⁵ - 10 ⁻⁶
veenmosveen (afh. van humificatiegraad)	10 ⁻³ - 10
zeggeveen (afh. van humificatiegraad)	0.05 - 20
rietveen (afh. van humificatiegraad)	0.05 - 50

Opgaven

1.8.1. Stel, we besluiten in het laboratorium de doorlatendheid van een grond te meten met de onderstaande opstelling.

Op $t = 0$ is de grond verzadigd met water en is $h = h_0$. De hoeveelheid water boven het grondmonster wordt niet aangevuld. Tijdens de proef wordt de hoogte van de waterspiegel gemeten. De uitstroming aan de onderzijde is 'vrij' en de luchtdruk atmosferisch.

a. Leid een vergelijking af voor de doorlatendheid als functie van h , L en de tijd t .

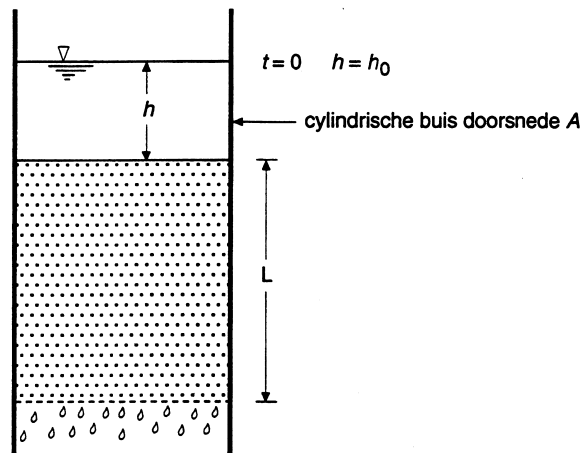
Aanwijzing: zoek de relatie tussen het volume water dat per seconde door de kolom stroomt en de verandering (per seconde) van de waterhoogte boven het grondmonster.

b. Bereken de doorlatendheid in m d⁻¹ als gegeven is:

$$L = 20.0 \text{ cm}$$

$$t = 0 \quad h = 10.0 \text{ cm}$$

$$t = 5 \text{ min} \quad h = 8.2 \text{ cm}$$



Figuur 1.8-4 Niet-stationaire stroming door een cilindervormig grondmonster.

1.8.2. Bij metingen voor de boorgatmethode volgens Hooghoudt, worden de volgende waarnemingen verricht:

t	y	t	y
0	32.0	20	25.9
10	28.8	30	23.2

t is gemeten in seconden, y is de afstand (in cm) zoals aangegeven in figuur 1.8-2.. De diameter van het boorgat is 8 cm en de waterdiepte in het boorgat op $t = 0$ (dus vóórdat er water uit wordt verwijderd) is 50 cm. De bodem van het boorgat ligt op een ondoorlatende laag. Bereken de doorlatendheid van de grond in m d^{-1} .

2 DIFFERENTIAALVERGELIJKINGEN EN DE BEREKENING VAN GRONDWATER-STROMING

Om in een bepaald gebied de grondwaterstroming te kunnen beschrijven, is kennis van de bewegingswet alléén niet voldoende. Met de wet van Darcy kan men weliswaar in ieder gewenst punt de fluxdichtheid berekenen, maar inzicht in het gedrag van het systeem, inclusief de interactie met de omgeving, verkrijgen we niet. Om dat te bereiken is het noodzakelijk om de differentiaalvergelijking die de stroming beschrijft, op te lossen. In de meeste gevallen gebruikt men een differentiaalvergelijking waarin de stijghoogte de gezochte variabele is.

In dit hoofdstuk wordt uiteengezet hoe de differentiaalvergelijking wordt verkregen. In het geval van niet-stationaire stroming is de invloed van berging daarbij belangrijk. Omdat het oplossen van de algemene drie-dimensionale vergelijking meestal een zeer gecompliceerd, vaak onoplosbaar, probleem is, past men in zulke gevallen een vereenvoudiging toe die bekend staat als de Dupuit-aanname. Paragraaf 2.6 en 2.7 geven voorbeelden van zulke berekeningen.

2.1 Inleiding

In het voorgaande hebben we geleerd dat de beweging van grondwater wordt beschreven door de wet van Darcy. In de wet van Darcy (vergelijking (1.6-4)) staan twee belangrijke grootheden die de fluxdichtheid bepalen te weten: de doorlatendheid en de stijghoogtegradiënt. Voor de berekening van de fluxdichtheid is het noodzakelijk de getalwaarde van beide grootheden te weten. De meetmethoden ter bepaling van stijghoogte en doorlatendheid werden besproken, zodat de grondwaterstroming op een bepaalde plaats in principe kan worden berekend. In de praktijk van het (grond)waterbeheer is het dikwijls gewenst om aan te geven wat de effecten zullen zijn van bepaalde ingrepen in de waterhuishouding. Er wordt dus verlangd een gefundeerde schatting te maken van de waterbeweging nú en in de toekomst. Metingen van toekomstige situaties zijn uiteraard niet beschikbaar.

Willen we de stroming kunnen *voorspellen*, wat meestal gebeurt met modelberekeningen, dan is het wenselijk *in ieder punt van het stroomdomein eerst de stijghoogte te berekenen als functie van de tijd*(waarom?). Ook als we verdere bijzonderheden willen weten, zoals de druk van het grondwater op een bepaalde plaats, dan kunnen we die verkrijgen met behulp van de stijghoogte. We zoeken dus naar de ruimtelijke verdeling van de stijghoogte. Wiskundig gesproken komt het er op neer dat we de functie $H(x,y,z)$ moeten kennen. *In de praktijk van de grondwaterstroming verstaan we onder de oplossing van een probleem dan ook meestal het vinden van de functie $H(x,y,z)$ voor iedere waarde van t .* We vinden H als de oplossing van een differentiaalvergelijking; de oplossing wordt verkregen met behulp van de randvoorwaarden. Welke vergelijking we moeten oplossen, komen we te weten door toepassing van natuurkundige beginselen.

In de klassieke natuurkunde (dus met uitzondering van de verschijnselen waarbij kernreacties optreden) spreekt men van de wet van behoud van massa, dat wil zeggen dat massa niet vernietigd noch gecreëerd kan worden. Het continuïteitsbeginsel is een direct uitvloeisel van deze wet en zegt *dat de netto vloeistofmassa die een controlevolume gedurende een tijdstap Δt binnenstroomt, gelijk is aan de verandering van de vloeistofmassa binnen het controlevolume.*

De massabalansvergelijking, die de wiskundige formulering van dit beginsel is, vormt de basis voor de afleiding van de differentiaalvergelijking voor grondwaterstroming. In paragraaf 2.2 wordt het continuïteitsbeginsel toegepast op de stroming door een verzadigd poreus medium.

De differentiaalvergelijking die grondwaterstroming beschrijft in termen van de stijghoogte, verkrijgt men door de balansvergelijking te combineren met de wet van Darcy.

Eén en ander wordt in de twee volgende paragrafen nader toegelicht.

2.2 Het continuïteitsbeginsel en de balansvergelijking

We beschouwen een *willekeurig* gefixeerd, klein controlevolume $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$ van een verzadigd poreus medium (zie figuur 2.2-1). In het centrum van het kubusje ligt het punt M met coördinaten $x = a$, $y = b$ en $z = c$. Eerst berekenen we de netto massa die het controlevolume binnenstroomt en onderzoeken daarna wat het effect is van het krimpen van het controlevolume tot een punt.

Het volume vloeistof dat per seconde door een willekeurig elementair oppervlak ΔA stroomt, is gelijk aan $v_n \Delta A$, waarin v_n de snelheidscomponent is loodrecht op ΔA . De daarbij getransporteerde hoeveelheid massa is dan $\rho v_n \Delta A$.

De volumefluxdichtheidsvector $\mathbf{v}$ kunnen we ontbinden in de cartesische componenten v_x , v_y en v_z , zie vergelijking (1.6-6). Hetzelfde geldt uiteraard voor de *massafluxdichtheid* $\rho \mathbf{v}$:

$$\rho \mathbf{v} = \mathbf{e}_x \rho v_x + \mathbf{e}_y \rho v_y + \mathbf{e}_z \rho v_z \quad (2.2-1)$$

De hoeveelheid massa die het controlevolume gedurende de tijdstap Δt in de x -richting *binnenstroomt* door de achterzijde, $\Delta y \Delta z$ (die loodrecht staat op de x -as) is gelijk aan:

$$\{(\rho v_x)_{a-\frac{1}{2}\Delta x}\} \Delta y \Delta z \Delta t \quad (2.2-2)$$

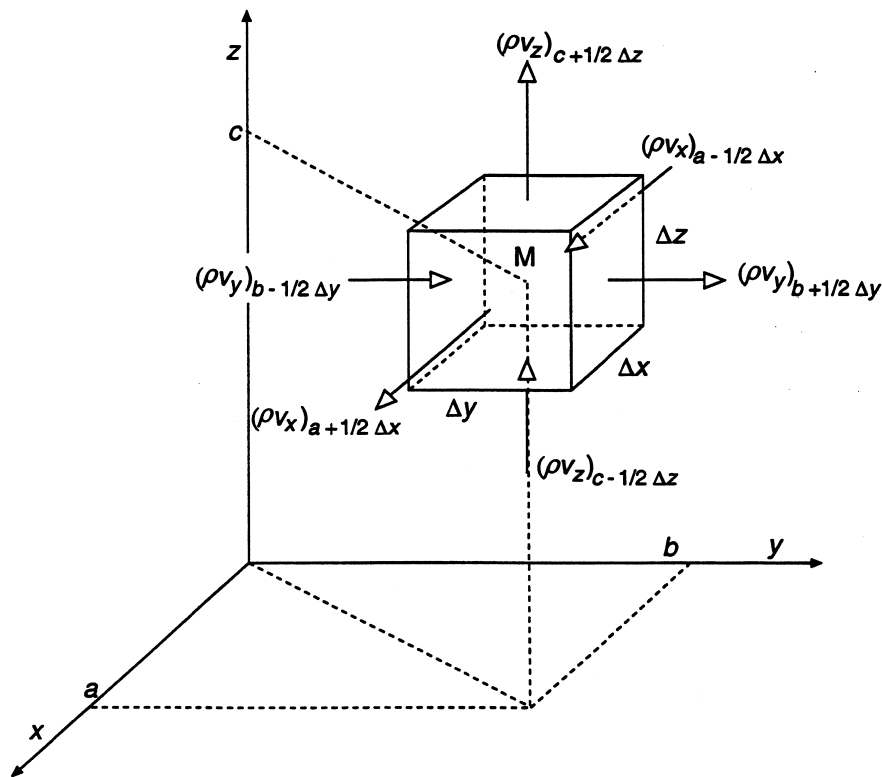
waarbij het subscript $a - \frac{1}{2}\Delta x$ aangeeft dat wordt bedoeld de waarde van de massafluxdichtheid in

het punt $(a - \frac{1}{2}\Delta x, b, c)$. De naar *buiten* gerichte massafluxdichtheid door de voorzijde kan op overeenkomstige wijze worden geschreven. De netto massa die het controlevolume in de *x*-richting binnentreedt is derhalve gelijk aan:

$$\{(\rho v_x)_{a-\frac{1}{2}\Delta x} - (\rho v_x)_{a+\frac{1}{2}\Delta x}\}\Delta y\Delta z\Delta t \quad (2.2-3)$$

waarbij we veronderstellen dat ook de dichtheid veranderlijk is.

Het verschil van de massafluxdichtheid ρv_x in de punten $x = a - \frac{1}{2}\Delta x$ en $x = a + \frac{1}{2}\Delta x$ kunnen we schrijven als functie van de massafluxdichtheid in M door gebruik te maken van de Middelwaarde stelling uit de differentiaalrekening (zie paragraaf 1.3).



Figuur 2.2-1 Waterbalans van een controlevolume $\Delta x\Delta y\Delta z$.

De netto massa van (2.2-3) wordt dan:

$$\{(\rho v_x)_{a-\frac{1}{2}\Delta x} - (\rho v_x)_{a+\frac{1}{2}\Delta x}\} \Delta y \Delta z \Delta t = - \left(\frac{\partial \rho v_x}{\partial x} \right)_{x^*} \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t \quad (2.2-4)$$

waarin x^* een punt is tussen $x = a - \frac{1}{2}\Delta x$ en $x = a + \frac{1}{2}\Delta x$. Overeenkomstige betrekkingen zijn geldig in de y - en z -richting. De netto massa die het controlevolume binnentreedt, is uiteraard de som van de componenten in de drie coördinaatrichtingen. Volgens het continuïteitsbeginsel moet die som gelijk zijn aan *de verandering (tijdens Δt) van de massa water in het controlevolume*.

De massa in het controlevolume kan veranderen, doordat de massadichtheid van het water of de verhouding waarin water en vaste stof voorkomen verandert. Het laatste betekent een verandering van de porositeit. Beperken we ons nu in eerste instantie tot de stroming van zuiver water bij constante temperatuur, dan kan verandering van de dichtheid van water alleen het gevolg zijn van verandering van de druk. Dat geldt overigens ook voor de vaste stof. Omdat de samendrukbaarheid van de minerale delen ettelijke malen kleiner is dan van water, wordt er in het vervolg geen rekening mee gehouden.

In de verzadigde toestand is de massa water Δm , in het controlevolume ΔV , gelijk aan het product van de dichtheid in het zwaartepunt en het volume water $V_w (= n\Delta V)$. Men kan de *verandering* van de massa water daarom schrijven als: de afgeleide (naar de tijd) van $\rho n\Delta V$, maal de lengte van de tijdstap.

$$\Delta (\Delta m) = \frac{\partial \rho n}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t \quad (2.2-5)$$

waarin het eerste Δ -teken staat voor: de verandering van.

Na gelijkstelling, deling door $\Delta x \Delta y \Delta z \Delta t$ en het nemen van de limiet, dat wil zeggen het krimpen van het controlevolume tot een punt waardoor (x^*, y^*, z^*) samenvalt met punt M (a, b, c) , is het resultaat:

$$-\frac{\partial \rho v_x}{\partial x} - \frac{\partial \rho v_y}{\partial y} - \frac{\partial \rho v_z}{\partial z} = \frac{\partial \rho n}{\partial t} \quad (2.2-6)$$

Dit is de massabalansvergelijking, ook wel de continuïteitsvergelijking genoemd.

De verandering van de dichtheid met de druk wordt weergegeven door de zogenaamde

samendrukbaarheidscoëfficiënt β_p , die gedefinieerd is als¹⁾:

$$\beta_p = - \frac{1}{V_w} \frac{\partial V_w}{\partial p} \Big|_T = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial p} \Big|_T \quad (2.2-7)$$

met $|_T$ wordt bedoeld: bij constante temperatuur.

Vergelijking (2.2-6) werd afgeleid voor een controlevolume waarin geen brontermen voorkomen. Dat wil zeggen dat er alleen waterverplaatsing optreedt volgens de wet van Darcy. In bijzondere gevallen kan het voorkomen dat water wordt toegevoegd of onttrokken 'in een punt'. Een waterput bijvoorbeeld wordt in het kaartvlak voorgesteld door een punt. De flux (volume water per volume grond per tijdseenheid) wordt geacht plaats te vinden in het punt. Overigens kan de vergelijking in zo'n punt niet worden opgelost, omdat het een singulier punt is (de snelheid is er theoretisch oneindig groot). Als er brontermen aanwezig zijn, wordt de balansvergelijking:

$$-\nabla \cdot \rho \mathbf{v} + W^* \rho^* = \frac{\partial \rho n}{\partial t} \quad (2.2-8)$$

waarin W^* de bronsterkte is ($\text{m}^3\text{m}^{-3}\text{d}^{-1}$) en ρ^* de dichtheid van het bronwater. Een positieve bronsterkte betekent dat er water wordt toegevoegd, een negatieve bronsterkte dat er water onttrokken wordt. In het laatste geval is ρ^* gelijk aan ρ .

Als de dichtheid van water als onveranderlijk wordt beschouwd (ρ is constant) en het medium als onsamendrukbaar ($n = \text{constant}$), leidt dit bij afwezigheid van een bronterm tot:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (2.2-9)$$

De bovengenoemde veronderstellingen betekenen dat vloeistof en medium niet elastisch zijn, zodat er in het controlevolume *geen bergingsverandering* kan optreden. Merk op dat dit ook tot gevolg heeft dat de balansvergelijking niet meer afhankelijk is van t . Vergelijking (2.2-9) kan worden opgevat als het inwendig product van de vectoren ∇ en $\mathbf{v}$ (zie vergelijking 1.3-26).

De uitdrukking $\nabla \cdot \mathbf{v}$ die bekend staat als de divergentie van $\mathbf{v}$, is de nettoflux per volume uit het volume ΔV .

¹⁾ Zie ook paragraaf 1.4.

In dit geval is de netto flux nul en krijgen we:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \text{div } \mathbf{v} = 0 \quad (2.2-10)$$

Opgaven

2.2.1. Leid vergelijking (2.2-6) af, uitgaande van vergelijking (2.2-3) door, inplaats van de Middelwaarde stelling, gebruik te maken van de Taylor-reeks voor een continue functie.

2.2.2. Geldt (2.2-10) ook in een anisotrope grond?

2.3 De vergelijking van Laplace

2.3.1 Algemeen

Door nu de balansvergelijking te combineren met de bewegingsvergelijking (de wet van Darcy), *ontstaat de differentiaalvergelijking die grondwaterstroming beschrijft in termen van de stijghoogte H* . Invullen van de wet van Darcy voor een isotrope grond (1.6-4) in vergelijking (2.2-10) levert:

$$\nabla \cdot (\nabla H) = \nabla^2 H = \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial z^2} = 0 \quad (2.3-1)$$

In vergelijking (2.3-1) staan verschillende schrijfwijzen voor de vergelijking van Laplace. Het is een tweede-orde, lineaire differentiaalvergelijking die de stijghoogte beschrijft als functie van de coördinaten x , y en z indien k , ρ en n constant zijn. De oplossing van de Laplace-vergelijking, dat wil zeggen de ruimtelijke verdeling van H als functie van de coördinaten x , y en z , is afhankelijk van de randvoorwaarden.

Het product kH wordt ook wel de snelheidspotential Φ genoemd en het zal duidelijk zijn dat de Laplace-vergelijking ook geldt voor Φ .

Een veel voorkomend misverstand is dat de Laplace-vergelijking alleen stationaire stroming beschrijft, omdat de rechterzijde gelijk is aan nul. Inderdaad is bij stationaire stroming de verandering van de berging in ieder elementair controlevolume, *binnen* het stroomdomein, gelijk aan nul. In de hier gegeven afleiding werd echter in eerste instantie uitgegaan van een niet-stationaire stroming, maar werd aangenomen dat water en poreus medium beide onsamendrukbaar zijn. En ook dat betekent dat de hoeveelheid massa in een elementair controlevolume niet

verandert. Het gevolg is, dat stijghoogteveranderingen die worden opgelegd aan de rand, direct doorwerken in het gehele stroomdomein. De randvoorwaarden in een niet-stationair probleem zijn dus een functie van de tijd en *in het stroomdomein* geldt de Laplace-vergelijking.

2.3.2 Vereenvoudigingen bij de afleiding van de Laplace-vergelijking

In het bovenstaande zijn een aantal vereenvoudigingen toegepast waardoor de werkelijke situatie kan afwijken van de berekende. De veronderstellingen zijn de volgende:

- De dichtheid van grondwater wordt niet beïnvloed door opgeloste stoffen (zie paragraaf 1.6.3).
- De grond is homogeen Dit is maar zelden het geval, vaak is het profiel gelaagd waarbij we veronderstellen dat elk van de lagen homogeen is. We kunnen dan voor iedere laag afzonderlijk de oplossing berekenen, mits de randvoorwaarden bekend zijn. Omdat de stroming in een bepaalde laag beïnvloed wordt door de stroming in aangrenzende lagen, moet het gehele systeem simultaan worden opgelost.
- De grond is isotroop. Ook dit is dikwijls niet het geval. De meeste gronden zijn fijn gelaagd en daardoor anisotroop. Liggen deze fijne laagjes horizontaal, dan is de doorlatendheid van de grond als geheel groter in horizontale dan in verticale richting. Bij tweedimensionale stroming is dus meestal $k_x > k_z$ (waarbij x de richting van de horizontale en z de richting van de verticale as voorstelt). In een willekeurige richting α is de doorlatendheid k_α . Al deze vectoren k_α in een bepaald punt vormen met hun punt een ellips die k_x als halve grote as heeft en k_z als halve kleine as. Het algemene geval van anisotropie (lagen niet horizontaal, maar scheef) wordt hier niet behandeld. Zie Verruijt, 1970 en Koopmans, 1999.
- Grond en grondwater zijn onsamendrukbaar waardoor *geen bergingsveranderingen* optreden; dit is bij hoge benadering juist. Afwijkingen treden op bij snelle drukveranderingen in afgesloten watervoerende lagen (Engels: confined aquifers). Zij worden veroorzaakt door volumeverandering van de grond (krimpen en zwellen) of door kleine gasbelletjes die uitzetten en inkrimpen (zie paragraaf 2.5). Dergelijke snelle veranderingen treden bijvoorbeeld op:
 - bij de voortplanting van getijden in het grondwater nabij de kust;
 - direct na het aanzetten van een pomp die grondwater onttrekt.
 Voor de meeste andere gevallen zijn de afwijkingen onbelangrijk.

Opgaven

2.3.1. Waarom noemen we de Laplace-vergelijking een *lineaire* differentiaalvergelijking?

2.3.2 Wat is het equivalent van vergelijking (2.3-1) indien de grond anisotroop is, dat wil zeggen voor het geval dat k_x , k_y en k_z niet aan elkaar gelijk zijn?

2.3.3. Een horizontale grondkolom, lengte L , constante doorsnede A , grenst aan beide uiteinden aan een waterreservoir; het waterpeil in het linker reservoir is h meter hoger dan in het rechter reservoir. Kies voor de stijghoogte links h , rechts nul.

a. Schrijf de Laplace-vergelijking op die in dit geval van toepassing is.

b. Bereken het verloop van de stijghoogte in de kolom door de Laplace-vergelijking op te lossen.

c. Bereken de stijghoogte in het midden van de kolom.

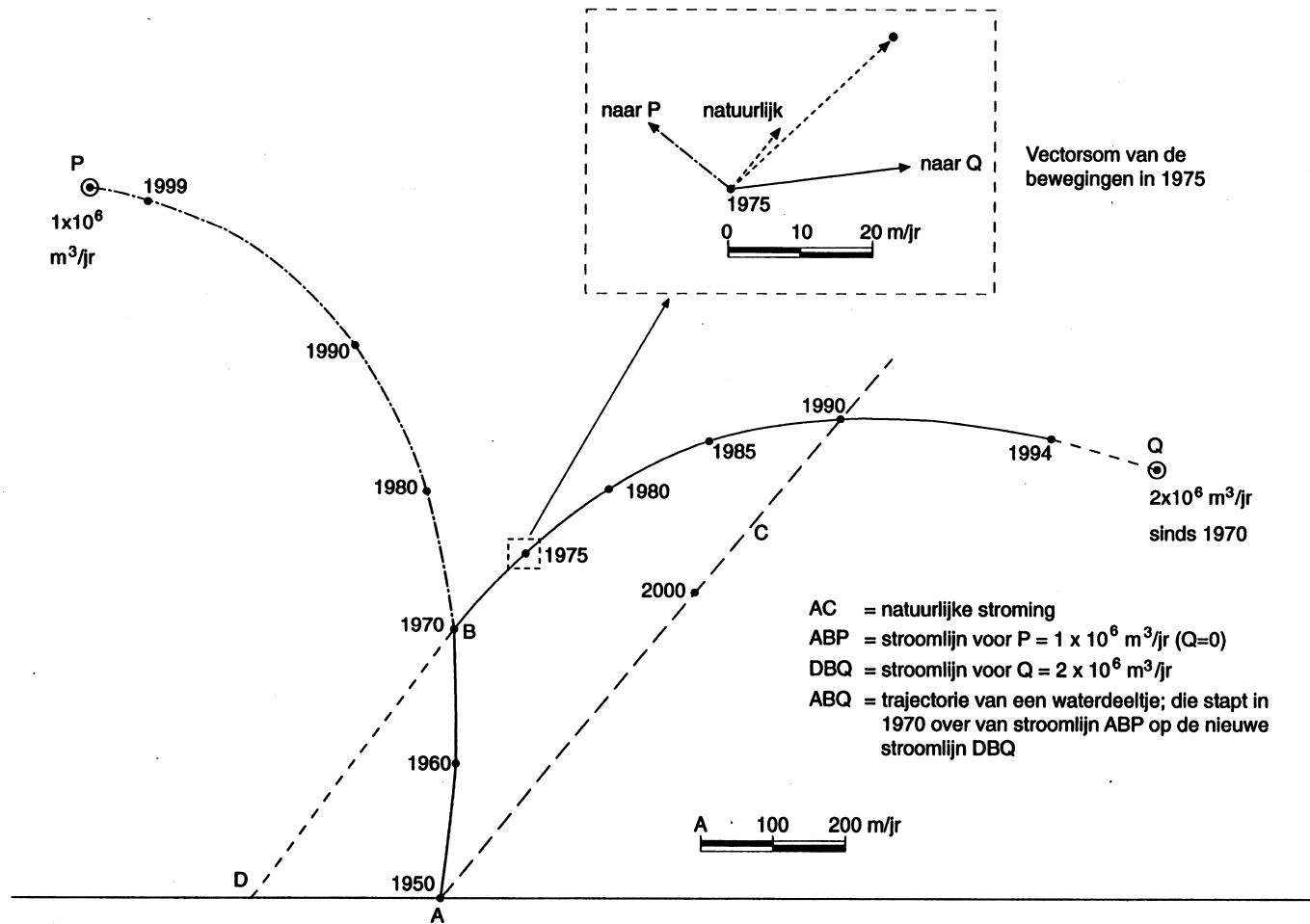
2.4 Equipotentiaallijnen en stroomlijnen

Uit de definitie van de potentiaal en de richting van de drijvende kracht volgt dat water beweegt in de richting van afnemende potentiaal. Als we metingen van de stijghoogte in kaart brengen, kunnen we dus ook onmiddellijk de algemene stromingsrichting bepalen.

Een *equipotentiaalvlak* is gedefinieerd als de meetkundige plaats van punten waar H of Φ éénzelfde waarde heeft. Bij tweedimensionale weergave van een stroming spreken we van *equipotentiaallijnen*. Het blijkt (zie paragraaf 1.3.3) dat in isotrope grond de stroming plaatsvindt in een richting loodrecht op de equipotentiaallijnen. In een stationaire stroming (dat is een stroming die onafhankelijk is van t) wordt het pad van een vloeistofdeeltje beschreven door de zogenaamde *stroomlijnen*. De stroomlijnen worden wiskundig beschreven door de stroomfunctie, die ook aan de Laplace-vergelijking blijkt te voldoen (Koopmans, 1999). In een niet-stationaire stroming geven de stroomlijnen een momentane toestand weer; elk waterdeeltje verplaatst zich op een bepaald ogenblik in de richting van de raaklijn aan de stroomlijn.

Het pad dat een waterdeeltje in het verleden heeft afgelegd of in de toekomst zal volgen, kan dus bij verschillende stroomlijnbeelden behoren. Dergelijke paden noemt men *trajectoriën*; zij zijn vooral van betekenis voor de verplaatsing van verontreinigingen. Een voorbeeld geeft figuur 2.4-1. In A is in 1950 een hoeveelheid chemisch afval gestort. Er is een natuurlijke stroming in noord-oostelijke richting die water zou voeren van A naar C. Het pompstation P onttrekt per jaar 1 miljoen m^3 water en zou omstreeks 2000 bedreigd worden door verontreiniging die zich verplaatste langs de stroomlijn ABP. In 1970 werd een nieuw pompstation Q in bedrijf genomen (2 miljoen m^3 per jaar) waardoor een nieuw stroomlijnenpatroon ontstond waarvan de stroomlijn DBQ deel uitmaakt. Het waterdeeltje uit A, dat inmiddels punt B had bereikt, heeft zijn weg vervolgd langs BQ en dus het pad ABQ afgelegd. In 1995 is het in Q aangekomen. Dergelijke trajectoriën zijn het eenvoudigst te bepalen door het optellen van snelheidsvectoren (vectorsom van de bewegingen naar het noordoosten, naar P en naar Q).

Figuur 2.4-1 Stroomlijnen en trajectoriën.



Zoals in paragraaf 1.3 wordt besproken is een vectorsom een meetkundige operatie. Een voorbeeld (voor 1975) geeft de inzet van figuur 2.4-1. In dit geval is aangenomen dat de verplaatsing van de opgeloste stof hetzelfde is als van vloeistofdeeltjes in die positie. Bij niet-stationaire stromingen kunnen we het pad van een deeltje in dergelijke praktijksituaties alleen berekenen door gebruik te maken van een numerieke simulatie. Dat wil zeggen dat het stromingsproces voor iedere tijdstap wordt berekend, inclusief de verplaatsing (die gelijk is aan $v\Delta t$) én de nieuwe positie van deeltjes, alvorens de daarop volgende tijdstap kan worden berekend.

In regionale grondwaterstudies neemt men meestal aan dat de stroming in een watervoerende laag vrijwel horizontaal verloopt. De equipotentiaalvlakken staan dan verticaal. Op dezelfde wijze als men hoogtelijnen op een topografische kaart tekent, kunnen de snijlijnen van de equipotentiaalvlakken met een horizontaal kaartvlak worden getekend. We noemen deze lijnen de *isohypsen*. Horizontale stromingen komen veel voor in watervoerende pakketten waarvan de dikte klein is ten opzichte van de horizontale afmetingen (Engels: extended aquifers).

Voorbeeld: het pleistocene lagenpakket in Nederland heeft een dikte van 100-300 m en de horizontale afmetingen zijn groter dan 10 km. Stromingen die over grote afstanden verlopen moeten dan nagenoeg horizontaal zijn. In de praktijk worden kaarten getekend waarop lijnen van gelijke stijghoogte zijn weergegeven; uiteraard ten opzichte van een bepaald referentievlak, zoals het gemiddeld zeeniveau (in Nederland NAP). We noemen zulke kaarten *isohypsenkaarten*. Ze kunnen worden getekend van:

- het freatisch vlak;
- filters op een bepaalde diepte (bijvoorbeeld NAP -25 m, zie figuur 2.4-2);
- filters in een bepaalde laag (bijvoorbeeld het Pleistoceen van West-Nederland).

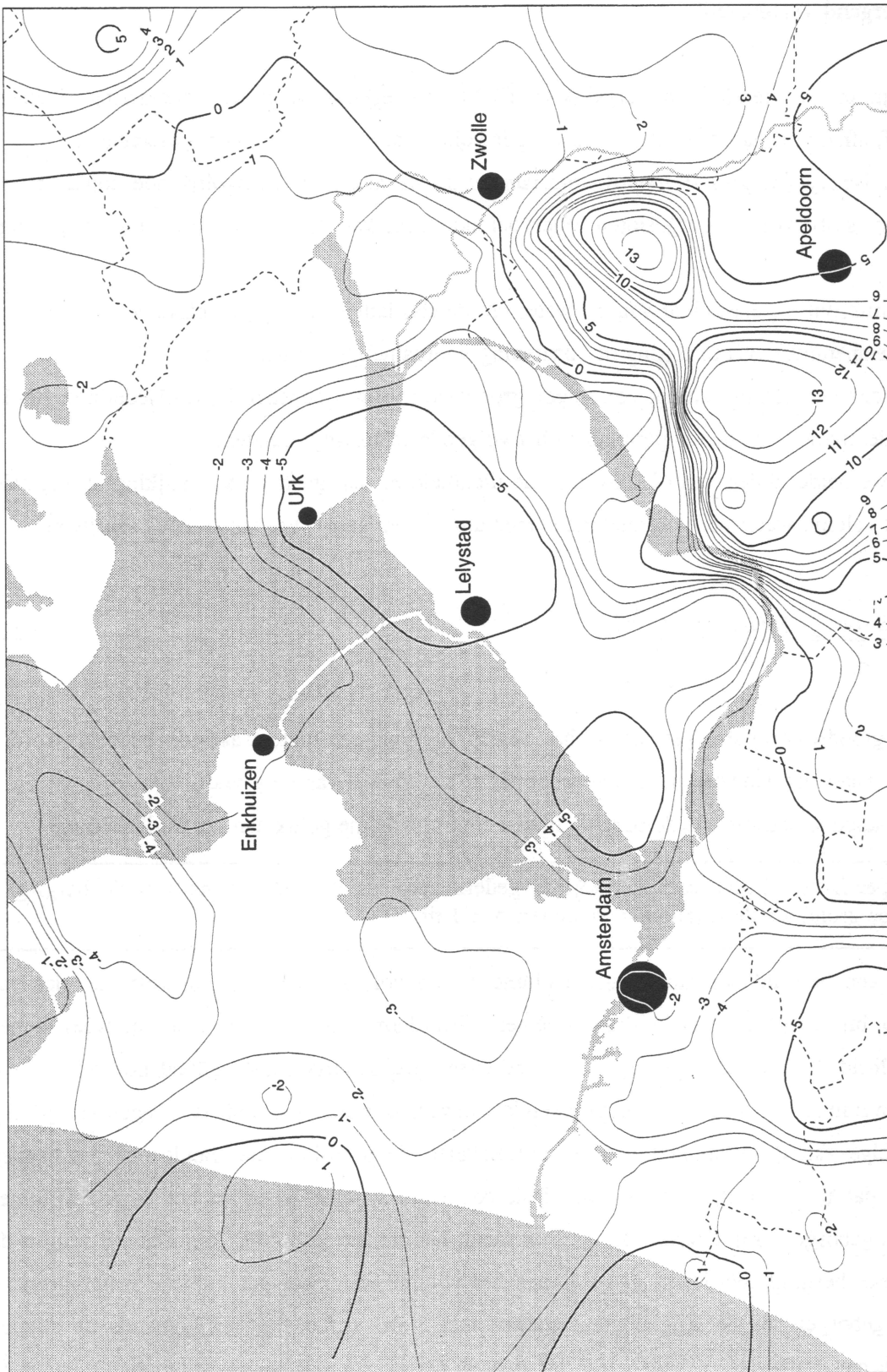
Soms zijn deze stijghoogten nagenoeg gelijk, maar meestal treden tussen verschillende lagen verschillen op, omdat in de bodem ook weinig doorlatende lagen aanwezig zijn. Men kan dan voor elke watervoerende laag een afzonderlijke isohypsenkaart vervaardigen.

Het debiet q per meter doorsnede ($\text{m}^2 \text{d}^{-1}$) van de aquifer is bij horizontale stroming gelijk aan de fluxdichtheid v maal de dikte D :

$$q = vD = -kD\nabla H$$

(2.4-1)

Het product kD ($\text{m}^2 \text{d}^{-1}$) wordt *het doorlaatvermogen van de watervoerende laag* genoemd. De gradiënt (∇H) kan bijvoorbeeld worden geschat uit de isohypsenkaart.



Figuur 2.4-2 Isohypsens van het diepe grondwater in het IJsselmeergebied (bron: NITG, 1993).

2.5 Bergend vermogen

De term ter rechterzijde in vergelijking (2.2-6) vertegenwoordigt de verandering (toename is positief, afname negatief) van *watermassa* per volume poreus medium per tijdseenheid.

Bij een verzadigde grondwaterstroming van constante kwaliteit (gelijkblijvende concentratie van opgeloste stoffen) in een afgesloten watervoerende laag, kan die massaverandering het gevolg zijn van:

- de druk, via de elasticiteit van het water en de elasticiteit van het korrelskelet;
- de temperatuur, via uitzetting of inkrimping voornamelijk van het water.

Omdat de temperatuur van het verzadigde grondwater vrijwel constant is, (in Nederland 10 -12°C) wordt de invloed van de temperatuur in het volgende achterwege gelaten.

Delen we beide zijden van (2.2-6) door de dichtheid ρ , dan geeft de vergelijking de verandering van het volume water per volume poreus medium (in een punt). We kunnen dus schrijven:

$$-\frac{\nabla \cdot \rho \mathbf{v}}{\rho} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho n}{\partial t} = -\frac{1}{V} \frac{\partial V_w}{\partial t} \quad (2.5-1)$$

In de grondwaterhydrologie wordt het begrip *berging* gebruikt, waarmee bedoeld wordt: het *volume* water dat aanwezig is in een nader aan te geven deel van de grond.

In verzadigd grondwater is de berging in een controlevolume gelijk aan het poriënvolume.

De specifieke bergingscoëfficiënt (S_p) is gedefinieerd als de verandering van de berging per volume grond als de stijghoogte verandert met 1 m.

Als in een bepaald constant controlevolume V een volume water V_w aanwezig is, dan zal dit volume bij toename van de druk afnemen. Daardoor kan echter in het controlevolume een hoeveelheid ΔV_w worden geborgen. Wij rekenen deze geborgen hoeveelheid positief, hoewel de volumeverandering van het oorspronkelijk aanwezige water negatief is. Tegelijkertijd neemt, tengevolge van de elasticiteit van het korrelskelet, de porositeit toe. Beide effecten hebben tot gevolg dat bij toename van de waterdruk een extra volume water in het controlevolume kan worden geborgen. Bij afname van de druk treedt het omgekeerde effect op. Dat wil zeggen dat de specifieke bergingscoëfficiënt gelijk is aan het volume water dat per kubieke meter grond extra wordt geborgen als de stijghoogte toeneemt met 1 m (of daaruit vrijkomt als de stijghoogte afneemt met 1 m). De eenheden zijn: m³ (water) per m³ (grond) per m (stijghoogte) = m⁻¹. We kunnen dus schrijven:

$$S_s = -\frac{1}{V} \frac{\partial V_w}{\partial H} \quad (2.5-2)$$

Behalve de elasticiteit van de vloeistof, kan ook het vrijkomen respectievelijk oplossen van gassen in het grondwater een rol spelen. Indien er gasbelletjes aanwezig zijn, levert de volumeverandering daarvan een zeer belangrijke bijdrage aan het bergend vermogen. *De aanwezigheid van gasbelletjes betekent in feite dat we te maken hebben met een onverzadigde toestand.* Is er gas aanwezig, dan reageert dit op drukveranderingen met een verandering van het volume volgens de gaswet (wet van Boyle). De samendrukbaarheidscoëfficiënt van gassen β_g (de verandering van het volume gas per kubieke meter gas per drukverandering van één Pa bij constante temperatuur) is gelijk aan:

$$\beta_g = -\frac{1}{V_g} \frac{\partial V_g}{\partial p} \text{ (Pa}^{-1}\text{)}.$$

Nu kunnen gasbellen in de grond alleen blijven bestaan als het water verzadigd is met gas; zolang het water onverzadigd is zal het gas oplossen. Is de waterfase verzadigd, dan zal er volgens de wet van Henry bij drukverlaging gas uit vrijkomen en bij drukverhoging gas in oplossen. Deze berging door vrijkomen of oplossen van gas komt slechts langzaam tot stand. Dit effect kan ook met behulp van een coëfficiënt c_H (de verandering van het volume water per kubieke meter water per drukverandering van één Pa) worden berekend.

Regenwater bevat opgelost N_2 , O_2 en CO_2 , in de bodem wordt daaraan nog CO_2 toegevoegd. Komt dit water in diepere lagen, dan wordt het onder de daar aanwezige hogere druk onverzadigd aan gassen. Een uitzondering treedt op als het water sterk wordt verwarmd, bijvoorbeeld door vulkanisme. *In normale koele watervoerende lagen zal echter geen gasvorming optreden.*

Als echter in de grond omzettingen plaats vinden, bijvoorbeeld anaerobe afbraak van organische stof waardoor methaan (CH_4) ontstaat, dan kan verzadiging optreden en kunnen ook gasbellen worden gevormd.

Indien er gas aanwezig is, dan blijkt dat de belangrijkste bijdrage aan de specifieke bergingscoëfficiënt wordt geleverd door effecten van de wet van Henry en van de wet van Boyle.

De vroegere "gasbronnen" in de droogmakerijen van West-Nederland werden tot in het goed doorlatende Pleistocene geslagen, waarin de stijghoogte boven het polderpeil ligt. In het aangevoerde diepe (ca. 30 m) grondwater is methaan opgelost dat bij verminderde druk vrij komt en in een kleine gashouder werd opgevangen. Het gas werd voor huishoudelijk gebruik benut. Het water uit deze gasbronnen stroomde direct in de poldersloot. Omdat het opkwellende water veel zout (en stikstof en fosfaat) bevat betekende dit een aanmerkelijk "zoutbezwaar". In Noord-Holland waren er in 1940 ongeveer 2200 gasbronnen, waaruit per dag ca. honderdduizend kubieke meter brak water opwelde. In 1980 waren hiervan nog ruim 500 over en in 1995 nog

ca. 300. Voor het gebruik van een bron moet een geldelijke heffing worden betaald, die gebaseerd is op de hoeveelheid zout en sinds 1-1-'95 ook op zuurstofbindende stoffen die worden geloosd. De aanleg van nieuwe gasbronnen is thans door de strenge eisen die aan een vergunning worden gesteld, vrijwel onmogelijk. Het beleid is erop gericht de bronnen op te heffen

In een verzadigde toestand geldt dat de verandering van de berging per kubieke meter poreus medium per tijdseenheid gelijk is aan:

$$-\frac{1}{V} \frac{\partial V_w}{\partial t} = S_s \frac{\partial H}{\partial t} \quad (2.5-3)$$

Vergelijking (2.5-1) wordt nu:

$$-\nabla \cdot \mathbf{v} - \frac{\mathbf{v} \cdot \nabla \rho}{\rho} = S_s \frac{\partial H}{\partial t} \quad (2.5-4)$$

en omdat de tweede term meestal zeer klein is (ten opzichte van de andere), kunnen we haar verwaarlozen. Door invullen van de wet van Darcy wordt de differentiaalvergelijking:

$$k \nabla^2 H = S_s \frac{\partial H}{\partial t} \quad (2.5-5)$$

Dit is de algemene (driedimensionale) differentiaalvergelijking die grondwaterstroming beschrijft in een isotroop medium. Voor Nederlandse aquifers is de waarde van de specifieke bergingscoëfficiënt in de orde van grootte van 10^{-4} . De totale bergingsverandering per vierkante meter (per m stijghoogteverschil) wordt de bergingscoëfficiënt S genoemd (CHO-TNO, 1986) en is in een (gedeeltelijk) afgesloten aquifer theoretisch gelijk aan de S_s maal de dikte D van de watervoerende laag:

$$S = S_s D \quad (2.5-6)$$

De *berging in freatisch grondwater* treedt voornamelijk op bij het freatisch vlak. De volume verandering is hier het gevolg van het vol- of leeglopen van poriën.

De bergingsverandering treedt dus op bij schommelingen in de grondwaterstand. Hierbij is niet het

gehele poriënvolume betrokken, omdat in de onverzadigde zone vlak boven de grondwaterspiegel reeds een deel van de porieruimte gevuld is met water. De bijdragen van de eerder genoemde elastische effecten zijn bij freatische berging van ondersgeschikt belang, mede omdat de 'vrije' grondwaterspiegel een sterk matigende invloed heeft op mogelijke drukvariaties.

Bij freatisch grondwater is de bergingsverandering veel groter (orde van grootte 10^{-1}) dan in afgesloten grondwater. Meestal wordt de berging beschouwd per vierkante meter van de gehele freatische aquifer, het 'nader aan te geven deel van de grond' (zie definitie van de berging) is dan het volume van 1 m^2 over de gehele dikte van de watervoerende laag. De bergingscoëfficiënt in freatische situaties wordt ook wel de opbrengstcoëfficiënt S_y genoemd. Men kan, met betrekking tot de waterberging, de poriën in de grond onderscheiden als:

- Microporiën, waaruit het water niet onder invloed van de zwaartekracht kan worden verwijderd.
- Capillaire poriën, waaruit het water wel onder invloed van de zwaartekracht kan worden verwijderd. Zij blijven echter tot een zekere hoogte boven het freatisch vlak gevuld en lopen eerst bij een zekere zuigspanning (Engels: air-entry value) leeg.
- Macroporiën, zoals scheuren e.d., die geen capillaire eigenschappen bezitten.

De capillaire poriën en de macroporiën zijn verantwoordelijk voor het bergend vermogen bij freatisch water.

Als het grondwater dicht onder het maaiveld komt, dan veroorzaken de capillaire poriën een verandering van S_y met de grondwaterdiepte. Bij diepe grondwaterstand ($> 1.5 \text{ m}$ beneden maaiveld) nadert S_y tot een constante:

$$S_y = \theta_{\text{sat}} - \theta_{\text{fc}} \quad (2.5-7)$$

waarin:

θ_{sat} is vochtgehalte bij verzadiging.

θ_{fc} is vochtgehalte bij veldcapaciteit.

Het 'vrije' grondwater vormt een reservoir, dat in natte tijden gevuld wordt en in droge tijden leegloopt. Alleen bij stationaire toestand treedt evenwicht op, waarbij: $\text{aanvoer} = \text{afvoer}$ (zie tabel 2.5-1).

Opgaven

2.5.1. Bereken de hoeveelheid water die per km^2 vrij komt uit een aquifer van 50 m dikte als de

stijgheight 1.0 m wordt verlaagd. Neem aan dat het korrelskelet star is, dat de poriënfractie 0,35 bedraagt en dat de specifieke bergingscoëfficiënt gelijk is aan $1.0 \cdot 10^{-4} \text{ m}^{-1}$.

2.5.2. Hoe verandert vergelijking (2.5-5) in een anisotroop medium?

Tabel 2.5-1 Invloed van berging en samendrukking.

	afgesloten watervoerende laag	laag met vrije grondwater-spiegel
bergingsmogelijkheid voortplanting veranderingen soort stroming	zeer gering ('nul') zeer snel ('onmiddellijk') bijna steeds stationair	vrij groot veel trager a) stationair bij constante aanvoer b) niet-stationair

2.6 De berekening van grondwaterstromingen

2.6.1 Inleiding

De Laplace-vergelijking is geldig in ieder punt van het stroomdomein mits aan de aannamen (dichtheid en porositeit zijn constant) wordt voldaan. Om een grondwater probleem op te lossen moet men de differentiaalvergelijking oplossen met inachtneming van de vigerende randvoorwaarden. Als de Laplace-vergelijking niet van toepassing is, moet men uiteraard een andere vergelijking oplossen. Wanneer bergingsveranderingen een rol spelen is dat bijvoorbeeld vergelijking (2.5-5). Ook is het mogelijk dat een geheel andere vergelijking wordt verkregen op grond van aannamen die het stroombeeld vereenvoudigen (zie paragraaf 2.6.3).

Men kan grondwaterstromingen onderscheiden in (zie tabel 2.6-1):

- ☐ stationaire stroming: geen veranderingen met de tijd;
- ☐ niet-stationaire stroming: verandert met de tijd.

Bij stationaire grondwaterstromingen is de divergentie van de fluxdichtheid gelijk aan nul. Dat geldt in ieder punt van het stroomdomein. Als we een klein controlevolume beschouwen, betekent dit *in* = *uit*, met andere woorden: er treedt geen verandering van de berging op. Bij niet-stationaire stromingen treedt meestal wél een *bergingsverandering* op. Alleen wanneer ρ en n constant zijn (water en grond onsamendrukbaar) is ook bij verzadigde grondwaterstroming de bergingsverandering in het controlevolume nul, en geldt de Laplace-vergelijking.

De Laplace-vergelijking kan dus zowel stationaire als niet-stationaire stromingen beschrijven, het zijn de randvoorwaarden die bepalen of de stroming varieert met de tijd.

Bij de afleiding van de Laplace-vergelijking werd aangenomen dat de vloeistof en het poreuze medium onsamendrukbaar zijn. Zoals al werd opgemerkt in paragraaf 2.3 heeft dit tot gevolg dat stijghoogteveranderingen die optreden aan de rand, ogenblikkelijk doorwerken in het gehele stroomdomein.

Tabel 2.6-1 Kenmerken van stationaire en niet-stationaire stroming.

stationair ('steady state')	niet-stationair ('non-steady state')
- aanvoer = afvoer - geen verandering in berging - geen verandering met de tijd - vast (eenduidig) verband tussen afvoer en stijghoogte - afvoer reageert 'direct' op aanvoer	- aanvoer $\neq$ afvoer - verandering in berging - stroming verandert met de tijd - geen eenduidig verband tussen afvoer en stijghoogte - afvoer vertraagd t.o.v. aanvoer

Bij een niet-elastische vloeistof zal een drukverandering zonder enige vertraging direct doorwerken in het gehele stroomdomein. In werkelijkheid is water enigszins elastisch en kunnen er dus wél veranderingen van de dichtheid optreden. Uit beschouwingen over geluidsgolven (Resnick, Halliday en Krane, 1992) blijkt, dat een drukverandering in een vloeistof zich verplaatst met de snelheid van het geluid. De snelheid van geluid in een

vloeistof is: $v = \sqrt{\frac{1}{\beta_p \rho}}$; in zuiver water van 10°C is dat 1445 m s⁻¹.

Bij de bespreking van het bergend vermogen in paragraaf 2.5 werd uiteengezet waarom de elasticiteit van grondwater vaak veel groter is dan de samendrukbaarheidscoëfficiënt van zuiver water. Dit heeft tot gevolg dat de snelheid van een drukgolf in werkelijkheid ongeveer 300 m s⁻¹ is.

De randvoorwaarden geven de condities die gelden op de randen van het stroomdomein. Zij zeggen iets over de stijghoogte of over de afgeleide van de stijghoogte loodrecht op de rand. De randvoorwaarden zijn noodzakelijk om de integratieconstanten, die in de algemene oplossing van de differentiaalvergelijking opduiken, te kunnen bepalen.

2.6.2 Berekeningsmethoden

Het oplossen van de differentiaalvergelijking voor stromingsvraagstukken blijkt in veel gevallen een gecompliceerd probleem. Bijvoorbeeld wanneer een analytische oplossing moeilijk te vinden is of onmogelijk blijkt. De reden hiervoor is meestal dat de grenzen van het stroomdomein onregelmatig zijn. Maar ook voor vraagstukken met betrekkelijk eenvoudige randvoorwaarden vereist het vinden van een analytische oplossing, bijvoorbeeld van de Laplace-vergelijking, een

gedegen wiskundige kennis (zie Grossman en Derrick, 1988).

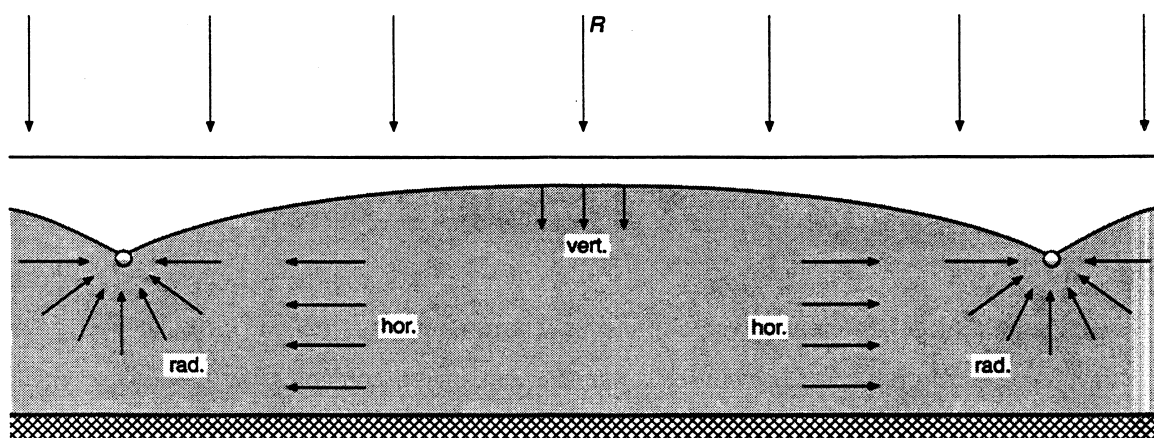
Voor tweedimensionale problemen biedt het gebruik van complexe functies een mogelijke oplossing (Verruijt, 1970). Een klasse apart vormen grondwaterproblemen met een vrije waterspiegel (in een dwarsdoorsnede afgebeeld): omdat de positie van het freatisch vlak niet bij voorbaat bekend is heeft men langs dat gedeelte van de rand twee randvoorwaarden nodig.

Het oplossen van de differentiaalvergelijking kan men beschouwen als een *wiskundig model*, indien een analytische oplossing niet mogelijk is blijkt in veel gevallen een numerieke oplossing wél tot de mogelijkheden te behoren. Men spreekt dan van een *numeriek model*, de praktische uitwerking daarvan is meestal een computerprogramma. Numerieke technieken vormen thans de meest gebruikte oplossingsmethode voor grondwaterproblemen; in hoofdstuk 5 wordt daarom één van de belangrijkste numerieke methoden besproken.

Een veel gebruikte techniek om oplossing van de differentiaalvergelijking mogelijk te maken is *vereenvoudiging van het stroombeeld*. In de volgende paragraaf wordt dit nader toegelicht.

2.6.3 Vereenvoudiging van het stroombeeld, veronderstelling van Dupuit

Grondwaterstromingen verlopen in de praktijk dikwijls nagenoeg horizontaal. Dit komt doordat de horizontale afstanden waarover het water zich verplaatst vaak zeer groot zijn ten opzichte van de verticale afstanden. De dikte van diepe watervoerende lagen is meestal in de orde van enkele tientallen meters, terwijl de horizontale afstanden die worden afgelegd in de orde van kilometers kunnen zijn. Bij een landbouwkundige drainage zijn de horizontale afstanden weliswaar veel kleiner (10 tot 100 m) maar de zogenaamde equivalentdikte (zie collegedictaat *Waterbeheersing*) is meestal in de orde van enkele meters. In zulke gevallen onderscheidt men (zie figuur 2.6-1):



Figuur 2.6-1 Schematisatie van de stroming naar drains.

- een verticale stroming bij het begin;
 - een horizontale stroming;
 - een radiale stroming nabij sloten en drains,
- zodat de stroming over het grootste traject horizontaal verloopt.

Dupuit (1863) veronderstelde dat bij berekening van grondwaterstroming in zulke situaties geen grote fout wordt gemaakt door aan te nemen dat de stroming voornamelijk horizontaal verloopt.

Deze aanname betekent dat verticale componenten van de snelheid bij de berekening worden verwaarloosd. De consequentie hiervan is dat de stijghoogte in de verticaal constant is.

Bij stroming van freatisch water geldt bovendien:

- De (onbekende) hoogte van de waterspiegel (h)¹⁾, is gelijk aan de stijghoogte (H) in de betreffende verticaal, mits beide ten opzichte van de ondoorlatende basis worden gemeten. Het aantal onbekenden reduceert hiermee tot één.
- De gradiënt van de stijghoogte is gelijk aan de helling van de waterspiegel.

Een stroming die in een vlak kan worden afgebeeld noemen we een tweedimensionale stroming.

Bij de beschrijving van een grondwaterstroming in twee dimensies, kunnen we onderscheid maken tussen stroming 'in het kaartvlak' en 'in een dwarsdoorsnede'.

In het eerste geval wordt de Dupuit-stroming bedoeld in één, meestal horizontaal gelegen, watervoerende laag. De coördinaten x en y liggen dus in het horizontale vlak.

Een stroming in een dwarsdoorsnede hoeft niet beperkt te zijn tot één watervoerende laag. De coördinaten x en z wijzen respectievelijk in de horizontale en in de verticale richting.

In veel gevallen kan men op grond van symmetrie, vlakken onderscheiden waarin het stroombeeld identiek is en karakteristiek voor het onderhavige vraagstuk. Bij de stroming tussen twee evenwijdige kanalen is ieder vlak loodrecht op de lengterichting van de kanalen zo'n symmetrievlak (met uitzondering van vlakken nabij het einde van de kanalen, waar randeffecten een rol spelen). Bij radiale stroming naar een put vertoont ieder verticaal vlak door de put hetzelfde beeld en is dus een symmetrievlak.

Als bij een stroming in een dwarsdoorsnede de Dupuit aanname geldt, wordt het stroombeeld eendimensionaal. De differentiaalvergelijking, die de stroming beschrijft in termen van H , bevat dan slechts één ruimtelijke variabele (x).

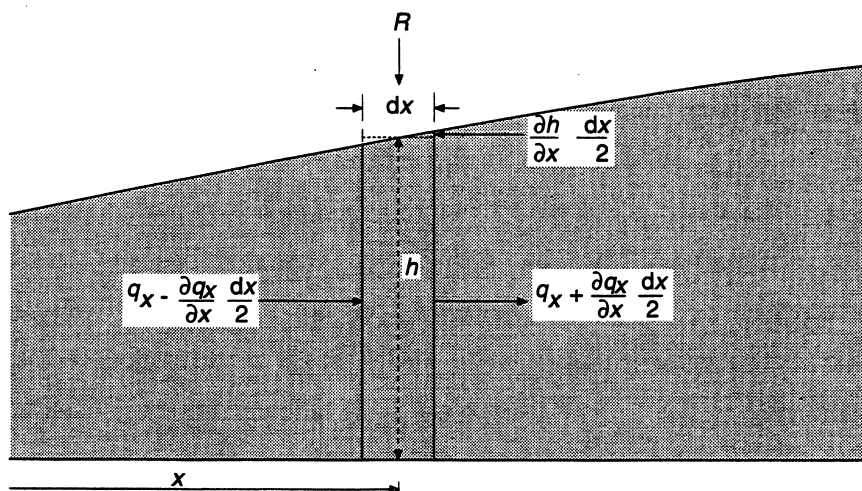
De differentiaalvergelijking verkrijgen we op de beproefde wijze, namelijk door combinatie van de massabalansvergelijking (continuïteit) met de bewegingsvergelijking (Darcy).

¹⁾ De hoogte h van de waterspiegel boven het referentieniveau is *niet* hetzelfde als de drukhoogte h_p .

Voor de oplossing van Dupuit-stromingen is het niet juist om uit te gaan van een controlevolume $\Delta x \Delta y \Delta z$ (waarom niet?). Vergelijking (2.3-1) of (2.5-5) moeten we daarom niet gebruiken voor een freatische Dupuit-stroming in een doorsnede. Betreft het een stationaire eendimensionale stroming (paragraaf 2.7), dan kunnen we de oplossing rechtstreeks vinden door de fluxvergelijking voor een willekeurige doorsnede op te stellen.

Figuur 2.6-2 toont een dwarsdoorsnede in een stroming door een homogeen watervoerend pakket met een vrije waterspiegel. We kiezen nu *niet* een kubus als controlevolume (in de tweedimensionale tekening een vierkantje) waarop we het continuïteitsbeginsel toepassen, maar een element $h dx$ dat zich uitstrekt van de ondoorlatende laag tot aan de waterspiegel en 1 m loodrecht op het vlak van tekening. De bergingsverandering in zo'n controlevolume treedt vooral op doordat bij verplaatsing van de waterspiegel poriën zich vullen of deels leeglopen. Als coëfficiënt moeten we dus S_y kiezen (zie paragraaf 2.5), omdat het de bergingsverandering per vierkante meter van de gehele watervoerende laag betreft. Omdat de hoogte van het controlevolume niet constant is kunnen we nu niet (de eendimensionale vorm van) vergelijking (2.5-5) gebruiken, maar moet de vergelijking opnieuw worden afgeleid.

In een freatische situatie zijn veranderingen van de druk meestal gering. We nemen daarom aan dat de dichtheid constant is. De massabalans gaat nu over in een volumebalans.



Figuur 2.6-2 Continuïteit in een controlevolume $h dx$.

Het product v maal h noemen we q , dat is de flux die door een willekeurige doorsnede van 1 m lengte loodrecht op het vlak van tekening stroomt (oppervlak = $h \times 1 \text{ m}^2$). Het is het debiet ($\text{m}^3 \text{d}^{-1}$) per meter, de dimensie is derhalve $\text{m}^2 \text{d}^{-1}$.

Per tijdstap moet minus de divergentie van de flux q maal dx plus het accres Rdx gelijk zijn aan de verandering van de berging in het controlevolume, zodat:

$$-\frac{\partial q_x}{\partial x} dx + Rdx = S_y \frac{\partial h}{\partial t} dx \quad (2.6-1)$$

Na uitschrijven van q en delen door dx krijgen we:

$$-v_x \frac{\partial h}{\partial x} - h \frac{\partial v_x}{\partial x} + R = S_y \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.6-2)$$

Invullen van de wet van Darcy geeft:

$$kh \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + k \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + R = S_y \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.6-3)$$

Bij Dupuit-stroming met een vrije waterspiegel is de Laplace-vergelijking dus niet van toepassing! (2.6-3) is een niet-lineaire differentiaalvergelijking (omdat de afhankelijke variabele h voorkomt in machten anders dan één). Een analytische oplossing is in het algemeen zeer moeilijk. Voor stationaire stromingen is de rechterzijde van vergelijking (2.6-3) gelijk aan nul, waardoor de oplossing sterk wordt vereenvoudigd. De volgende paragraaf geeft hiervan voorbeelden.

Een lineaire differentiaalvergelijking oplossen is meestal minder moeilijk. Daarom proberen we eerst of de vergelijking kan worden 'gelineariseerd'. In dit geval kunnen we dat bereiken door de totale doorstroomde dikte van het watervoerende pakket (h) als een constante te beschouwen. Dat is geoorloofd als de dikte groot is ten opzichte van de veranderingen van h . We kunnen dan als

benadering de gemiddelde doorstroomde dikte $\bar{h}$ invoeren, in plaats van h , en de som van $\left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2$

en $h \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}$ ($= \frac{\partial}{\partial x} (h \frac{\partial h}{\partial x})$) vervangen door $\bar{h} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}$. Door deze vervanging wordt bij de oplossing van

de dv (is integratie) slechts een kleine fout gemaakt. Noemen we de gemiddelde doorstroomde dikte D , dan wordt vergelijking (2.6-3):

$$kD \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + R = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.6-4)$$

Toch is ook voor deze vergelijking een analytische oplossing geen sinecure, een numerieke oplossing is echter wel goed mogelijk (zie paragraaf 5.3 en 5.4).

De redenering die leidt tot vergelijking (2.6-4) kan ook worden toegepast voor (gedeeltelijk) afgesloten grondwater. De doorstroomde dikte D is dan niet gelijk aan de stijghoogte in een verticaal, maar wordt uitsluitend bepaald door de geologie. Bovendien heeft S nu de reguliere betekenis, namelijk die van de bergingscoëfficiënt (dimensieloos), die aangeeft hoeveel m^3 water vrijkomt of geborgen kan worden per m^2 (in een kolom verzadigde grond van 1 m^2 over de gehele dikte van het pakket) bij een verandering van de stijghoogte van 1 m .¹⁾

Is er voeding aan de boven- én onderzijde, dan wordt de vergelijking:

$$kD \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} + R + W = S \frac{\partial H}{\partial t} \quad (2.6-5)$$

waarin D de lokale dikte is van de watervoerende laag. De voeding R aan de bovenzijde kan, evenals de voeding W aan de onderzijde, een functie van de stijghoogte zijn, indien we te maken hebben met gedeeltelijk afgesloten grondwater. In dat geval wordt de voeding bepaald door het stijghoogteverschil en de weerstand van de semi-doorlatende laag. Uiteraard kan zo'n situatie zich ook aan de onderzijde voordoen.

Opgaven

2.6.1. Bewijs de twee logische gevolgen van de Dupuit-aanname in een freatische stroming (zie blz. 71).

2.6.2. Bereken de drukverdeling in een verticaal van een Dupuit-stroming. Dit komt neer op de berekening van de afgeleide van p naar z . Waarom betitelen we dit als een hydrostatische drukverdeling?

2.6.3. Schrijf de differentiaalvergelijking op voor tweedimensionale stroming (in het kaartvlak) in een horizontale, gedeeltelijk afgesloten, watervoerende laag.

¹⁾ Omdat bij de toepassing van het continuïteitsbeginsel aangenomen werd dat $\rho = \text{constant}$, moeten we ons voorstellen dat de extra ruimte ontstaat door het opslaan of vrijkomen van gassen volgens de wet van Henry.

2.7 Eenvoudige voorbeelden van stationaire stroming

2.7.1 Stationaire stroming tussen twee kanalen

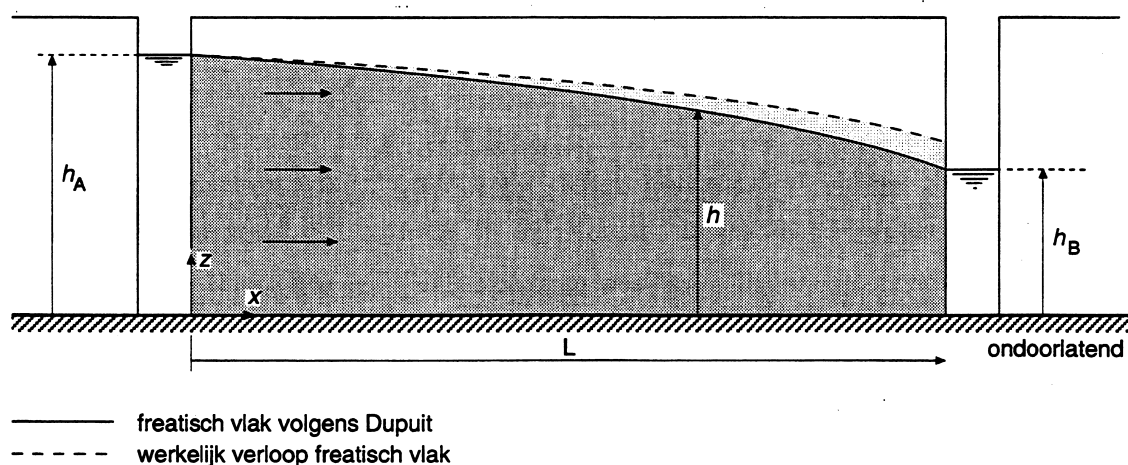
De stationaire Dupuitstroming van grondwater tussen twee evenwijdige kanalen, zonder infiltrerende neerslag, is schematisch weergegeven in figuur 2.7-1. De vergelijking die moet worden opgelost volgt uit (2.6-3). R en de partiële afgeleide van h naar de tijd zijn nu gelijk aan nul:

$$kh \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + k \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 = 0 \quad (2.7-1)$$

De oplossing kan worden verkregen door linearisatie op h^2 (zie Opgave 2.7.1.).

Omdat bij een stationaire stroming geen bergingsveranderingen optreden, kunnen we dergelijke problemen ook oplossen door de flux te berekenen die door een willekeurige doorsnede stroomt.

In een doorsnede op afstand x geldt namelijk:



Figuur 2.7-1 Grondwaterstroming tussen twee evenwijdige kanalen.

$$q = vA = -k \frac{dH}{dx} h \quad (2.7-2)$$

waarin:

q = debiet per meter loodrecht op het vlak van tekening (m^2d^{-1})

h = de hoogte van het freatisch vlak boven de basis (m)

Het debiet q is constant, maar de waarde ervan is vooralsnog onbekend. Indien voor de stijghoogte de ondoorlatende basis als referentieniveau wordt gekozen dan is de stijghoogte H gelijk aan de hoogte h . Vergelijking (2.7-2) heeft dan nog maar één onbekende variabele en kan worden geschreven als:

$$q = -k \frac{dh}{dx} h = -\frac{1}{2} k \frac{dh^2}{dx} \quad (2.7-3)$$

Controleer of de termen vóór en achter het tweede = teken gelijk zijn! Dit is een gewone, eerste orde differentiaalvergelijking. De oplossing van de differentiaalvergelijking is de door ons gezochte functionele relatie tussen h en x . In dit geval kan direct worden geïntegreerd:

$$qx = -\frac{1}{2}kh^2 + \text{constante} \quad (2.7-4)$$

Hieruit volgt:

$$h^2 = -\frac{2qx}{k} + c \quad (2.7-5)$$

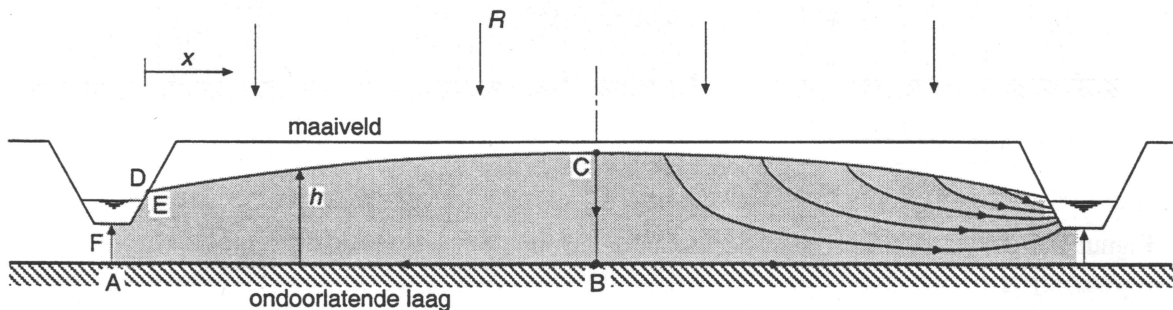
In eerste instantie vinden we dus niet $h(x)$ maar $h^2(x)$. Om $h(x)$ zelf te vinden hoeven we alleen nog maar de wortel te trekken. Uit (2.7-5) volgt dat de vorm van het berekende freatisch vlak een tweedegraads kromme is (in dit geval een parabool). De twee onbekende constanten (q en c) kunnen we vinden door invullen van de randvoorwaarden: $x = 0$, $h = h_A$ en $x = L$, $h = h_B$. Daaruit volgt $c = h_A^2$ en

$$q = \frac{k}{2L}(h_A^2 - h_B^2) \quad (2.7-6)$$

Uit nadere analyse (zie Koopmans, 1999) blijkt nu dat q de exacte waarde van de flux is. Dat wil zeggen: men krijgt exact dezelfde uitkomst als de restrictie van evenwijdige stroming wordt verlaten. De hoogte van de waterspiegel wordt met de Dupuit-aanname echter iets te klein berekend, vooral bij het rechter kanaal waar een kwelzone optreedt. In de praktijk zijn deze verschillen echter te verwaarlozen.

2.7.2 Stationaire ontwateringsstroming naar twee evenwijdige sloten

Een veel voorkomende praktijksituatie is geschetst in figuur 2.7-2. Een perceel land wordt ontwaterd door evenwijdige sloten, op het maaiveld valt een gestage en constante neerslag. Als gevolg van deze regen vormt zich tussen beide sloten een bolle grondwaterspiegel die in het midden zijn hoogste punt bereikt. Bij de sloot eindigt de waterspiegel iets boven het punt E. In de beide helften links en rechts van de lijn BC zijn de stroombeelden elkaars spiegelbeeld. Een druppel water die in het punt C binnentreedt, zal zich loodrecht naar beneden bewegen en theoretisch na oneindig lange tijd in één van de sloten arriveren. Hoewel het in de figuur niet zo duidelijk is door de vertekening van de horizontale en verticale afstanden, zal in het grootste deel van het perceel een nagenoeg horizontale stroming optreden.



Figuur 2.7-2 Stationaire stroming naar ontwateringssloten.

Het trapeziumvormige profiel van de sloten veroorzaakt gecompliceerde randvoorwaarden die een directe oplossing bemoeilijken. Het vraagstuk kan in twee dimensies het beste langs numerieke weg worden opgelost. Door het invoeren van enkele vereenvoudigingen is echter een praktisch bruikbare analytische oplossing mogelijk. Het betreft:

- verdiepen van de sloten tot aan de ondoorlatende laag;
- vereenvoudiging van het slootprofiel tot een rechthoekige doorsnede;
- invoeren van de Dupuit-aanname.

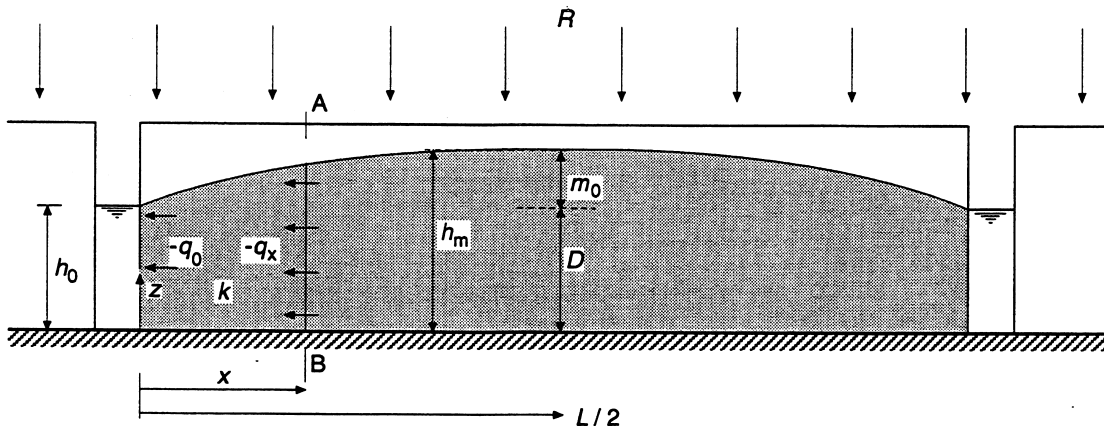
Door deze vereenvoudigingen is het probleem getransformeerd tot een eendimensionale stroming met simpele randvoorwaarden, zoals weergegeven in figuur 2.7-3.

In een willekeurige doorsnede AB, geldt opnieuw vergelijking (2.7-2), het debiet q is nu echter niet constant, maar een functie van x . De hoeveelheid water die per dag door de doorsnede stroomt is namelijk gelijk aan de hoeveelheid neerslag die per dag binnenkomt tussen het midden van

regenintensiteit R .

$$q_v = -R(1/2L - x)$$

Het minteken staat er, omdat q_x een vector is, die voor $x < \frac{1}{2}L$ in de negatieve x -richting werkt.



Figuur 2.7-3 Geschematiseerd beeld van de stroming naar evenwijdige sloten.

Invullen levert nu:

$$-R(\frac{1}{2}L - x) = -k \frac{dh}{dx} h \quad (2.7-8)$$

Vergelijking (2.7-8) is (evenals (2.7-3)) een niet-lineaire differentiaalvergelijking. In het algemeen is de oplossing van niet-lineaire differentiaalvergelijkingen een ingewikkeld probleem. In dit geval echter kunnen we er met een kleine ingreep weer een lineaire vergelijking van maken, door namelijk niet h maar h^2 als variabele te beschouwen. We komen op dat idee, omdat het rechterlid van de vergelijking ook kan worden geschreven als: $-\frac{1}{2}k \frac{dh^2}{dx}$. De oplossing kan nu gemakkelijk

worden gevonden door scheiding van de variabelen, het resultaat na integratie is:

$$kh^2 = R(Lx - x^2) + \text{constante} \quad (2.7-9)$$

De bijbehorende randvoorwaarden zijn: $x = 0, h = h_0$ en $x = L, h = h_0$.

Hieruit volgt dat de constante gelijk is aan $k h_0^2$.

Bij $x = \frac{1}{2}L$ wordt de hoogste grondwaterstand $h_{\max}$ aangetroffen:

$$h_{\max}^2 = \frac{RL^2}{4k} + h_0^2 \quad (2.7-10)$$

In de drainagetheorie noemt men dikwijls $h_{\max} - h_0 = m_0$ en $h_0 = D$, zodat (2.7-10) geschreven kan worden als:

$$RL^2 = 8kDm_0 + 4km_0^2 \quad (2.7-11)$$

waaruit de benodigde drainafstand (L) kan worden berekend, mits de maatgevende neerslag-intensiteit R , de doorlatendheid k , de diepte D en de toegelaten opbolling m_0 bekend zijn. Deze formule werd in 1940 door Hooghoudt gepubliceerd.

De fouten die voortkomen uit de veronderstelling van Dupuit zijn in de praktijk van weinig betekenis. Zo reikt de kwelzone op het sloottalud (DE in figuur 2.7-2), die daarbij wordt verwaarloosd, zelden hoger dan enkele cm's boven het slootpeil. Belangrijker zijn de afwijkingen die ontstaan door het verdiepen van de sloot tot aan de ondoorlatende laag.

Er treedt in werkelijkheid een (min of meer) radiale stroming op nabij de sloot (figuur 2.7-2, rechter helft). Bij stroming naar drains is deze radiale component nog veel belangrijker (figuur 2.6-1): dezelfde hoeveelheid water moet door een steeds kleiner wordend oppervlak stromen. Dit betekent dat de fluxdichtheid (en dus de afgeleide van de stijghoogte) moet toenemen naarmate we dichter bij de drain komen. Bij het ontwerp van drainages, waar het totale beschikbare stijghoogteverschil als randvoorwaarde is gegeven, wordt het toenemende energieverlies door een extra weerstand in rekening gebracht. (zie collegedictaat *Waterbeheersing*).

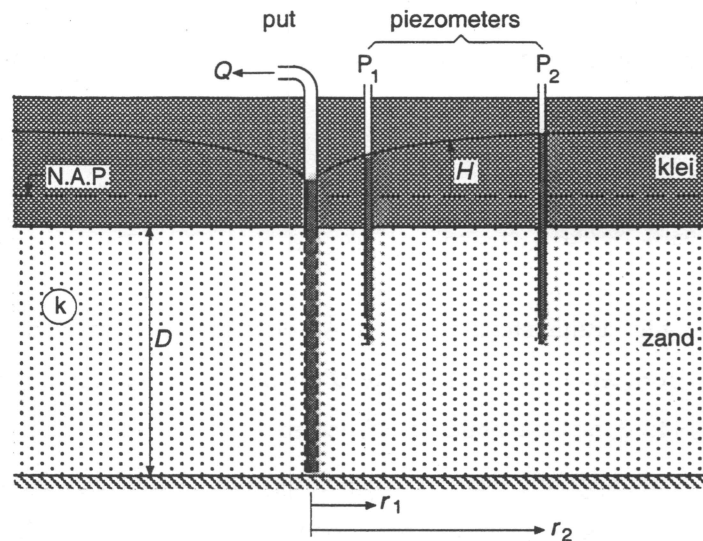
2.7.3 Stroming naar een put in afgesloten grondwater

Een winput onttrekt spanningswater aan een diep gelegen zandlaag, die aan boven- en onderzijde wordt begrensd door ondoorlatende dichte kleilagen (figuur 2.7-4). Het onttrokken debiet Q (m^3s^{-1}) wordt op grote afstand van de put aangevuld op plaatsen waar de watervoerende laag dagzoomt en door neerslag wordt gevoed (daar is het water dus freatisch).

In de omgeving van de put veroorzaakt de onttrekking een verlaging van de stijghoogte H ; deze is

echter niet zo groot dat H tot beneden de bovenzijde van de watervoerende laag daalt. De doorstroomde dikte D is daardoor overal in de omgeving van de put hetzelfde.

De stroomlijnen lopen in zo'n geval radiaal naar de put. Op een kaart zijn het dus rechte lijnen, terwijl de equipotentiaalvlakken worden voorgesteld door cirkels. In werkelijkheid zijn het echter cilindermantels, met straal r , hoogte D en oppervlak $2\pi rD$.



Figuur 2.7-4 Strooming naar een volkomen put in afgesloten grondwater.

Op een willekeurige afstand r uit de as van de put geldt nu:

$$Q' = vA = -k \frac{dH}{dr} 2\pi r D \quad (2.7-12)$$

Merk op dat het doorstroomde 'natte' oppervlak nu niet constant is, maar een functie van de coördinaat r ! Omdat H toeneemt met r is $\frac{dH}{dr}$ positief en dus Q' negatief. Het is meer gebruikelijk de opbrengst van een put positief te rekenen, daarom stellen wij:

$$Q = -Q' = 2\pi k D r \frac{dH}{dr} \quad (2.7-13)$$

Om de oplossing (de functionele relatie tussen H en r) te vinden, schrijven we de vergelijking als:

$$dH = \frac{Q}{2\pi kD} \frac{dr}{r} \quad (2.7-14)$$

De stap van (2.7-13) naar (2.7-14) wordt 'het scheiden van de variabelen' genoemd; integratie geeft:

$$H = \frac{Q}{2\pi kD} \ln r + \text{constante} \quad (2.7-15)$$

Neemt men als grenzen de afstanden r_1 en r_2 , dan vervalt de integratieconstante en volgt:

$$H_2 - H_1 = \frac{Q}{2\pi kD} \ln \frac{r_2}{r_1} \quad (2.7-16)$$

waarin:

r_1, r_2	= afstanden tot de as van de put	(m)
Q	= debiet van de put	(m ³ d ⁻¹)
k	= doorlaatfactor	(m d ⁻¹)
D	= dikte watervoerende laag	(m)
H_1, H_2	= stijghoogten bij r_1 respectievelijk r_2	(m)

Vergelijking (2.7-16) kan worden gebruikt om het doorlaatvermogen (kD) te bepalen met behulp van een zogenaamde stationaire pompproef (zie paragraaf 1.8.2). Bij een stationaire proef wordt uiteraard een constant debiet opgepompt. Vóórdat de proef begint, wordt met een aantal piëzometers (minimaal twee) die op verschillende afstand van de put staan, de stijghoogte in de watervoerende laag gemeten. Als na het aanzetten van de pomp de stationaire toestand is bereikt (wat soms lang kan duren), wordt opnieuw gemeten. Voor iedere piëzometer zo wordt de daling van de stijghoogte bepaald. Invullen van het stijghoogteverschil van twee piëzometers met de bijbehorende afstanden én het gemeten debiet Q in vergelijking (2.7-16), levert een waarde van kD .

2.7.4 Kwel in een polder

Onder het Nederlandse polderland bevindt zich een pakket holocene veen- en kleilagen van enkele meters dikte (tot ongeveer 20 m). Daaronder ligt een zeer dik en doorlatend pakket pleistocene

grove zanden, met een dikte variërend van 100 tot 250 m en een doorlaatvermogen kD , van 5000-8000 m^2d^{-1} .

In veel polders wordt het polderpeil lager gehouden dan het waterpeil in de omgeving. Dit geldt zeker voor de diepe 'droogmakerijen' waartoe ook de Zuiderzeepolders behoren. Binnen de polder zal daardoor de stijghoogte van het grondwater in het pleistocene zand boven het polderpeil uitstijgen. Water uit de omgeving dringt, buiten de polder, via de holocene lagen door in het pleistocene pakket en stroomt vervolgens horizontaal door deze aquifer naar de polder waar het wederom als kwel via het Holocene aan de dag treedt.

De kwelsterkte wordt bepaald door het verschil tussen de stijghoogte in het zand en het polderpeil én door de weerstand $c = \frac{d}{k}$, die de holocene veen- en kleilagen aan de waterbewegingen bieden

(zie vergelijking (1.6-8)). Deze weerstand wordt uitgedrukt in dagen. d (m) is de dikte van de lagen.

Opgaven

2.7.1. Los vergelijking (2.7-1) op door h^2 als onbekende te beschouwen. Aanwijzing: schrijf de tweede afgeleide van h^2 naar x uit.

2.7.2. Bepaal de functie $h(x)$ voor stationaire stroming tussen evenwijdige kanalen, zonder regen, als de invloed van de *variatie* van de dikte van de verzadigde laag mag worden verwaarloosd. Dit betekent dat de dikte D als een constante kan worden beschouwd. (Dit is het geval als *het grootste verschil in h* klein is ten opzichte van h zelf). De afstand tussen de kanalen is L en de doorlatendheid van de bodem k .

2.7.3 a. Bepaal de functie $h(x)$ voor stationaire stroming tussen twee kanalen (zie figuur 2.7-1), met een netto voeding R . (Aanwijzing: begin met de massabalansvergelijking voor een controlevolume hdx).

b. Stel dat $h_A = 10.0$ m, $h_B = 9.0$ m, $R = 0.002$ m d^{-1} , $k = 2.0$ m d^{-1} en $L = 200.0$ m. Bereken de hoogte h op $x = 20, 40, 80$ en 160 m.

2.7.4. Herhaal de afleiding en berekening van 2.7.3. voor het geval de variatie van de dikte van de doorstroomde laag wordt verwaarloosd en voor D de gemiddelde waarde 9.5 m wordt gekozen. Vergelijk de gevonden hoogten met de oplossing van 2.7.3.

2.7.5. Twee evenwijdige kanalen liggen op 200 m afstand van elkaar. Het waterpeil in kanaal A ligt $1,0$ m beneden het maaiveld, in kanaal B $1,5$ m beneden maaiveld.

De bodemopbouw is als volgt: laag 1 van maaiveld ($=0$ m) tot $-4,5$ m, heeft een doorlatendheid van $0,5$ m d^{-1} , laag 2 van $-4,5$ m tot $-8,0$ m heeft een doorlatendheid van $1,5$ m d^{-1} . Op $8,0$ m beneden het maaiveld begint een ondoorlatende laag.

- Maak een situatie schets
- Bereken de hoeveelheid water die per 100 m lengte kanaal per dag van kanaal A naar kanaal B stroomt. Aanwijzing: Dupuit-aanname is geldig. Neem aan dat de kanalen reiken tot aan de ondoorlatende laag en beschouw de wanden als verticale vlakken. Voer eerst de berekening uit door de stijghoogte-gradiënt voor alle x gelijk te stellen aan $\Delta H/L$. Herhaal nu de berekening met behulp van de methode van paragraaf 2.7.1 en bedenk dat de flux in laag 2 constant is.

2.8 Randvoorwaarden

Zoals uit het voorgaande reeds duidelijk werd, spelen de randvoorwaarden bij het oplossen van de differentiaalvergelijking een zeer voorname rol. De randvoorwaarden van de in paragraaf 2.7 behandelde eendimensionale stromingsproblemen zijn voorbeelden van de zogenaamde '*Dirichlet*' *conditie*. Dat wil zeggen: de waarde van de stijghoogte langs de rand is bekend. Een tweede categorie randvoorwaarden is die, waarbij de waarde van de stijghoogtegradiënt loodrecht op de rand bekend is. Dit betekent dat de snelheidscomponent die de rand loodrecht kruist, is gegeven. Dit staat bekend als de '*Neumann*' *conditie*.

Bij twee- of driedimensionale stromingsvraagstukken hebben we meestal te maken met een combinatie van beide voorwaarden. Dit wil zeggen dat op een deel van de rand de Dirichlet conditie geldt en op het resterende deel de Neumann conditie. De waterspiegel is een bijzonder geval. Een aantal voorbeelden van veel voorkomende randen bij grondwaterstromingen moge één en ander verduidelijken; *het gaat hierbij om stromingen die in twee dimensies worden opgelost*.

- Langs een *ondoorlatende laag* of *waterscheiding* geldt dat er geen stroming over de grens is, de gradiënt loodrecht op de grens is dus nul. Zo'n rand is tevens een stroomlijn.
- Indien het grondlichaam *grenst aan stilstaand water* kan er wel stroming over de grens plaatsvinden, de potentiaal langs deze grens is echter overal gelijk. Zo'n rand is tevens een equipotentiaallijn.
- Bij een *kweloppervlak* (in een dwarsdoorsnede) treedt water naar buiten en stroomt verder langs het oppervlak, zie figuur 2.7-1 en 2.7-2. De druk is daar atmosferisch er is dus geen over- of onderdruk dat wil zeggen $p = 0$ en de stijghoogte is gelijk aan de plaatshoogte. Dit kan bijvoorbeeld voorkomen bij stroming naar sloten of bij stroming door een dam.
- Langs een *vrije waterspiegel* (in een dwarsdoorsnede) gelden twee randvoorwaarden, omdat de positie van de waterspiegel als onderdeel van de oplossing gevonden moet worden. De waterspiegel is soms een stroomlijn, maar in het geval met neerslag (of verdamping) is het noch een stroomlijn, noch een equipotentiaallijn. De twee voorwaarden voor de *stationaire*

toestand zijn:

1. de stijghoogte is gelijk aan de plaatshoogte, omdat $p = 0$;
2. de gradiënt loodrecht op het oppervlak is gegeven, bijvoorbeeld voor het geval zonder neerslag of verdamping is deze gradiënt gelijk aan nul.

Bij berekening in het kaartvlak (met Dupuit) is de hoogte van de vrije waterspiegel gelijk aan de stijghoogte en hoeft niet als een bijzondere randvoorwaarde te worden behandeld.

- Het grensvlak tussen twee vloeistoffen, zoals een zoet-zout grens, kan in veel gevallen worden beschouwd als een scherpe grens. Er treedt daar een potentiaalsprong op, omdat de druk een continue functie is die op het grensvlak slechts één waarde heeft. Bovendien is het grensvlak (in een dwarsdoorsnede) een stroomlijn, omdat er geen transport over de grens plaatsvindt.

2.9 Niet-stationaire stroming van grondwater tussen evenwijdige leidingen

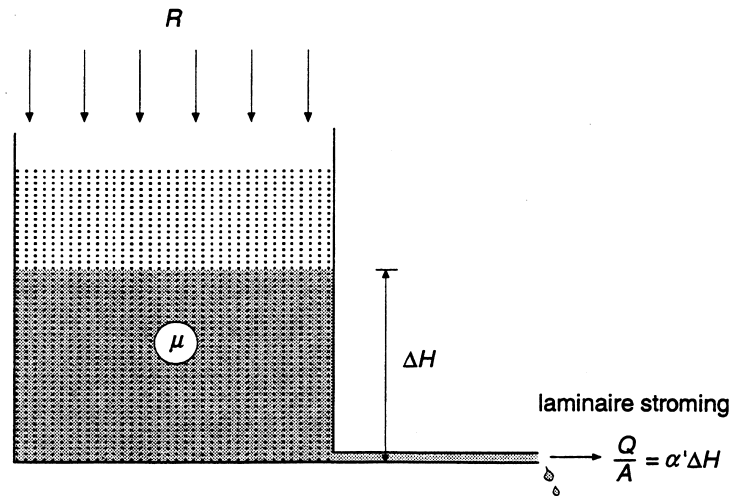
In de voorgaande paragraaf werden stromingen behandeld, die in de loop der tijd niet veranderen. Bij niet-stationaire stroming van grondwater treden wél veranderingen op en speelt de *berging* een rol.

Een veel voorkomend praktijkvoorbeeld is de stroming naar evenwijdige leidingen. Wanneer de infiltratie van neerslag redelijk snel verloopt en de grondwaterspiegel zich op geringe afstand onder het maaiveld bevindt, kan er bij de werkelijk optredende neerslag zelden van een stationaire situatie worden gesproken, ook bij irrigatie treedt meestal een niet-stationaire stroming op. De algemene vergelijking werd reeds in paragraaf 2.6 afgeleid.

Bij Dupuit-stroming geeft de bergingscoëfficiënt aan hoeveel water per eenheid van oppervlak geborgen kan worden *over de gehele dikte van de aquifer* (CHO-TNO, 1986).

De analytische oplossing van vergelijking (2.6-4) is verre van eenvoudig en is uiteraard afhankelijk van de randvoorwaarden. Een niet-stationaire stroming in de situatie van figuur 2.7-3 is voor verschillende randvoorwaarden onder andere opgelost door Dumm-Glover (1954) en Kraijenhoff van de Leur (1958).

Een andere mogelijkheid om dit vraagstuk op te lossen is door middel van een model en met name een conceptueel, analoog model. De stroming wordt nu vergeleken met het leeglopen van een reservoir door een dun buisje (Hellinga en De Zeeuw, 1958), zie figuur 2.9-1.



Figuur 2.9-1 Model voor de stroming naar evenwijdige leidingen.

Stel, dat de afvoer door het buisje wordt geschreven als $Q = \text{constante} \times \Delta H$ dan is de afvoer per oppervlakte eenheid van het reservoir:

$$a = \frac{Q}{A} = \alpha' \Delta H \quad (2.9-1)$$

waarin α' de bovengenoemde constante per oppervlakte eenheid is.

Zonder voeding zal de stroming met de tijd afnemen en tenslotte tot nul naderen: de berging in het reservoir wordt daarbij eveneens steeds kleiner. Valt er een constante neerslag R (m d^{-1}) op het reservoir, dan zal er uiteindelijk een stationaire situatie ontstaan. Bij een wisselende neerslag blijft de stroming niet-stationair. Kiezen we de onderzijde van het reservoir als referentieniveau dan is $\Delta H = h$. Toepassing van het continuïteitsbeginsel voor de tijdstap dt geeft de volgende relaties:

$$\text{in} - \text{uit} = \Delta \text{berging}$$

$$R dt - \alpha' h dt = S dh \quad (2.9-2)$$

Scheiding van de variabelen leidt tot:

$$dt = S \frac{dh}{R - \alpha' h} \quad (2.9-3)$$

of:

$$dt = - \frac{S}{\alpha'} \cdot d \ln (R - \alpha' h) \quad (2.9-4)$$

De oplossing van (2.9-4) is:

$$\alpha' h = R - \text{constante} * e^{-\frac{\alpha' t}{S}} \quad (2.9-5)$$

Aangezien $\alpha' h$ gelijk is aan a de afvoer per oppervlakte, geeft deze vergelijking de waarde van de afvoerintensiteit. Invullen van de randvoorwaarde ($t = 0$, $a = a_0$) geeft:

$\text{constante} = R - a_0$, zodat de afvoer op ieder tijdstip t berekend kan worden uit:

$$a = R - (R - a_0) e^{-\frac{\alpha' t}{S}} \quad (2.9-6)$$

$$a = a_0 e^{-\alpha t} + R(1 - e^{-\alpha t}) \quad (2.9-7)$$

mits de afvoer $a_0 (= \alpha' h_0)$ op $t = 0$ bekend is.

Vergelijking (2.9-7) staat bekend als de formule van De Zeeuw en Hellinga (1958) waarin:

a = afvoerintensiteit (md⁻¹)

a_0 = afvoerintensiteit bij $t = 0$ (md⁻¹)

R = constante neerslagintensiteit (md⁻¹)

α = reactieconstante = $\frac{\alpha'}{S}$ (d⁻¹)

Hoewel vergelijking (2.9-7) werd afgeleid voor een gestage constante regenintensiteit R , kan zij ook worden gebruikt om de afvoer als gevolg van een wisselend neerslagpatroon te berekenen. Als de neerslag per tijdstap gegeven is, bijvoorbeeld per dag, kan men dit het beste doen door de vergelijking stap-voor-stap toe te passen. Voor iedere volgende tijdstap is a_0 dan de afvoer van de vorige tijdstap en t is gelijk aan de lengte van de tijdstap Δt (1 dag).

Voor een gedraineerd perceel kan men de reactieconstante α berekenen uit de onderlinge afstand van de drains of sloten, de bergingscoëfficiënt (de opbrengstcoëfficiënt) én het doorlaatvermogen (kD) van de bodemlaag (zie collegedictaat *Vloeistofmechanica en grondwaterstroming*).

Opgave 2.9.1. Voor een gedraineerd perceel verloopt de voeding van het grondwater volgens de onderstaande tabel.

t (d)	R (m)	t (d)	R (m)
1	0,012	6	0,005
2	0,007	7	0,006
3	0,018	8	0,000
4	0,010	9	0,000
5	0,003	10	0,000

De reactieconstante $\alpha = 0,1$ en $a_0 = 0$. Bereken de afvoer van de drains als functie van t . Gebruik een zakrekenmachientje of een 'spreadsheet'.

3 CONVECTIEF TRANSPORT

3.1 Inleiding

In de twee voorgaande hoofdstukken werden de beginselen van grondwaterstroming besproken. Daarbij ging het vooral om kwantitatieve aspecten, zoals de berekening van de stijghoogteverdeling en van fluxen. De op te lossen differentiaalvergelijkingen bieden in principe ook de mogelijkheid om het pad van een waterdeeltje te volgen. Bij stationaire stroming zijn de stroomlijnen (zie paragraaf 2.4) het pad dat een waterdeeltje zal afleggen. Wanneer men er in slaagt de stroomlijn wiskundig te beschrijven, dan is (meestal met veel moeite) ook te berekenen hoe lang een deeltje er over doet om 'van a naar b' te reizen. Alleen voor eendimensionale stromingen zijn deze berekeningen zeer eenvoudig. In geval van niet-stationair transport zijn de reistijden vrijwel alleen met numerieke methoden te bepalen.

Opgeloste stoffen verplaatsen zich met het grondwater. Als de invoer van een grondwatersysteem van samenstelling verandert, dan zal na een zekere tijd ook de samenstelling van het afgevoerde water gaan veranderen. Sommige stoffen worden daarbij onderweg afgebroken of chemisch in andere verbindingen omgezet, andere stoffen worden in de bodem geadsorbeerd of neergeslagen tot onoplosbare verbindingen.

Conservatieve stoffen ondergaan dergelijke invloeden niet, zij kunnen daarom als 'tracers' (merkstoffen) worden gebruikt. Een goed voorbeeld is het Cl^- -ion, dat in de bodem niet wordt omgezet of geadsorbeerd. In de afvoer zullen dergelijke conservatieve stoffen daardoor als waarschuwingstekens worden gebruikt voor de doorbraak van andere, wellicht schadelijker bestanddelen. In de omgeving van vuilstorten is de stijging van het Cl^- -gehalte in het grondwater een eerste aanwijzing voor het doordringen van andere, niet-conservatieve verontreinigingen. Wij zullen in dit hoofdstuk uitsluitend de verplaatsing van conservatieve stoffen beschouwen.

Voor de berekening van het transport en de concentratie van opgeloste stoffen in grondwater is het nodig naast de balansvergelijking van het water ook die van de opgeloste stof in de beschouwing te betrekken. Om de differentiaalvergelijking te vinden die de concentratie beschrijft als functie van x, y, z en t , moeten we ook nu de balansvergelijking combineren met de bewegingsvergelijking (van de opgeloste stof). Het is dus noodzakelijk de bewegingsmechanismen te kennen die het stoftransport beïnvloeden. In dit hoofdstuk bespreken we de verplaatsing door convectie.

3.2 Convectie

3.2.1 De bewegingsvergelijking

Het voornaamste transportmechanisme in grondwater is convectie, dat is het meegaan van de opgeloste stof met de vloeistof in het continuüm bodemmatrix-vloeistof. Volgens dit mechanisme beweegt een stofdeeltje zich op ieder moment in de richting van de vector die raakt aan de stroomlijn door het betreffende punt. Een stofdeeltje beweegt zich dus als een vloeistofdeeltje.

De fluxdichtheid van de opgeloste stof is gelijk aan het product van de fluxdichtheid van de vloeistof maal de concentratie van de opgeloste stof:

$$J_{\text{conv}} = v c \quad (3.2-1)$$

waarin:

J_{conv} = massafluxdichtheid van de opgeloste stof $(\text{kg m}^{-2} \text{ d}^{-1})$

v = volumefluxdichtheid van het water $(\text{m}^3 \text{ m}^{-2} \text{ d}^{-1})$

c = concentratie van de opgeloste stof (kg m^{-3})

Evenals de volumefluxdichtheid is de massafluxdichtheid een vector.

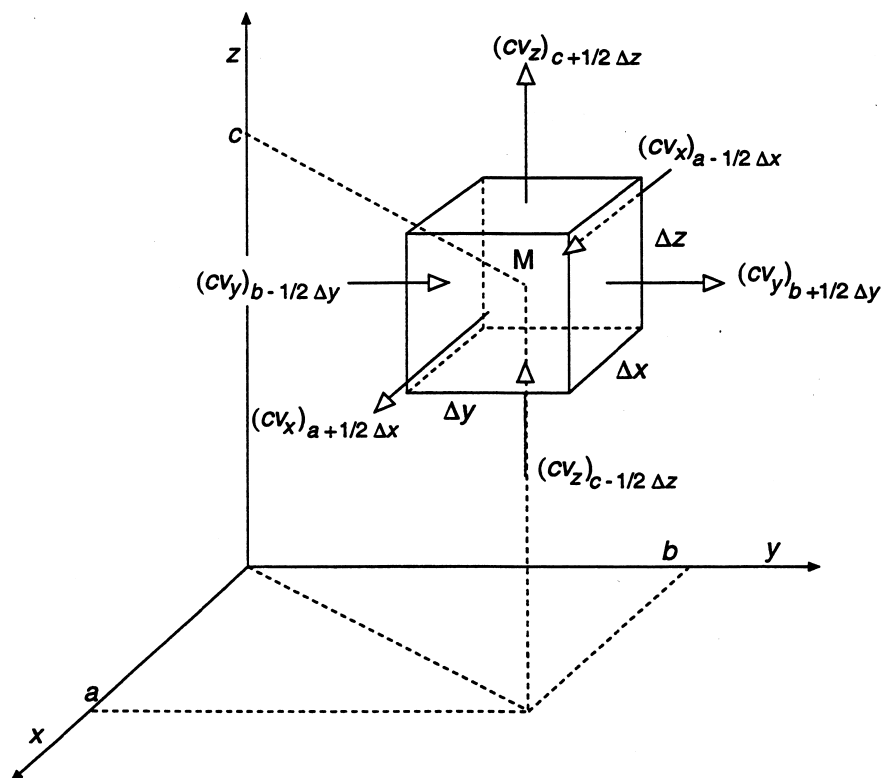
Is er alleen convectief transport dan zal de ene soort water de andere *verdringen*, dit wordt ook wel *propstroming* genoemd.

3.2.2 De convectievergelijking

De differentiaalvergelijking voor convectief transport kan men vinden door de massabalans van de opgeloste stof en de massafluxdichtheidsvergelijking (3.2-1) te combineren. Op dezelfde manier als in paragraaf 2.2 de massabalans voor de vloeistof werd verkregen, vinden we voor de opgeloste stof (zie figuur 3.2-1):

$$\nabla \cdot J_{\text{conv}} = - \frac{\partial n c}{\partial t} \quad (3.2-2)$$

met: n = porositeit (-)



Figuur 3.2-1 Massabalans van opgeloste stof in een controlevolume $\Delta x \Delta y \Delta z$.

Invullen van (3.2-1) en toepassing van de productregel voor differentiëren op het linkerdeel van de vergelijking geeft:

$$c \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = - \frac{\partial nc}{\partial t} \quad (3.2-3)$$

Wanneer vloeistof en medium onsamendrukbaar zijn, geldt dat de divergentie van de volumeflux-dichtheid ($\nabla \cdot \mathbf{v}$) gelijk is aan nul (waarom?) en vereenvoudigt de vergelijking tot:

$$\mathbf{v} \cdot \nabla c = - \frac{\partial nc}{\partial t} \quad (3.2-4)$$

De oplossing van de convectievergelijking levert de concentratieverdeling van opgeloste stoffen in

de ruimte als functie van de tijd. Beperken we ons (voorlopig) tot eendimensionale stroming, dan kunnen we de convectievergelijking schrijven als:

$$v_{ex} \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{\partial c}{\partial t} = 0 \quad (3.2-5)$$

Dit type vergelijking staat bekend als een hyperbolische differentiaalvergelijking. De oplossing kan worden verkregen met behulp van de 'methode van de karakteristieken'.

Omdat c een functie is van x en t kunnen we voor de totale differentiaal schrijven:

$$dc = \frac{\partial c}{\partial x} dx + \frac{\partial c}{\partial t} dt \quad (3.2-6)$$

Eliminatie van de partiële afgeleide $\frac{\partial c}{\partial t}$ tussen (3.2-5) en (3.2-6) geeft:

$$dc = \frac{\partial c}{\partial x} (dx - v_e dt) \quad (3.2-7)$$

Indien de uitdrukking tussen de haken gelijk is aan nul, dan is de differentiaal van de concentratie gelijk aan nul. De lijn waarlangs dit geldt wordt een karakteristiek van de vergelijking genoemd:

$$dx - v_e dt = 0 \quad (3.2-8)$$

In dit geval is het de (gewone) differentiaalvergelijking van de lijn waarlangs een deeltje beweegt. Dat wil dus zeggen dat *langs het pad van een deeltje* de totale afgeleide gelijk is aan nul:

$$dc = 0 \quad (3.2-9)$$

De conclusie luidt: bij transport door convectie is de verandering van de concentratie, zoals gezien door een waarnemer die het pad van een deeltje volgt, gelijk aan nul. Deze afgeleide staat bekend als de materiële afgeleide en wordt wel geschreven als $\frac{D}{Dt}$ en dus krijgen we:

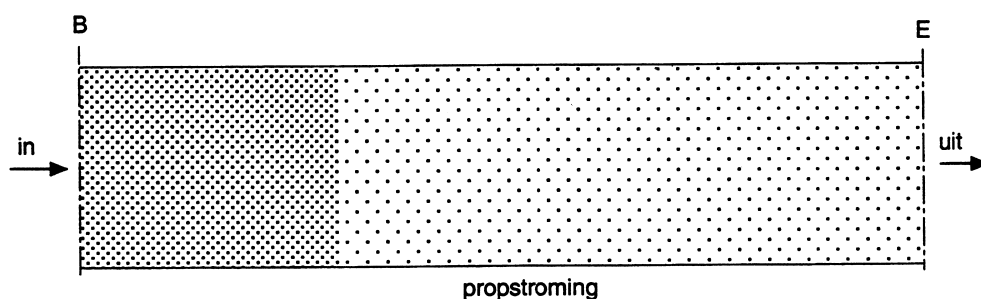
$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial c}{\partial x} \frac{dx}{dt} = 0 \quad (3.2-10)$$

en omdat $\frac{dx}{dt} = v_e$, is dit hetzelfde als de oorspronkelijke vergelijking (3.2-5). De karakteristieken zijn de sleutel voor de oplossing van dit soort vergelijkingen, omdat ze informatie bevatten omtrent de waarde van c . Het pad van een deeltje is hier elke (rechte) lijn die begint op $t=0$ bij $x=x_0$. Als we weten waar het deeltje zich bevond op $t=0$ en bovendien de concentratie in dat punt kennen, is de concentratie op ieder punt van de karakteristiek daaraan gelijk.

3.3 De berekening van reistijden

3.3.1 De verblijftijd bij eendimensionale stroming

Is het zeer eenvoudige grondwatersysteem van figuur 3.3-1 aanvankelijk met zoet water gevuld en begint men op het tijdstip $t=0$ bij punt B zout water in te voeren, dan treedt verzilting op van de grondkolom tussen B en E.

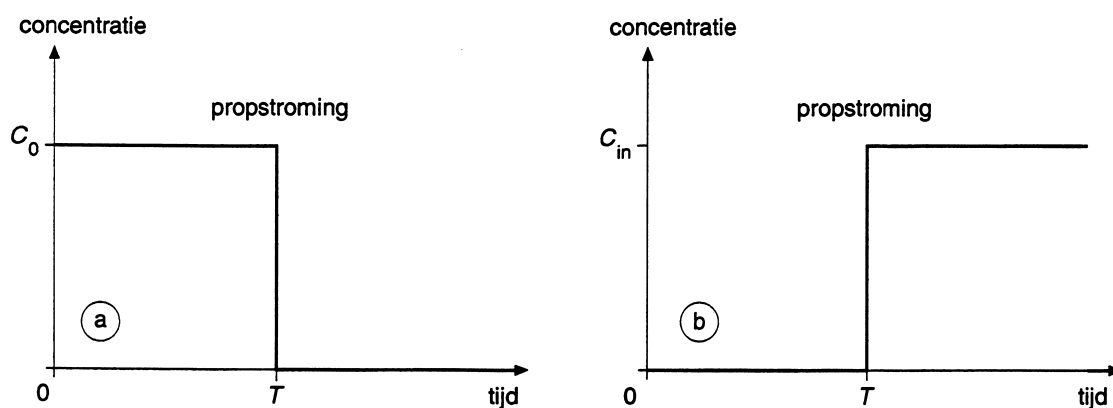


Figuur 3.3-1 Convectieve stroming door een grondkolom.

Bij een propstroming waarbij alle deeltjes netjes achter elkaar 'in het gelid' lopen, zal er dan op het tijdstip t_d bij E plotseling zout water gaan uittreden. Door deze *doorbraak* van het zoute water treedt dus bij E een plotselinge stijging van de zoutconcentratie op (zie figuur 3.3-2b). Bij ontzilting van een oorspronkelijke zoute grond is het verloop van de concentratie uiteraard omgekeerd (figuur 3.3-2a).

Het tijdstip t_d , waarop de doorbraak valt, komt overeen met de reistijd van het water in de kolom.

De reistijd van een waterdeeltje door een bepaald systeem wordt ook wel de *verblijftijd* genoemd.



Figuur 3.3-2 Ontziltng en verziltng bij convectieve stromng door een kolom.

De reistijd kan worden gevonden door berekening van de lijnintegraal:

$$t_d = \int_B^E n_e \frac{ds}{v} \quad (3.3-1)$$

waarin ds ($= dx$) een infinitesimale stap is langs een stroomlijn tussen B en E.

Er is echter ook een andere benadering mogelijk en wel door te bedenken dat een waterdruppel die bij B binnentreedt het einde E zal bereiken als al het water tussen B en E is verdrongen. In dit eenvoudige systeem volgt hieruit voor de reistijd van een waterdeeltje:

$$t_d = \frac{V_w}{Q} \quad (3.3-2)$$

waarin V_w het volume water is tussen B en E (m^3) en Q het doorstromende debiet (m^3s^{-1}).

Bij de beschreven stroming is de spreiding in de verblijftijd nul. De vergelijkingen (3.2-8) en (3.2-9) beschrijven samen een propstroming in één dimensie. In eendimensionale stromingen treedt een plotselinge doorbraak op indien de invoerconcentratie op een zeker tijdstip wordt veranderd.

Voor drinkwaterleidingbedrijven is het dikwijls belangrijk te weten waar het opgepompte water vandaan komt en hoe lang het duurt voordat water dat zich op een bepaalde afstand van de put

bevindt, zal worden opgepompt. Het onttrokken debiet Q van de put uit paragraaf 2.7.3, figuur 2.7-4, stroomt op een afstand r door een cilindermantel met oppervlak $2\pi rD$ (waarbij wij D als constant beschouwen). De fluxdichtheid is dan:

$$v = -\frac{Q}{2\pi rD} \quad (3.3-3)$$

waarbij het minteken aangeeft, dat de stroming tegengesteld is aan de richting van r . De snelheidsvectoren zijn in dit geval steeds naar het betreffende onttrekkingspunt gericht. De doorsnede (en dus ook de snelheid) is niet constant, maar een functie van r .

Ook hier is de reistijd gelijk aan het volume water in de watervoerende laag tussen r en de put ($r = 0$) gedeeld door het debiet. Binnen een straal r uit de putas bevindt zich:

- aan grond een volume $\pi r^2 D$ (m³)
- aan grondwater $\pi n_e r^2 D$ (m³)

De verblijftijd van water dat zich op een afstand r bevindt is dan:

$$t_r = \frac{\text{voorraad aanwezig grondwater}}{\text{doorstromend debiet}} = \frac{\pi n_e r^2 D}{Q} \quad (3.3-4)$$

Planologische beschermingszones rondom winplaatsen voor drinkwater (aangegeven door bordjes 'Waterwingebied') zijn berekend op een verblijftijd van 25 jaar. Binnen deze zones mogen bijvoorbeeld geen benzinstations worden gesticht.

Onder natuurlijke omstandigheden komt een plotselinge doorbraak niet voor, enerzijds wordt dit veroorzaakt doordat er naast convectie ook andere transportmechanismen zijn (die in hoofdstuk 4 worden besproken), anderzijds doordat de doorlatendheid van een watervoerende laag altijd variatie vertoont. Hierdoor treden langs bepaalde trajectoriën afwijkende snelheden op. Is de snelheid veel groter dan de gemiddelde, dan spreekt men van *preferente stroombanen*. Het effect van de variabiliteit is, dat de doorbraak van stoffen geleidelijker verloopt.

In meer gecompliceerde systemen is meestal langs verschillende stroomlijnen (bij niet-stationaire stroming verschillende trajectoriën) ook de verblijftijd verschillend. Er treedt dan, ook in homogene gronden, een spreiding op in de verblijftijden. Ook bij propstroming is dan de doorbraak van de nieuwe watersoort een geleidelijke.

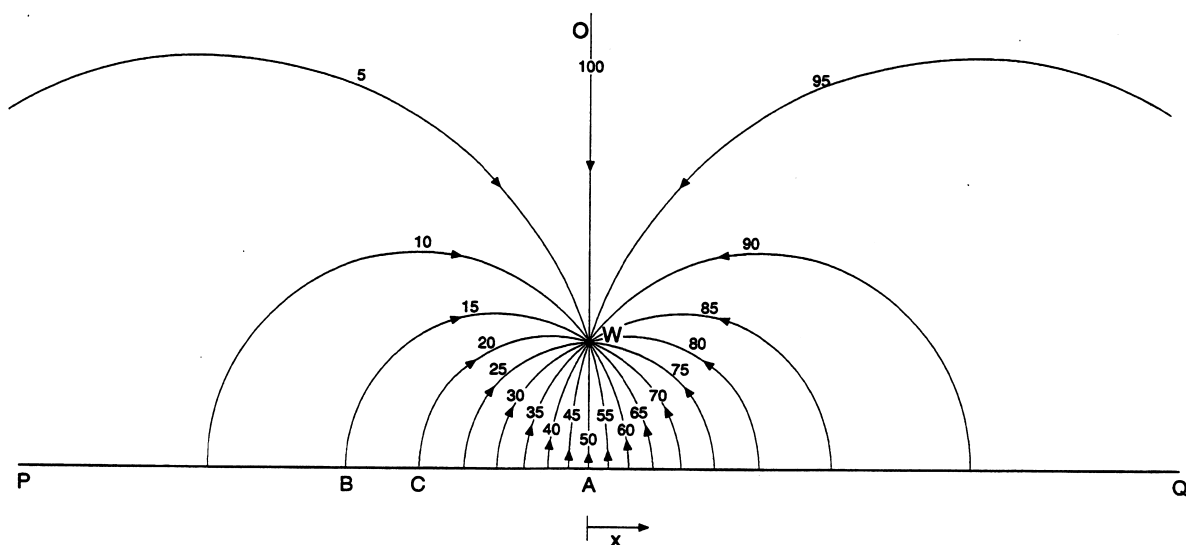
3.3.2 *Verblijftijden in systemen met verschillen in reistijd*

Uit het bovenstaande blijkt dat voor eendimensionale systemen de berekening van de reistijd bij stationaire stromingen eenvoudig te vinden is in termen van het debiet en karakteristieken van het systeem. Bij twee- of driedimensionale stromingen met gebogen stroomlijnen, kan een dergelijke directe methode niet worden toegepast.

Bij de meeste grondwatersystemen is de reistijd langs verschillende stroomlijnen of trajectoriën verschillend. Een voorbeeld is de stationaire stroming, door een watervoerende laag van constante dikte, vanuit een recht kanaal naar een winput W op afstand a van het kanaal. De situatie is schematisch getekend in figuur 3.3-3. Langs de kortste stroomlijn AW is de verblijftijd het kortst, langs BW is zij al veel langer. De resultaten van de exacte oplossing voor dit stelsel worden onder 3.3.2.2 behandeld; in 3.3.2.1 geven wij een meer algemene methode.

3.3.2.1 *Oplossingen met behulp van numerieke methoden*

Om de reistijd in zulke situaties te vinden is het in het algemeen nodig eerst de stijghoogteverdeling (als functie van de ruimtelijke coördinaten en de tijd) te berekenen. Daarna kan men dan de lijnintegraal (3.3-1) oplossen. Dit betekent dat men een vloeistofdeeltje volgt op zijn pad door het stroomdomein ('particle tracking').



Figuur 3.3-3 Stroming van een lang recht kanaal (PQ) naar een winput. De stroomfunctie is aangegeven in procenten van het in W onttrokken water.

Het berekenen van de stijghoogte verdeling, meestal aangeduid als de oplossing van het grondwatervraagstuk, geschiedt tegenwoordig vooral met behulp van numerieke methoden. Bij die methoden worden de ruimte- en tijdschalen gediscretiseerd, dat wil zeggen dat het continue verloop wordt vervangen door een aantal kleine discrete stappen. Het stroomdomein wordt zodoende bedekt met een netwerk. De functiewaarden worden (voor iedere tijdstap) alléén in de knooppunten berekend. Uit de berekende waarden van de stijghoogte kan vervolgens de snelheid worden gevonden, waarmee een gediscretiseerde vorm van het pad en de reistijd kunnen worden gesimuleerd. In hoofdstuk 5 wordt een van numerieke methoden uitvoerig besproken.

Voor vraagstukken die kunnen worden beschreven met behulp van een analytische expressie voor de potentiaal- (en stroom)functie, is de oplossing in zoverre eenvoudig, dat niet eerst een numerieke oplossing hoeft te worden gevonden van de potentiaalfunctie. In het geval van figuur 3.3-3 kan de stroming beschreven worden met behulp van de zogenaamde fundamentele oplossingen. Het blijkt dat het onderhavige stroomlijnenpatroon verkregen kan worden door de sommatie van een bron en een put, van gelijke sterkte, ieder gelegen op afstand a aan weerszijden van de rand van het kanaal (zie collegedictaat *Vloeistofmechanica en grondwaterstroming*).

Voor de snelheidspotentiaal vindt men:

$$\phi = \frac{-Q}{2\pi D} \{ \ln \sqrt{x^2 + (y+a)^2} - \ln \sqrt{x^2 + (y-a)^2} \} \quad (3.3-5)$$

en voor de stroomfunctie:

$$\psi = \frac{-Q}{2\pi D} \{ \arctan \frac{y+a}{x} - \arctan \frac{y-a}{x} \} \quad (3.3-6)$$

hierin is Q de sterkte van de bron (positief) en de put (negatief) en D de dikte van de laag.

Door (3.3-5) te differentiëren naar x en y en te delen door de (effectieve) poriënfractie n_e vindt men de snelheden in de respectievelijke richtingen. Dit stelsel gewone differentiaalvergelijkingen kan vervolgens numeriek worden opgelost, (bijvoorbeeld met de methode van Runge-Kutta) waaruit het pad en de reistijd van een vloeistofdeeltje volgen. (Van den Akker, 1982)

3.3.2.2 Analytische oplossingen

Voor bepaalde tweedimensionale stationaire stromingen zijn ook analytische oplossingen mogelijk

met behulp van de complexe functie theorie (Churchill, 1962; Verruijt, 1970; Van Rootselaar en Arnoldussen, 1977). Complexe functies zijn relaties tussen complexe getallen. Voor de afbeelding ervan hebben we twee vlakken nodig: het 'z-vlak' en het 'w-vlak'. Het z-vlak is het vlak waarin de complexe functie z wordt afgebeeld als functie van het reële deel x en imaginaire deel $i y$. Dit komt overeen met het (werkelijke) x - y -vlak, waarin de stroming wordt afgebeeld. Het w-vlak is het vlak waarin de complexe functie $w(z)$ wordt afgebeeld als functie van het reële deel u , de potentiaalfunctie en het imaginaire deel $i v$, met v de stroomfunctie. Een functie in het x - y vlak wordt dus afgebeeld in het w-vlak. Als deze afbeelding (door een slimme keuze van de complexe functie) een eenvoudige is, bijvoorbeeld evenwijdige lijnen, kan de stroming in het w-vlak worden opgelost. Terugtransformeren naar het x - y vlak (minder eenvoudig) geeft dan de gevraagde oplossing. Voor de reistijdberekening langs een stroomlijn moet een lijnintegraal worden opgelost, wat meestal veel moeite kost. Als voorbeeld wordt weer de stroming van figuur 3.3-3 gebruikt. Uit de analyse (zie bijvoorbeeld Van Rootselaar en Arnoldussen, 1977) volgt, dat in dit geval de stroomlijnen *cirkels* zijn (de rechten AW en OW zijn cirkels met een oneindig grote straal). Tussen elke twee getekende stroomlijnen loopt 5% van het gewonnen debiet.

De reistijd langs de stroomlijn Ψ (Ψ in % van Q) blijkt (na veel algebra) gelijk te zijn aan:

$$t_q = \frac{nD}{Q} \frac{2\pi a^2}{\sin^2 \alpha} (1 - \alpha \cotg \alpha) \quad (3.3-7)$$

met

$$\alpha = \frac{2\pi}{100} (\Psi - 50)$$

Voor $\Psi = 50\%$ geldt:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1 - \alpha \cotg \alpha}{\sin^2 \alpha} = 1/3$$

waarin:

t_q	= reistijd langs stroomlijn Ψ	(d)
n	= volume fractie water	(-)
D	= dikte aquifer	(m)
Q	= debiet winput	(m ³ d ⁻¹)
a	= afstand put-kanaal	(m)
Ψ	= stroomfunctie (0-100%)	(%)

De stroomlijnen naar de winput beginnen bij het kanaal, op een afstand x_{φ} van het punt A. Er geldt (zie ook Tabel 3.3-1):

$$x_{\varphi} = a \frac{1 - \cos \alpha}{\sin \alpha} \quad (3.3-8)$$

waarbij voor $\varphi = 50\%$ geldt:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} x_{\varphi} = 0$$

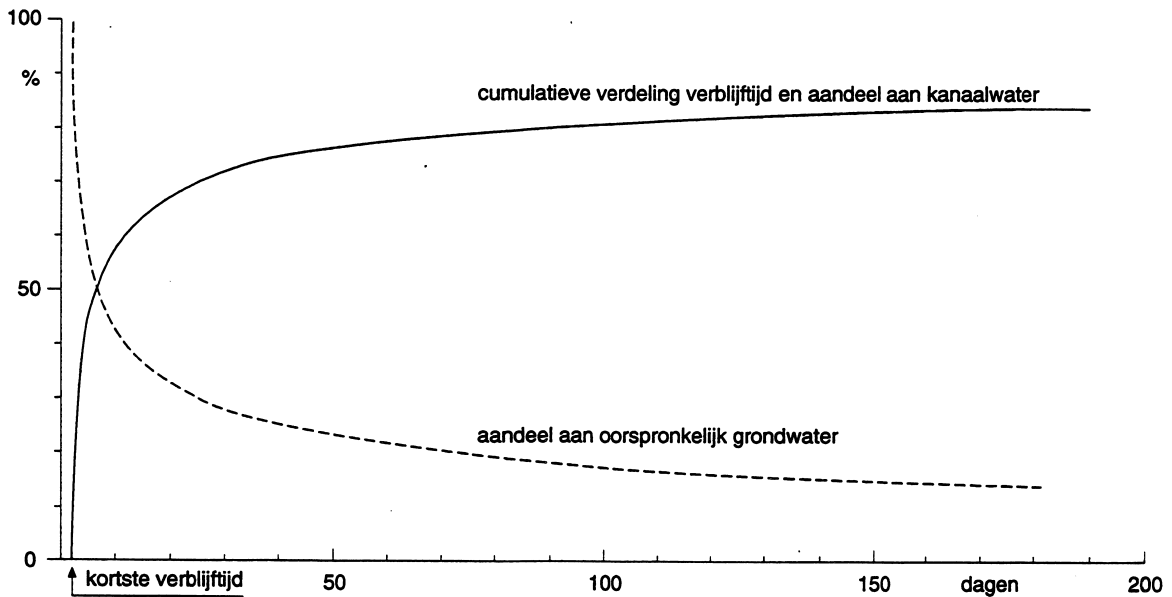
De verblijftijden zijn dus ongelijk. Tabel 3.3-1 toont de resultaten van berekeningen voor verschillende waarden van de stroomfunctie.

Tabel 3.3-1 Reistijden t_{ψ} en oorsprong van de stroomlijnen x_{ψ} in afhankelijkheid van de stroomfunctie q_{ψ} bij stroming van een recht kanaal naar een winput.

ψ %	t_{ψ} dagen	x_{ψ} m	ψ %	t_{ψ} dagen	x_{ψ} m
0	∞	- ∞	100	∞	∞
1	79579.-	- 318.20	99	79579.-	318.20
2	9949.1	- 158.94	98	9949.1	158.94
3	2949.2	- 105.79	97	2949.2	105.79
4	1245.2	- 79.158	96	1245.2	79.158
5	638.37	- 63.138	95	638.37	63.138
10	81.096	- 30.777	90	81.096	30.777
15	24.938	- 19.626	85	24.938	19.626
20	11.201	- 13.764	80	11.201	13.764
25	6.284	- 10.000	75	6.283	10.000
30	4.110	- 7.265	70	4.110	7.265
35	3.026	- 5.049	65	3.062	5.049
40	2.458	- 3.249	60	2.458	3.249
45	2.179	- 1.584	55	2.179	1.584
50	2.094	0	50	2.094	0

De cumulatieve verdeling is weergegeven in Figuur 3.3-4 (getrokken lijn). Deze verdeling is identiek met het aandeel van kanaalwater in het in W opgepompte debiet. Dit kanaalwater breekt door bij $t_q = 2.0944$ d, langs de 50% stroomlijn AW. Reeds na 2.46 dagen is het gewonnen water tussen de stroomlijnen 40% en 60% kanaalwater, zodat het aandeel van dit water dan gestegen is tot 20%. Een aandeel van 80% kanaalwater wordt bereikt na 81.1 d en pas na 638 dagen wordt 90% kanaalwater opgepompt. De verdeling van de verblijftijden is dus sterk

asymmetrisch en nog zeer lange tijd blijft er een vrij groot aandeel aan oorspronkelijk grondwater in het gewonnen water aanwezig. Was dit grondwater oorspronkelijk zout en hoopt men in W zoet kanaalwater te kunnen winnen, dan kan het lang duren voordat een aanvaardbare kwaliteit wordt bereikt. Het zoutgehalte van dit water (in % van het oorspronkelijke) is als onderbroken lijn in Figuur 3.3-4 weergegeven; deze lijn is complementair met het aandeel aan kanaalwater.



Figuur 3.3-4 Cumulatieve verdeling van de verblijftijden en samenstelling van het opgepompte mengsel in het geval van Figuur 3.3-3.

Opgaven

3.3.1. Leid de karakteristieken af voor de tweedimensionale convectie vergelijking.

3.3.2. Voor radiaalsymmetrische systemen is het gebruik van poolcoördinaten aan te bevelen.

Vergelijking (3.2-4) luidt dan:

$$v_{er} \frac{\partial c}{\partial r} + \frac{v_{e\theta}}{r} \frac{\partial c}{\partial \theta} = - \frac{\partial c}{\partial t}$$

Leid de karakteristiek af voor een zuiver radiale stroming en verifieer vergelijking (3.3-4) door T uit te drukken als de integraal van de infinitesimale afstand (dr) gedeeld door effectieve snelheid

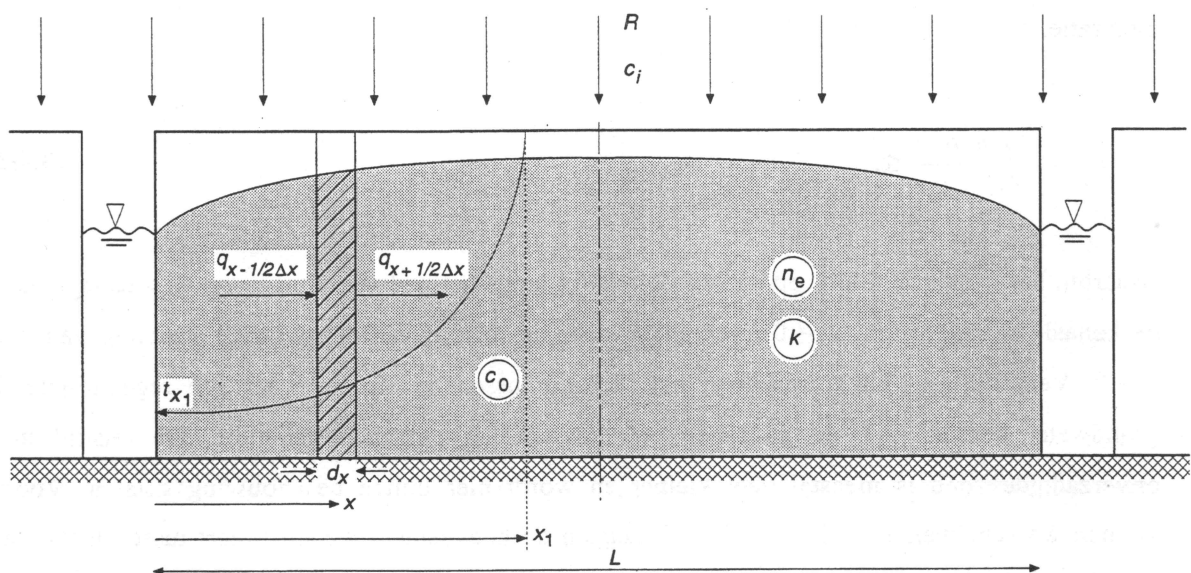
v_e .

3.3.3. Waarom is de stroming naar een put in de werkelijkheid vrijwel nooit een eendimensionale stroming?

3.4 De invloed van verspreide bronnen van verontreiniging op de kwaliteit van grondwater

Veel bronnen van verontreiniging zijn diffuus: zakputten van verspreide bebouwing, residuen van bemesting of bestrijdingsmiddelen uit de landbouw, componenten die met de neerslag worden aangevoerd etc. Een goed voorbeeld is de sterke belasting van het grondwater met nitraten in gebieden met intensieve veehouderij¹⁾.

Als voorbeeld kiezen we de (stationaire) stroming naar evenwijdige ontwateringsmiddelen, zie figuur 3.4-1. Stel dat de concentratie van het grondwater door vervuiling gestegen is tot c_0 en dat we willen uitrekenen hoe lang het duurt voordat het water dat de sloot instroomt een aanvaardbare kwaliteit heeft, bijvoorbeeld om dienst te doen als drinkwater voor vee. We nemen aan dat het water stroomt 'volgens Dupuit' en dat de concentratie van stoffen in het infiltrerende regenwater gelijk is aan c_i . De stroming wordt door de Dupuit-veronderstelling gereduceerd tot een eendimensionale stroming, de filtersnelheid is een functie van x , zie paragraaf 2.7.2.



Figuur 3.4-1 Transport van een diffuse verontreiniging.

¹⁾ De Meststoffenwet (1986) en de Wet Bodembescherming (1986, en uitgebreid in 1994), moeten aan deze bron van verontreiniging paal en perk stellen.

De tijd die een deeltje nodig heeft om een infinitesimale afstand dx af te leggen is gelijk aan:

$$dt = n_e \frac{dx}{v_x} \quad (3.4-1)$$

Voor v_x kan nu de wet van Darcy worden ingevuld. Dat betekent dat we eerst een uitdrukking voor de afgeleide $\frac{dh}{dx}$ moeten vinden. In dit geval kunnen we die verkrijgen door vergelijking (2.7-9) te

differentiëren. We kunnen echter ook direct gebruik maken van de Dupuit-aanname die tot gevolg heeft dat de totale flux gelijk is aan q_x (en alleen een functie is van x). Omdat $q_x = v_x A = v_x h l$, kunnen we vergelijking (3.4-1) schrijven als:

$$dt = \frac{n_e h dx}{q_x} \quad (3.4-2)$$

De teller is gelijk aan het volume water in het controlevolume hdx ; q_x is de gemiddelde hoeveelheid die er door stroomt. Dit komt overeen met het eerder gevonden resultaat (3.3-2), maar nu toegepast op een klein controlevolume hdx . De reistijd van $x = x_1$ naar $x = 0$ vinden we door integratie:

$$t_{x_1} = - \int_{x_1}^0 \frac{n_e h}{q_x} dx \quad (3.4-3)$$

(waarom het - teken?). Merk op dat we de reistijd langs het pad van punt x_1 op de waterspiegel tot de kanaal- of slootwand ($x = 0$), vervangen door de reistijd van evenwijdige stroming van x_1 tot $x = 0$. Vergelijking (3.4-3) beschrijft het verband tussen de afstand waar een regendruppel het grondwater bereikt (x_1), en de reistijd (t) tot aan het ontwateringsmiddel. De reistijd in de onverzadigde zone is meestal veel kleiner en wordt hier buiten beschouwing gelaten. Voor q_x kunnen we schrijven $R (\frac{1}{2}L - x)$, dat wil zeggen de hoeveelheid die infiltreert tussen het midden van de kavel en het punt x . R is het netto accres, in het algemeen het verschil tussen neerslag en verdamping.

$$t_{x_1} = n_e \int_0^{x_1} \frac{h dx}{R (\frac{1}{2}L - x)} \quad (3.4-4)$$

h is ook een functie van x (zie vergelijking (2.7-7)) en dus kan de integraal in principe worden opgelost. Dit vereist echter nogal wat algebra en het opzoeken van een standaardintegraal (Koopmans, 1995). Het wordt een stuk eenvoudiger als de dikte D van de doorstroomde laag groot is ten opzichte van de veranderingen van h , we kunnen dan h vervangen door D en de reistijd wordt:

$$t_{x_1} = \frac{n_e D}{R} \int_0^{x_1} \frac{dx}{(\frac{1}{2}L - x)} = -\frac{n_e D}{R} \ln(\frac{1}{2}L - x) \Big|_0^{x_1} = -\frac{n_e D}{R} \ln \frac{(\frac{1}{2}L - x_1)}{\frac{1}{2}L} \quad (3.4-5)$$

Met behulp van deze vergelijking is voor ieder punt x te berekenen hoe lang het duurt voordat een geïnfiltreerde waterdruppel de sloot heeft bereikt. Op het moment dat een waterdeeltje is gearriveerd van uit $x = x_1$ heeft het water uit het gebied tussen $x = 0$ en $x = x_1$ een concentratie c_i , het water dat aankomt uit het gebied tussen $x = x_1$ en $x = \frac{1}{2}L$ heeft een concentratie c_0 .

Als de logaritme in (3.4-5) gelijk is aan -1.0, dat wil zeggen als de fractie vervangen water 0.632 is, spreken we van de karakteristieke verblijftijd τ :

$$\tau = \frac{n_e D}{R} \quad (3.4-6)$$

De gemiddelde concentratie van het water dat de sloot binnen stroomt (op $t = t_x$) is:

$$\bar{c} = \frac{R(\frac{1}{2}L - x)c_0 + Rxc_i}{R\frac{1}{2}L} \quad (3.4-7)$$

Als de invoerconcentratie nul is (schoonsoelen) kan de gemiddelde concentratie worden geschreven als:

$$\bar{c} = c_0 e^{-\frac{t_x R}{n_e D}} = c_0 e^{-\frac{t_x}{\tau}} \quad (3.4-8)$$

De gemiddelde concentratie van het water dat de sloot binnenstroomt, neemt dus exponentieel af met de tijd. Hebben we te maken met vervuiling, dus een oorspronkelijke concentratie $c_0 = 0$ en vanaf $t = 0$ een invoerconcentratie c_i , dan is op dezelfde wijze aan te tonen dat het concentratieverloop beschreven wordt door:

$$\bar{c} = c_i (1 - e^{-t/\tau}) \quad (3.4-9)$$

waarin:

t	= tijd sinds het begin van de verontreiniging	(d of j)
D	= dikte aquifer	(m)
R	= neerslagoverschot ('recharge')	(md^{-1} of mj^{-1})

De bovenstaande methode is door Van Ommen (1986, 1988) veralgemeend om de invloed van diffuse bronnen op de kwaliteit van gewonnen grondwater te beschrijven. (zie opgave 3.4.3.)

De vergelijkingen (3.4-8) en (3.4-9) beschrijven dan de concentratie van stoffen in het water dat wordt opgepompt uit een watervoerende laag.

Ook deze oplossing is alleen geldig als we aannemen dat de grondwaterstroming verloopt volgens Dupuit, dat wil zeggen dat de waterbeweging als een horizontale stroming kan worden berekend.

In droge streken is het grondwater vaak van nature brak of zout, meestal bevindt het zich op grote diepte. Gaat men dergelijk land bevoeien, dan leiden de onvermijdelijke verliezen tot een stijging van het grondwater, soms wel van enkele meters. Is het grondwater tot nabij het maaiveld gekomen, dan treedt in een droog klimaat een sterke capillaire opstijging op. Deze brengt grondwater aan het maaiveld, waar het verdampt. De zouten blijven achter en veroorzaken ernstige verzilting. De remedie tegen dit zeer ongewenste proces is de aanleg van een drainagestelsel (diepe sloten, soms drainbuizen, soms ook pompputten). In een dergelijk gecombineerd systeem is er 'overall' een zeker verlies aan tamelijk zoet water, afkomstig uit de irrigatieverliezen. Dit overschot zal naar de genoemde winningsmiddelen stromen en op den duur het oorspronkelijke brakke tot zoute grondwater verdringen. Voor het afgevoerde water geldt dan vergelijking (3.4-8) waarin nu R (m j^{-1}) de irrigatieverliezen zijn.

Door het exponentiële karakter van het proces kan het lang duren, voordat het afgevoerde water een aanvaardbare kwaliteit bereikt heeft en bijvoorbeeld opnieuw voor bevoeiing kan worden aangewend.

Opgaven

3.4.1 Leid vergelijking (3.4-4) af door substitutie van $v = -k \frac{\partial h}{\partial x}$ in vergelijking (3.4-1).

3.4.2. Veronderstel een stroming zoals in figuur 3.4-1, waarbij een tijdelijk diffuus toegediende verontreiniging optreedt. Op $t = 0$ is de concentratie van het grondwater overal nul. Van $t = 0$ tot $t = t_1$ heeft de gestage infiltratie R een concentratie c_i , daarna is de invoerconcentratie $c_i = 0$

- a. Bereken de gemiddelde concentratie $\bar{c}(t)$, van het water dat de sloot instroomt indien $t < t_1$.
- b. Idem indien $t > t_1$.

3.4.3. Beschouw de stationaire stroming van freatisch grondwater naar een put in een aquifer waarvan de verzadigde dikte D bedraagt. Het onttrokken debiet is Q en de voeding R .

Bereken de concentratie van een opgeloste stof in het water dat de put instroomt op een willekeurig tijdstip t als op $t = 0$ de concentratie in het grondwater overal nul bedraagt en de concentratie in de voeding voor alle t gelijk is aan c_i .

3.5 De invloed van de dichtheid

Convectie werd in paragraaf 3.2 gedefinieerd als 'het meegaan met de vloeistof'. Dit impliceert dat de opgeloste stof zich tijdens het transport gedraagt als een vloeistofdeeltje. Bij zeer lage concentraties van verontreiniging, zoals bijvoorbeeld het geval is bij bestrijdingsmiddelen, wordt de dichtheid van de oplossing niet beïnvloed door de concentratie. In deze situaties is de definitie van de stijghoogte (1.5-10) geldig en kan voor de wet van Darcy vergelijking (1.6-4) worden gebruikt. Met andere woorden: de vloeistofstroming kan worden beschouwd als een potentiaalstroming die kan worden beschreven met behulp van een differentiaalvergelijking waarin één variabele voorkomt, te weten de stijghoogte. Voorbeelden van zo'n vergelijking zijn (2.5-5) of een op de Dupuit-veronderstelling gebaseerde vergelijking zoals (2.6-4). Uit de oplossing van de differentiaalvergelijking kan in ieder punt de fluxdichtheid worden berekend, die nodig is voor de oplossing van de convectievergelijking (3.2-3). Dit betekent dat de stromingsvergelijking én de convectievergelijking beide moeten worden opgelost. De oplossing van de eerste wordt niet beïnvloed door de tweede. In het algemeen is een analytische oplossing van het stelsel vergelijkingen niet voorhanden. Alleen voor zeer eenvoudige situaties wanneer de fluxdichtheid bekend is, zoals bij kolomproeven, zijn analytische oplossingen mogelijk.

Zijn de concentraties van opgeloste stoffen relatief groot, dan zal de dichtheid van water variëren en wel in zodanige mate, dat het niet langer verantwoord is ρ als een constante te beschouwen. Voor de wet van Darcy moet men in zulke gevallen niet vergelijking (1.6-4) gebruiken maar (1.6-10), waarin zowel de drukkracht als de zwaartekracht (beide per volume) variabel zijn. Combinatie met de massabalans (vergelijking (2.2-6)) resulteert in één differentiaalvergelijking met twee onbekenden, namelijk p en ρ .

$$\frac{\partial n \rho}{\partial t} - \nabla \cdot \rho \left\{ \frac{\kappa}{\eta} (\nabla p + \rho g \nabla z) \right\} = 0 \quad (3.5-1)$$

De eerste term in vergelijking (3.5-1) vertegenwoordigt de massaverandering per volume grond. Meestal wordt aangenomen dat de viscositeit onafhankelijk is van de concentratie van de opgeloste stof. Deze laatste aanname is niet geheel correct, ook de viscositeit wordt, zij het in geringe mate, beïnvloed door de aanwezigheid van opgeloste stoffen. Voor brak- en zout water van 10 °C wordt de volgende empirische vergelijking gebruikt:

$$\eta = 0,308 \cdot 10^{-8} [\text{Cl}^-] + 0,00131 \quad (3.5-2)$$

waarin $[\text{Cl}^-]$ de chlorideconcentratie is in mg Cl^- per liter

Op grond van experimentele gegevens vonden Lever en Jackson (1985) bij 20 °C:

$$\eta = \eta_0 (1 + 1.85 \omega - 4.1 \omega^2 + 44.5 \omega^3) \quad (3.5-3)$$

waarin η_0 = de viscositeit van zuiver water (bij 20 °C) en ω = de massafractie zout (kg zout per kg oplossing).

Afgezien van de viscositeit, zijn er in dit vraagstuk dus twee fysische grootheden die de stroming bepalen: de druk p en de dichtheid ρ . De verdeling van beide, als functie van de ruimtelijke coördinaten en de tijd, vormt de oplossing van ons stromingsprobleem. Eén vergelijking met twee onbekenden kan echter niet worden opgelost, en daarom is additionele informatie (een vergelijking) noodzakelijk. Omdat de dichtheid een functie is van de concentratie van de opgeloste stoffen, ligt het voor de hand de massabalans van de opgeloste stof als tweede vergelijking te kiezen. Daarmee wordt echter een derde onbekende geïntroduceerd, want de verdeling van c als functie van x , y , z en t is ook onbekend. Daardoor wordt een derde vergelijking noodzakelijk en dat is de relatie tussen dichtheid en concentratie (of massafractie zout).

Voor de complete oplossing van dit vraagstuk zijn er dus drie vergelijkingen nodig:

- de continuïteitsvergelijking voor de vloeistof (water en opgeloste stoffen (3.5-1));
- de continuïteitsvergelijking voor de opgeloste stof (3.2-3);
- de relatie tussen dichtheid en concentratie.

De relatie tussen de dichtheid van de vloeistof en de concentratie van de opgeloste stof hangt uiteraard af van de aard der opgeloste stoffen en bovendien van het concentratieniveau. Voor

verdunde oplossingen waarbij het volume niet verandert door toevoeging van de stof, geldt dat de verandering van de dichtheid met de concentratie (die uitgedrukt wordt in mol per m³) gelijk is aan M , het gewicht van één mol in kg.

Indien de verandering van de dichtheid het gevolg zou zijn van drukverandering en van concentratie verandering, kan de relatie tussen ρ , p en c worden geschreven als:

$$\rho = \rho_0 + (c - c_0) \left(\frac{\partial \rho}{\partial c} \right)_{c_0} + (p - p_0) \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_{p_0} + \dots \quad (3.5-4)$$

Analoog aan de samendrukbaarheidscoëfficiënt kan de concentratiecoëfficiënt worden gedefinieerd:

$$\beta_c = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial c} \Big|_{p,T} \quad (3.5-5)$$

zodat vergelijking (3.5-4) bij benadering kan worden geschreven als:

$$\rho = \rho_0 \{ 1 + (c - c_0) \beta_c + (p - p_0) \beta_p + \dots \} \quad (3.5-6)$$

Uit de definitie van de samendrukbaarheidscoëfficiënt en de concentratiecoëfficiënt volgt dat de dichtheid een exponentiële functie is van p en c (waarom?). Meestal zal men gebruik maken van een semi-empirische relatie, Leijnse (1992) vermeldt bijvoorbeeld:

$$\rho = \rho_0 e^{0.7\omega + \beta_p(p - p_0)} \quad (3.5-7)$$

Wordt geen rekening gehouden met de verandering van het poriënvolume (star korrelskelet) en het water als onsamendrukbaar beschouwd, dan is de divergentie van de volumefluxdichtheid van de oplossing ook gelijk aan nul. De fluxvergelijking is dus dezelfde als (2.2-10):

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = - \nabla \cdot \left\{ \frac{\kappa}{\eta} (\nabla p + \rho g \nabla z) \right\} = 0 \quad (3.5-8)$$

In een cartesisch coördinatenstelsel met z positief naar boven kan dit worden herschreven als:

$$\nabla \cdot \left(\frac{\kappa}{\eta} \nabla p \right) = -g \frac{\partial \frac{\kappa \rho}{\eta}}{\partial z} \quad (3.5-9)$$

en indien de intrinsieke doorlatendheid en de viscositeit constant zijn:

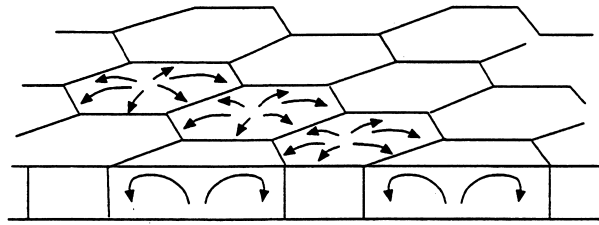
$$\nabla^2 p = -g \frac{\partial \rho}{\partial z} \quad (3.5-10)$$

Vergelijking (3.2-3) wordt onder deze omstandigheden:

$$n \frac{\partial c}{\partial t} = - \mathbf{v} \cdot \nabla c = \left\{ \frac{\kappa}{\eta} (\nabla p + \rho g \nabla z) \right\} \cdot \nabla c \quad (3.5-11)$$

Het stelsel vergelijkingen dat moet worden opgelost bestaat nu dus uit (3.5-6) of (3.5-7), (3.5-10) en (3.5-11). In de meeste gevallen moet men echter wel rekening houden met de mogelijkheden tot berging en wordt vergelijking (3.5-1) gebruikt in plaats van (3.5-10). Alleen een numerieke oplossingsprocedure kan tot resultaat leiden.

Bij grondwater met variërende dichtheid (warm en koud, zoet en zout, schoon en vuil water) kunnen *dichtheidsstromingen* ontstaan, bijvoorbeeld wanneer het lichtere water onder het zwaardere water voorkomt. In een goed doorlatend zandpakket zal dan een uitwisseling optreden, waarbij het zwaardere water zich naar beneden begeeft en het lichtere naar boven. Deze uitwisseling vindt plaats in de vorm van *convectiecellen*: op sommige plaatsen stijgt het lichtere water op, terwijl aan de randen van deze gebieden het zware water naar beneden zinkt (Figuur 3.5-1). Alleen ondoorlatende of zeer weinig doorlatende lagen kunnen dit proces stuiten. Zo is zout water boven zoet water instabiel. Grondwater wordt dan ook in de regel met de diepte zouter; het omgekeerde treedt zelden op en als dit voorkomt dan is er een vrijwel ondoorlatende laag aanwezig, waarop het zoute water is blijven staan. In het Oud-Holoceen is in West-Nederland de zee landinwaarts doorgedrongen, ongeveer tot de lijn Amsterdam-Gouda: de transgressie van Calais ('Oude Zeeklei'). Het zoute zeewater heeft toen in betrekkelijk korte tijd (enkele duizenden jaren) het zoete water in de onderliggende pleistocene laag door dichtheidsstromingen kunnen verzilten.



Figuur 3.5-1 Convectioncellen.

Ten westen van genoemde lijn is daardoor het diepe grondwater in de regel brak tot zout, terwijl verder oostwaarts deze pleistocene laag met zoet grondwater is gevuld. Als gevolg daarvan slaan vele diepe droogmakerijen in West-Nederland brak kwelwater uit, dat bijdraagt tot de verzilting van de boezemwateren in dit gebied.

Onder vuilstorten en dergelijke moet men erop verdacht zijn dat vuil percolatiewater de neiging zal hebben naar beneden te zakken (onder andere waargenomen bij vuilstort Noordwijk).

Het al dan niet optreden van dichtheidsstromingen wordt bepaald door het getal van Rayleigh:

$$Ra = \frac{g \frac{\Delta \rho}{\rho} \kappa d}{\nu \alpha} \quad (3.5-10)$$

waarin:

Ra	=	getal van Rayleigh	
g	=	versnelling zwaartekracht	(ms ⁻²)
Δρ	=	verschil in dichtheid	(kg m ⁻³)
ρ	=	gemiddelde dichtheid	(kg m ⁻³)
κ	=	intrinsieke doorlatendheid	(m ²)
d	=	laagdikte	(m)
ν	=	kinematische viscositeit = 1.31 10 ⁻⁶	(m ² s ⁻¹)
α	=	thermische diffusie coëfficiënt = 0.143 10 ⁻⁶	(m ² s ⁻¹)

Als $Ra > 4 \pi^2$ of $Ra > 40$ dan moet men rekenen met het optreden van dichtheidsstromingen.

Voor zoet water en zeewater is $\Delta\rho/\rho = 0,025$; voor κ zie paragraaf 1.6.3.

Voorbeeld:

Pleistoceen zand, $\kappa = 1 \text{ Darcy} = 10^{-12} \text{ m}^2$, $d = 200 \text{ m}$ overstroomd met zeewater geeft:

$$Ra = \frac{9.81 \cdot 1/40 \cdot 1E-12 \cdot 200}{1E-6 \cdot 0.143E-6} = 343 (>40)$$

zodat de bovengenoemde verzilting door de transgressie van Calais inderdaad plausibel is.

Daarentegen is zoet water boven zout water zeer stabiel. Dit komt onder andere voor in de duinen, waar infiltrerend regenwater een bel zoet water heeft gevormd, die drijft op onderliggend zout grondwater. Hierop komen wij later terug.

4 MENGINGSPROCESSEN EN TRANSPORTVERGELIJKINGEN

4.1 Menging

4.1.1 Inleiding

Menging treedt op wanneer twee (vloeistof)stoffen door elkaar worden gewerkt tot een homogeen geheel. Er kan sprake zijn van verschillen in chemische samenstelling (bijvoorbeeld alcohol en water) of in geval van dezelfde vloeistof, van dichtheidsverschillen die op hun beurt veroorzaakt kunnen worden door verschillen in temperatuur of concentratie van opgeloste stoffen. Het laatste is vooral van belang in grondwater.

In open water treedt menging voornamelijk op als gevolg van:

- turbulente stroming in rivieren, beken, sloten en bij kunstwerken (stuwen, schutten van sluizen);
- door geforceerde turbulentie (roeren) ten gevolge van scheepvaart;
- golfwerking (reikt tot enkele meters diepte);
- convectiestromingen onder invloed van de wind (stroming met de wind mee nabij het oppervlak en een tegenstroom langs de bodem);
- dichtheidsstromingen, veroorzaakt door verschillen in dichtheid van waterlagen die zich boven elkaar bevinden.

Zoet water boven zout water is zeer stabiel, zelfs in riviermondingen en in druk bevaren kanalen blijft het scheidingsvlak tamelijk scherp.

In ondiepe meren (IJsselmeer) vindt een effectieve doormenging plaats voornamelijk als gevolg van wind en golfwerking. In diepe meren en reservoirs overheerst de dichtheidsstroming waardoor óf stagnatie optreedt (een warme toplaag in de zomer) óf doormenging bij temperatuurswisselingen in voor- en najaar.

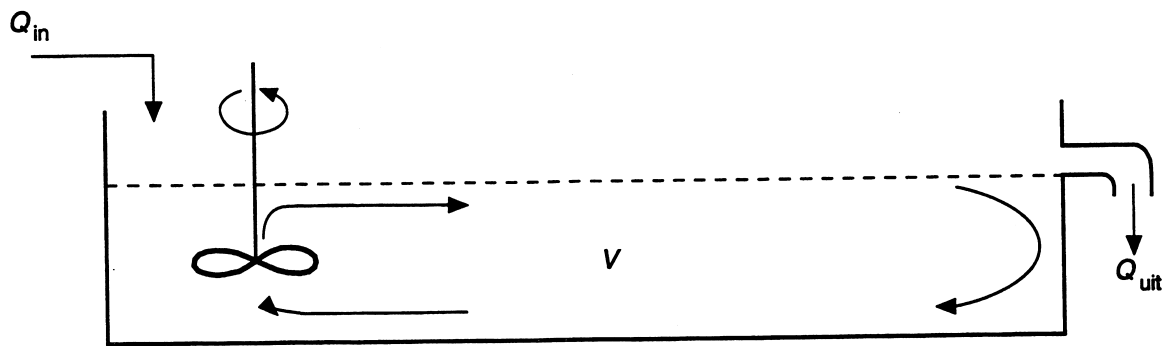
In dit dictaat wordt de beweging van *grondwater* als een laminaire stroming beschouwd. Alleen bij de stroming door spleten en gangen, voornamelijk in harde gesteenten, kan turbulente stroming en menging optreden. In laminair stromend grondwater kan menging, behalve door dichtheidsstroming, worden veroorzaakt of beïnvloed door een tweetal mechanismen, te weten:

- *Diffusie*, dit is een universeel proces op moleculaire schaal dat zeer effectief is over kleine afstanden (enkele millimeters) maar bijzonder traag over grotere afstand (enkele meters).
- *Dispersie*, optredend in *stromend* water en veroorzaakt door de aanwezigheid van de vaste fase van het poreuze medium.

Deze verschijnselen worden in paragraaf 4.2 en 4.3 nader toegelicht

4.1.2 De water- en zoutbalans van een volledig gemengd reservoir

Figuur 4.1-1 is een schematische voorstelling van een volledig gemengd reservoir met een constant volume (open) water V en een doorstromend debiet Q ($Q_{\text{in}} = Q_{\text{uit}}$). De concentratie van de instroom is c_i en van de uitstroom c_u , bij volledige menging is de laatste gelijk aan de concentratie in het reservoir c .



Figuur 4.1-1 Strooming door een goed gemengd reservoir.

Als we aannemen dat bij geringe concentraties het volume van de oplossing niet afhankelijk is van de hoeveelheid opgeloste stof, wordt de *waterbalans* triviaal: $Q_i - Q_u = \text{nul}$. Het continuïteitsprincipe toegepast op de massa opgeloste stof levert:

$$Q(c_i - c_u) = \frac{dVc}{dt} \quad (4.1-1)$$

waarin c_i en c_u de concentraties zijn van het instromende en uitstromende debiet en t de tijd.

De differentiaalvergelijking (4.1-1) is lineair en van de eerste orde: de oplossing verloopt het eenvoudigst door de variabelen te scheiden. Een andere mogelijkheid is te vermenigvuldigen met een 'integrerende factor' (zie bijlage II).

$$Q dt = \frac{V dc}{(c_i - c)} = - V d \ln(c_i - c) \quad (4.1-2)$$

hieruit volgt:

$$c_i - c = e^{-(Qt/V + \text{constante})} \quad (4.1-3)$$

De constante kan worden gevonden met behulp van de beginvoorwaarde $t = 0, c = c_0$:

$$c_i - c_0 = e^{-\text{constante}} \quad (4.1-4)$$

zodat:

$$\text{constante} = - \ln (c_i - c_0) \quad (4.1-5)$$

Het quotiënt $\frac{V}{Q}$ is gelijk aan *de gemiddelde verblijftijd* T in het reservoir. Bij complete menging is

er echter een aanzienlijke spreiding in de verblijftijden van de afzonderlijke waterdeeltjes: sommige waterdeeltjes verlaten het stelsel na korte tijd andere blijven er lange tijd in rond zweven voordat ze worden afgevoerd.

Uit (4.1-3) en (4.1-4) volgt nu:

$$\frac{Q t}{V} = \frac{t}{T} = \ln \frac{(c_i - c_0)}{(c_i - c)} \quad (4.1-6)$$

en

$$c = c_i - (c_i - c_0) e^{-t/T} \quad (4.1-7)$$

of:

$$c = c_0 e^{-t/T} + c_i(1 - e^{-t/T}) \quad (4.1-8)$$

Men kan hieruit concluderen:

$e^{-t/T}$ is het aandeel aan oorspronkelijk water in het effluent

$1 - e^{-t/T}$ is het aandeel aan ingevoerd water in het effluent

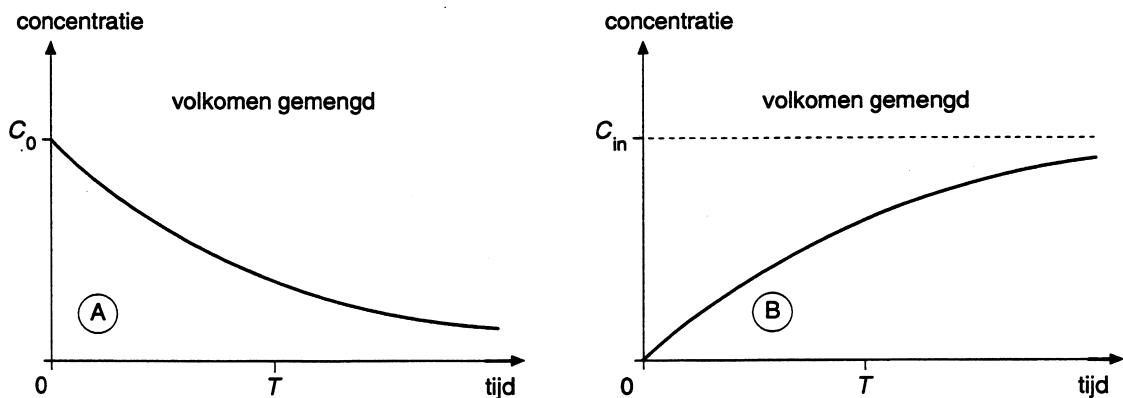
Als het systeem aanvankelijk zout is (concentratie c_0) en na $t=0$ doorstroomd wordt met zoet water ($c=0$), (ontzilting) dan geldt voor het effluent:

$$c = c_0 e^{-t/T} \quad (4.1-9)$$

Bij verzilting (invoer van zout water na $t=0$, met concentratie c_i) geldt:

$$c = c_i (1 - e^{-t/T}) \quad (4.1-10)$$

Het verloop van de concentratie is geschetst in de figuur 4.1-2. Door de goede menging is de concentratie van het effluent gelijk aan de concentratie in het systeem zelf.



Figuur 4.1-2 Ontzilting en verzilting van een goed gemengd reservoir.

Hoewel het proces geheel verschillend is, komen deze formules overeen met die van de kwaliteit van opgepompt grondwater bij diffuse verontreiniging (zie paragraaf 3.4).

De bovenstaande methode werd in 1932 gebruikt om de afname van het chloridegehalte van het toenmalige IJsselmeer te voorspellen ná het gereedkomen van de Afsluitdijk. Omdat de in- en uitstroming van het IJsselmeer niet constant zijn en uit verschillende componenten bestaan, werd de berekening stapsgewijs uitgevoerd voor tijdstappen van één maand.

Mengingsprocessen in open water worden in dit dictaat niet verder behandeld.

4.2 Diffusie

Zeer kleine opgeloste of zwevende deeltjes zijn in voortdurende beweging, de zogenaamde 'Brownse'- of warmtebeweging. Einstein was de eerste, die voor dit verschijnsel een bevredigende verklaring gaf¹⁾. In gassen en in vloeistoffen resulteert deze beweging in diffusie.

De belangrijkste overwegingen van Einstein's verklaring zijn:

1. De beweging wordt veroorzaakt door een zeer grote frequentie van botsingen van een deeltje met bewegende vloeistofmoleculen.
2. De beweging van die moleculen hangt af van de temperatuur en is zo gecompliceerd, dat het effect op de deeltjes alleen in termen van waarschijnlijkheid kan worden beschreven. De beweging wordt door het toeval bepaald en kan als een 'stochastische wandeling' worden beschouwd.

Als er tussen twee punten een verschil is in concentratie, dan is het aantal deeltjes dat van de hoge naar de lage concentratie gaat groter dan omgekeerd, omdat voor het eerste proces de waarschijnlijkheid groter is. Met andere woorden: het netto transport is evenredig met de (richtings)afgeleide van de concentratie. We kunnen dus schrijven (zie ook paragraaf 1.6-1):

$$J_{\text{diff}} = - D_d \nabla c \quad (4.2-1)$$

waarin:

J_{diff}	= massa fluxdichtheid ten gevolge van diffusie	(kg m ⁻² s ⁻¹)
D_d	= diffusiecoëfficiënt in water	(m ² s ⁻¹)
c	= concentratie	(kg m ⁻³)
∇c	= concentratiegradiënt	(kg m ⁻⁴)

Vergelijking (4.2-1) staat bekend als de wet van Fick. De wet van Fick volgt een gemeenschappelijk grondpatroon voor het transport van massa, impuls en warmte, waarbij de laatste twee door de wetten van Newton en Fourier worden beschreven. Bij constante dichtheid (ρ)

¹⁾ De Brownse beweging is genoemd naar de Britse plantkundige Robert Brown die in 1827 het gedrag van stuifmeelkorrels in een waterige oplossing onderzocht en daarover publiceerde. Hij dacht eerst dat het een vorm van leven was, maar al spoedig bleek dat ook anorganische deeltjes hetzelfde verschijnsel vertonen. Eerst in 1905, nadat door natuurkundigen over de kinetische energie van deeltjes van moleculaire omvang was nagedacht, werd door Einstein een verklaring gegeven van het verschijnsel (Gardiner, 1990). Overigens dateert de eerste waarneming van Brownse beweging uit 1785, toen de Nederlandse arts Jan Ingenhousz het gedrag van poederkool op een alcohol oppervlak beschreef.

en soortelijke warmte (C_p) kunnen zij worden samengevat tot:

$$\text{fluxdichtheid (van een eigenschap)} = - \text{vereffeningscoëfficiënt} \times \text{concentratiegradiënt (van de eigenschap)}$$

Het minteken geeft aan, dat de stroming verloopt in een richting tegengesteld aan de richting waarin de concentratie toeneemt.

Voor diffusie in de bodem, die alleen in de x -richting verloopt, geldt:

waarin:

$$J_{\text{diff}} = - n D_d^* \frac{\partial c}{\partial x} \quad (4.2-2)$$

waarin:

$$n = \text{poriënfractie} \quad (-)$$

$$D_d^* = \text{diffusiecoëfficiënt in de poriën} \quad (\text{m}^2 \text{ s}^{-1})$$

Voor NaCl in water geldt $D_d = 1.52 \text{ E-9 m}^2\text{s}^{-1}$

Voor NaCl in grond geldt $D_d^* \approx 0.57 \text{ E-9 m}^2\text{s}^{-1} = .018 \text{ m}^2\text{j}^{-1}$

In grond is D_d^* lager omdat de poriën gekronkeld zijn, met andere woorden: $D_d^* = \tau D_d$. De verschillen tussen de verschillende grondsoorten (zand, klei etc.) zijn gering, omdat D_d^* niet afhankelijk is van de grootte van de poriën, maar van de kronkelfactor die veel minder van de grondsoort afhangt.

Indien diffusie het enige transportmechanisme is, levert het continuïteitsbeginsel toegepast op de opgeloste stof (zie paragraaf 3.2):

$$-\nabla \cdot J = \frac{\partial nc}{\partial t} \quad (4.2-3)$$

Combinatie met de fluxvergelijking voor diffusie in één richting geeft dan met *onveranderlijke* n :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_d^* \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (4.2-4)$$

De diffusie uit een zoute grond naar bovenstaand zoet water kan nu worden berekend door de diffusievergelijking (4.2-4) op te lossen met de bijbehorende randvoorwaarden:

De randvoorwaarden zijn:

$$\begin{aligned} c &= c_0 \quad x > 0 \quad t = 0 \quad \text{begin-voorwaarde} \\ c &= 0 \quad x = 0 \quad t > 0 \quad \text{bij grensvlak} \\ c &= c_0 \quad x \rightarrow \infty \quad t \rightarrow \infty \quad \text{concentratie eindig op grote diepte} \\ c &= 0 \quad x \text{ eindig} \quad t \rightarrow \infty \quad \text{na lange tijd wordt concentratie nul} \end{aligned}$$

De oplossing (zie bijlage III) is:

$$c = c_0 \operatorname{erf} m \quad (4.2-5)$$

waarin:

$$\begin{aligned} c &= \text{concentratie in bodemvocht} & (\text{kg m}^{-3}) \\ c_0 &= \text{beginconcentratie} & (\text{kg m}^{-3}) \\ m &= x/2\sqrt{D_d^* t} \\ x &= \text{afstand tot zoet water} & (\text{m}) \\ t &= \text{tijd} & (\text{jaar}) \\ D_d^* &= \text{diffusiecoëfficiënt in de bodem} & (\text{m}^2 \text{j}^{-1}) \end{aligned}$$

en:

$$\operatorname{erf} m = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^m e^{-\xi^2} d\xi$$

De benaming 'error function', erf m , komt uit de statistiek, waar de standaard normale kansverdeling wordt beschreven door bovenstaande integraal van $-\infty$ tot $+\infty$. Wij zullen deze nog herhaaldelijk tegenkomen. Omdat de integraal niet in analytische functies kan worden

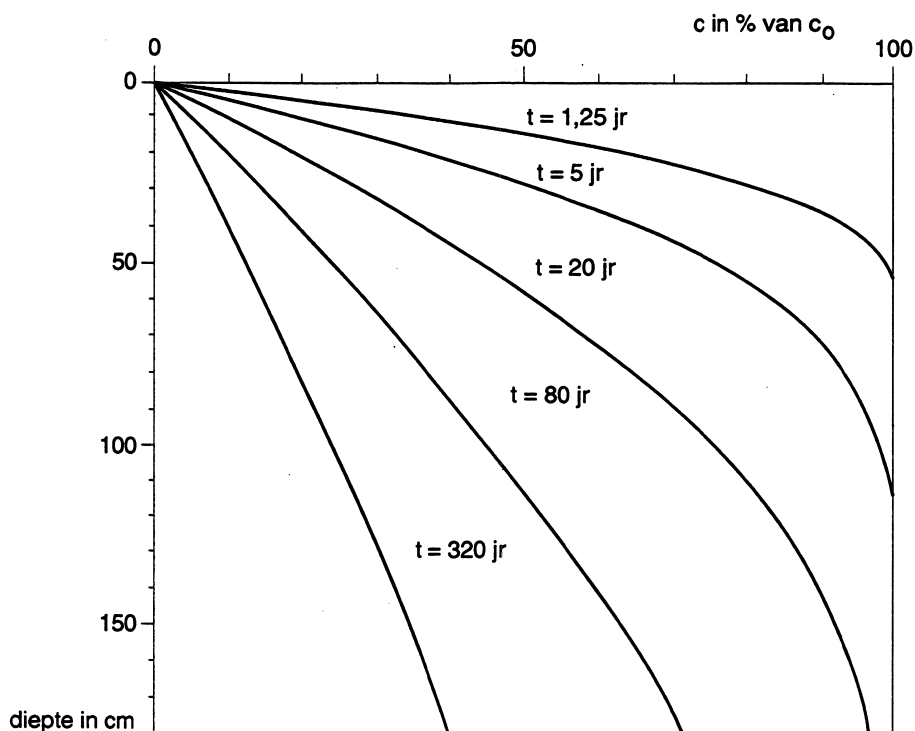
uitgedrukt, moeten we gebruik maken van tabellen of voorgeprogrammeerde rekenmachines¹⁾.

Behalve deze error functions gebruikt men eveneens veelvuldig de functie 'error function complement', $\text{erfc } m$:

$$\text{erfc } m = 1 - \text{erf } m = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_m^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi \quad (4.2-6)$$

Voor de ontzilting van een zoute, met water verzadigde bodem door diffusie naar bovenstaand zoet water, zie figuur 4.2-1. Voor dit proces is het nodig dat het bovenstaande water voortdurend wordt verversd, zodat het niet verzilt. De ontzilting van de bodem van het IJsselmeer (zoet geworden in 1933) komt goed overeen met deze theoretische curven.

Een dergelijk proces doet zich ook voor bij de verbouw van rijst op zoute gronden. Bij voldoende verversing van het water kan een goede oogst worden verkregen, maar de ontzilting van de bodem verloopt slechts uiterst langzaam.



Figuur 4.2-1 Theoretische ontziltingscurven voor een meerbodern, waarbij de oorspronkelijke concentratie c_0 van het bovenstaande water nul wordt op $t=0$.

¹⁾ Voor tabellen zie Abramowitz-Stegun, Handbook of Mathematical Functions, Tab. 7.1.

De verhouding $x/\sqrt{t}$ is van groot belang. Voor waarden van x en t waarbij deze verhouding constant is geldt dat deze dezelfde m opleveren en daardoor ook dezelfde concentratie c .

Geeft dus het proces een bepaalde concentratie c op een diepte x na 1 jaar, dan wordt dezelfde concentratie c op een diepte $2x$ eerst na 4 jaar gevonden, op een diepte $3x$ na 9 jaar etc. Het diffusieproces verloopt dus snel over kleine afstanden (enkele cm), maar zeer langzaam over afstanden van 1 m of meer.

De Wieringermeer is drooggevalen in 1930 toen het IJsselmeer nog Zuiderzee was en dus zout water bevatte. Aanvankelijk traden er dan ook zoutproblemen op, in de Noordoostpolder (1940) waren deze problemen nog slechts van beperkte omvang en in de Flevopolder traden zij niet meer op.

Voorbeeld (Figuur 4.2-1): De concentratie $\frac{1}{2}c_0$ wordt na 5 jaar op een diepte van 0.20 m bereikt, na 20 jaar op 0.40 m en na 80 jaar op 0.80 m diepte.

In kleine poriën in de grond (200 μm en kleiner) brengt de diffusie een zeer snelle menging van verschillende watersoorten teweeg.

Binnen enkele seconden worden verschillen in concentratie vrijwel volledig uitgewist (zie Tabel 4.2-1). Bij lage fluxdichtheden van stromend grondwater is de verblijftijd van het passerende water al spoedig groter dan de 'mengtijd' (in Tabel 4.2-1, onder de stippellijn) en is dus deze menging zeer effectief. Dit komt in de praktijk algemeen voor.

Bij langzame stroming van grondwater wordt dus in de poriën het water door diffusie zeer doeltreffend gemengd. Dit is van belang bij de nader te bespreken *dispersie*.

Tabel 4.2-1 Tijden, nodig voor 90% menging van twee watersoorten in een porie, in vergelijking met de verblijftijden¹⁾.

afmeting porie	mm	2	0.2	0.1	
mengtijd (90% menging)	s	670	6.8	1.67	
verblijftijd $v = 1.00$ $v_e = 3.00 \text{ m d}^{-1}$		58	5.8	2.9	
bij poriën $v = 0.10$ $v_e = 0.30 \text{ m d}^{-1}$	s	580	58	29	verblijftijd groter dan mengtijd
fractie 1/3 $v = 0.01$ $v_e = 0.03 \text{ m d}^{-1}$	s	5800	580	290	

v : fluxdichtheid, v_e : stroomsnelheid in poriën.

¹⁾ Zie Van Ommen en Van der Molen, 1988, bijlage 2.

4.3 Dispersie

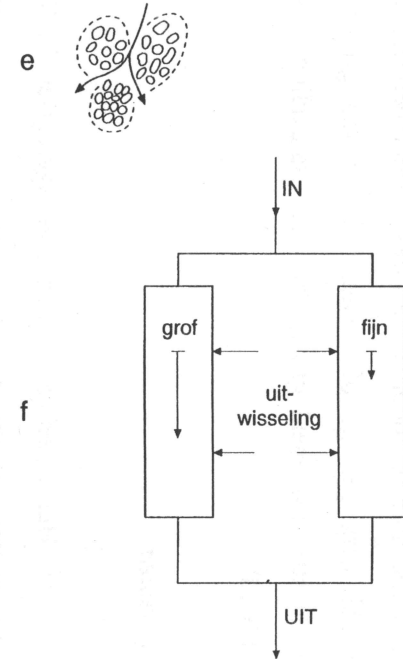
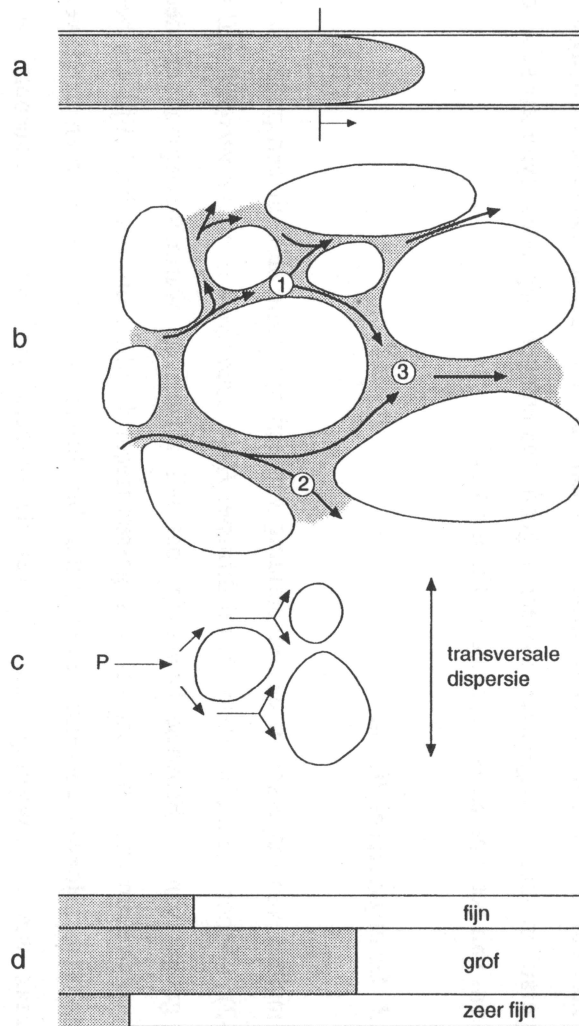
4.3.1 Dispersie in enkelvoudige systemen

Grondwaterstroming is als regel laminair en gehoorzaamt aan de wet van Darcy. Daaruit zou men in eerste instantie kunnen concluderen dat alle deeltjes zich langs voorspelbare lijnen voortbewegen, zoals bij convectief transport. Maar de wet van Darcy is een macroscopische wet die alleen geldt voor afmetingen welke vele malen groter zijn dan de afmetingen van korrels en poriën. Op microscopische schaal is het gedrag van individuele water- en stofdeeltjes niet met deze wet te beschrijven. Daarvoor is het nodig de Navier-Stokes vergelijking op te lossen. Zoals in paragraaf 1.7 werd besproken is dat echter onmogelijk, omdat in een poreus medium de randvoorwaarden op microscopische schaal onbekend zijn. Zouden we er wel in slagen, dan zou blijken dat er afwijkingen optreden ten opzichte van de stroomlijnen volgens Darcy. Deze verspreiding van deeltjes wordt de dispersie genoemd. De verspreiding treedt op zowel in de stroomrichting als in de richting loodrecht daarop (longitudinale en transversale dispersie).

Enkele oorzaken van dispersie zijn:

- Door wrijving en viscositeit is in het midden van een porie de stroomsnelheid groter dan nabij de wand. Een verontreiniging zal zich dus met ongelijke snelheid verplaatsen (dit geldt algemeen, dus ook voor de stroming door een enkele, rechte capillair, zie Figuur 4.3-1a);
- In grote poriën zal de stroomsnelheid bij eenzelfde stijghoogtegradiënt groter zijn dan in kleinere;
- In een korrelig medium als grond komen de poriën na het passeren van een korrel weer met elkaar in contact. Op deze plaatsen vindt uitwisseling plaats tussen verschillende (snellere en langzamer) waterstromen. Wij hebben al gezien dat deze uitwisseling (door diffusie) een zeer effectief proces is (Figuur 4.3-1b);
- Als de waterstroming een korrel ontmoet, dan moet zij zijdelings uitwijken. Bij elke korrel treedt dus een afwijking in richting op die door het toeval wordt bepaald. Deze zijdelingse afwijkingen geven aanleiding tot het optreden van transversale dispersie (Figuur 4.3-1c). Hierdoor zal een puntbron (bijvoorbeeld een kleine vuilstort) in benedenstroomse richting een 'pluim' van verontreiniging veroorzaken. Loodrecht op de stroomrichting komt een concentratieverdeling tot stand, die gehoorzaamt aan een tweedimensionale kansverdeling van Gauss (normale kansverdeling). In benedenstroomse richting wordt deze concentratieverdeling steeds breder en vlakker (Figuur 4.3-2).

Figuur 4.3-1 Mechanismen van dispersie



- a Dispersie in een rechte capillair (parabolische snelheidsverdeling).
- b Dispersie door snelle en langzame stroming in poriën, gevolgd door vermenging.
- c Transversale dispersie van verontreiniging uit een puntbron P.
- d Dispersie in een gelaagd zand.
- e Geaggregeerde grond met stroming tussen de aggregaten.
- f Schema van een twee-fasensysteem met grove en fijne poriën.

Op macroscopische schaal treedt ook dispersie op, doordat de meeste watervoerende lagen verre van homogeen zijn. Zij zijn meestal sterk gelaagd of bevatten lenzen van grover en fijner materiaal. In de grovere zones is de stroomsnelheid groter, dit geeft aanleiding tot de eerder genoemde macrodispersie (Figuur 4.3-1d).

4.3.2 *Dispersie in samengestelde systemen*

In veel gronden komen aggregaten voor. Het water dat binnen deze aggregaten in fijne poriën voorkomt, stroomt slechts zeer langzaam ten opzichte van de waterbeweging in de veel grotere poriën tussen de aggregaten.

In het uiterste geval zijn er in de bodem twee systemen aanwezig:

- de aggregaten met poriën waarin de waterbeweging te verwaarlozen is;
- een systeem van grotere poriën (scheuren, gangen) tussen deze aggregaten.

Binnen de aggregaten is dan een stagnante fase aanwezig die door diffusie opgeloste stoffen uitwisselt met de stromende fase in de grotere poriën (Figuur 4.3-1e).

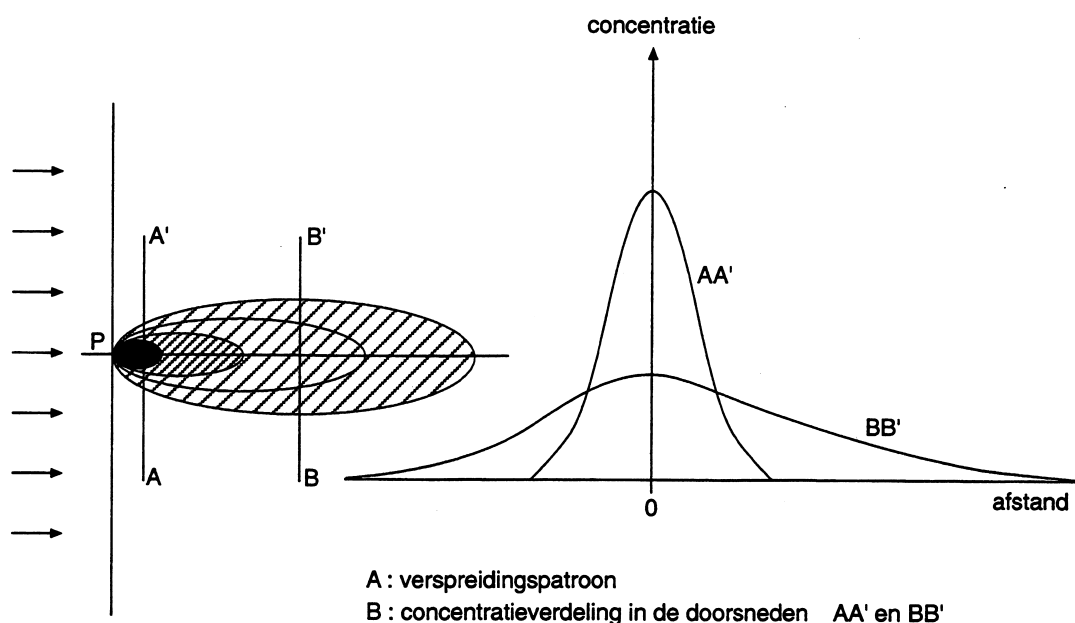
In minder uitgesproken gevallen zijn er twee parallel lopende systemen, elk met een eigen verblijftijd en al dan niet onderling stoffen uitwisselend (Figuur 4.3-1f).

Dergelijke samengestelde systemen geven in de regel aanleiding tot niet-symmetrische doorbraakcurven: de 'verdreven' vloeistof verdwijnt bij de doorbraak aanvankelijk snel, maar blijft daarna nog zeer lang in het effluent aantoonbaar, door nalevering uit de stagnante of vertraagde fase.

Dispersie in niet-samengestelde systemen geeft daarentegen nagenoeg symmetrische doorbraakcurven, van het type zoals afgebeeld in Figuur 4.3-2.

4.3.3 *De dispersiecoëfficiënt*

De invloed van dispersie op de verspreiding van een opgeloste stof uit een puntbron (zie figuur 4.3-2), vertoont hetzelfde beeld als bij diffusie. *Het mechanisme is echter verschillend!* Diffusie is het gevolg van de Brownse beweging, dat wil zeggen de warmtebeweging van deeltjes van moleculaire omvang. In vloeistoffen en gassen treedt dit altijd op, onafhankelijk van het feit of er stroming is. Hoewel concentratieverschillen bij diffusie niet kunnen worden aangewezen als de oorzaak van de beweging, zijn zij wél de oorzaak van het netto transport, waardoor de concentratiegradiënt als 'de drijvende kracht' verschijnt in de wet van Fick.



Figuur 4.3-2 Verspreiding van verontreiniging uit een constante puntbron P door stroming en dispersie (schematisch).

In tegenstelling tot diffusie is dispersie geen autonoom proces, omdat het afhankelijk is van de aanwezigheid van een vaste fase in de vloeistofstroming: *zonder stroming is er geen dispersie*. We willen nu de dispersieve flux beschrijven in termen van macroscopische gemiddelde grootheden (zie paragraaf 1.7).

Hoewel er geen direct verband kan worden gelegd tussen 'een drijvende kracht' en de verspreiding, vertoont het netto effect van dispersie zeer veel overeenkomst met diffusie. Alleen zijn de afstanden, waarover de verspreiding plaatsvindt binnen een tijdstap Δt , bij dispersie vele malen groter dan bij diffusie. Vanwege de analogie neemt men aan dat dispersie ook kan worden beschreven met een 'Fickiaanse' vergelijking. Met andere woorden: als functie van de concentratiegradiënt en een coëfficiënt D (in $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ of $\text{m}^2 \text{j}^{-1}$).

$$J_{\text{disp}} = -nD \nabla c$$

(4.3-1)

De dispersiecoëfficiënt is veel groter dan de diffusiecoëfficiënt en zoals blijkt uit de beschrijving van dispersiemechanisme, ook afhankelijk van de vloeistofsnelheid v_e . Daardoor ook is D in de lengterichting enkele malen groter dan in de dwarsrichting (gerekend ten opzichte van de algemene stroomrichting).

Men onderscheidt daarom:

- een longitudinale dispersiecoëfficiënt, D_L ;
- een transversale dispersiecoëfficiënt, D_T .

Beide blijken nagenoeg evenredig te zijn met de stroomsnelheid in de poriën, v_e .

Wij kunnen schrijven:

$$\begin{aligned} D_L &= (\lambda + 2\mu) v_e = \alpha_L v_e \\ D_T &= \lambda v_e = \alpha_T v_e \end{aligned} \quad (4.3-2)$$

waarin λ en μ constanten zijn, die overeenkomen met de afmetingen van de onregelmatigheden welke de dispersie veroorzaken.

De grootheden $\alpha_L = D_L/v_e$ en $\alpha_T = D_T/v_e$ hebben de dimensie lengte. Deze *karakteristieke dispersielengtes* ook wel dispersiviteit genoemd (longitudinaal en transversaal) zijn een maat voor de afstand, waarover het proces van dispersie actief is. Deze lengten kunnen goed worden gebruikt om de wiskundige beschrijving van het gecombineerde proces van dispersie en transport aanzienlijk te vereenvoudigen (zie paragraaf 4.6). In de literatuur worden fluxdichtheid (bij ons v) en poriesnelheid (bij ons v_e) door elkaar gebruikt. Bij de eerste behoort een dispersiecoëfficiënt $D_L^* = n_e D_L$, bij de effectieve snelheid behoort D_L . Let daarom goed op wat de auteur bedoelt! Wel is het zo dat de karakteristieke lengte (dispersiviteit) α_L , in beide gevallen gelijk is:

$$\alpha_L = \frac{D_L}{v_e} = \frac{n_e D_L}{n_e v_e} = \frac{D_L^*}{v}$$

Het is daarom beter α_L te gebruiken als maat voor de dispersie. Het blijkt dat $2\alpha_L$ een goede maat is voor de afstand waarop de dispersie een vrij intensieve menging teweeg brengt.

- in goed gepakte zandkolommen in het lab is $2\alpha_L$ van de orde 1 mm;
- in de onverzadigde zone van de bodem is $2\alpha_L$ van de orde 0.1 m;
- in aquifers is $2\alpha_L$ van de orde 1 à 10 m.

De invloed van dispersie is in de regel veel groter dan van moleculaire diffusie:

$$D_L > D_T > D_d$$

Alleen bij zeer lage stroomsnelheden gaat diffusie overheersen. Een aanwijzing hiervoor geeft het *getal van Pécler*:

$$Pe = \frac{v_e L}{D_d^*} \quad (4.3-3)$$

waarin:

- v_e = effectieve snelheid (ms⁻¹ of mj⁻¹)
 L = karakteristieke afmeting van onregelmatigheden (m)
 D_d^* = moleculaire diffusiecoëfficiënt in een poreus medium (m²s⁻¹ of m²j⁻¹)

Als $Pe < 1$ dan overheerst de diffusie, voor $Pe > 1$ de dispersie.

Voorbeelden:

- zand met korrels van 0.1 mm (10⁻⁴ m) en $v_e = 40 \text{ mj}^{-1}$
 $D_d^* = 0.018 \text{ m}^2 \text{ j}^{-1}$. Bij $L = 1 \text{ E-4}$ wordt $Pe = 0.22$, waarbij diffusie overheerst.
- zand met onregelmatigheden (lenzen) op afstand van 1 m, $D = 0.018 \text{ m}^2 \text{ j}^{-1}$, $v_e = 0.40 \text{ m j}^{-1}$
 geeft $Pe = 22$, zodat de dispersie overheerst.

Opgave 4.3.1. Treedt dispersie ook op bij waterdeeltjes? Zo ja, waarom hoeft men er geen rekening mee te houden?

4.4 Beweging van niet-conservatieve stoffen

4.4.1 Adsorptie en ionen-uitwisseling

De vaste fase van de bodem bevat negatief geladen colloïden, vooral kleideeltjes en organische stof. Deze negatieve lading wordt geneutraliseerd door de aanwezigheid van een overschot aan kationen in de bodem (Bolt en Bruggenwert, 1978). We spreken van een adsorptieve binding tussen de kationen en de vaste fase. Geadsorbeerde kationen kunnen echter worden vervangen door andere kationen, dit wordt omwisseling genoemd. In het algemeen zijn de omwisselingsreacties reversibel en wordt een evenwichtstoestand bereikt, waarbij de verhouding van de geadsorbeerde ionen een functie is van de verhouding van de ionen in het bodemwater. Het verband tussen de verhouding geadsorbeerde ionen en de verhouding ionen in oplossing wordt bepaald door de relatieve preferentie van de vaste fase voor de verschillende ionen. Hierbij spelen de waardigheid en de grootte van de ionen een rol. Voorts blijkt er een specifieke voorkeur te zijn van bepaalde kleimineralen voor bepaalde ionen, bijvoorbeeld van illiet voor K en van organische

stof voor Ca. Een stof waarvan de concentratie in het bodemwater verandert door adsorptie en/of chemische reacties noemen we een niet-conservatieve stof.

Wij veronderstellen eerst dat genoemde processen zo snel verlopen, dat er in de grond steeds evenwicht heerst tussen geadsorbeerde ionen en ionen in oplossing.

Het aantal kg geadsorbeerde stof per kg vaste fase noemen we s . Het quotiënt van het aantal kg geadsorbeerde stof per kg vaste fase en het aantal kg in oplossing per m^3 water, wordt *de distributie- of verdelingscoëfficiënt* K_d genoemd¹⁾. Hieruit volgt:

$$s = K_d c \quad (4.4-1)$$

De eenheden van K_d zijn: $\text{m}^3(\text{water})$ per kg (vaste fase).

Vergelijking (4.4-1) beschrijft een adsorptie-isotherm. In de literatuur treft men een groot aantal, voornamelijk empirische vergelijkingen aan, al naar gelang de eigenschappen van de te adsorberen stof, de eigenschappen van het adsorptieoppervlak en de zuurgraad (Bear en Verruijt, 1987; Bolt en Bruggenwert, 1978, Keizer en Van Riemsdijk, 1997).

Vergelijking (4.4-1) kan worden beschouwd als een bijzondere vorm van de Freundlich isotherm:

$$s = k_1 c^{k_2} \quad (4.4-2)$$

met $k_1 = K_d$ en $k_2 = 1$. k_1 is de Freundlich adsorptie constante voor een stof, k_2 is een coëfficiënt

Een andere bekende vorm van de adsorptie isotherm is de Langmuir vergelijking:

$$s = \frac{k_3 c}{1 + k_4 c} \quad (4.4-3)$$

De *distributiefactor* f_d ²⁾ is gelijk aan:

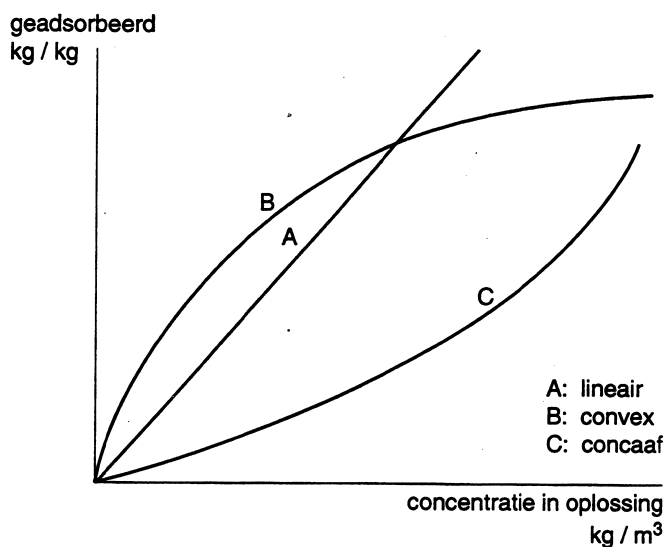
$$f_d = \frac{\text{kg geadsorbeerde stof}}{\text{kg stof in oplossing}}$$

¹⁾ De massa van de stof wordt in dit dictaat uitgedrukt in kg, in de literatuur vindt men vaak de mol als massa eenheid.

²⁾ Let op: in de literatuur bestaat verwarring over de definities van de distributiecoëfficiënt en de distributiefactor.

Voor de isotherm bestaan verschillende vormen (Figuur 4.4-1).

- *lineair*: de geadsorbeerde hoeveelheid is evenredig met de concentratie in de oplossing (K_d is een constante coëfficiënt, maar in veel gevallen wel pH afhankelijk, voorbeelden zijn cadmium en benzeen);
- *convex*: bij lage concentratie wordt relatief veel geadsorbeerd, bij hogere concentraties wordt de adsorptie zwakker, voorbeelden zijn fosfaat en koper (de laatste pH afhankelijk);
- *concaaf*: andersom (enkele zware metalen vertonen dit gedrag in de lagere concentratie regionen).



Figuur 4.4-1 Adsorptie isothermen.

Bij lineaire adsorptie geldt dat er altijd eenzelfde fractie van de totale hoeveelheid in oplossing verkeert en dus beweeglijk is, terwijl de rest door adsorptie vastgehouden wordt. Stel dat 1/10 van de deeltjes zich in de oplossing bevindt, de overige 9/10 geadsorbeerd is. Omdat de deeltjes voortdurend van fase wisselen, is één deeltje 9/10 van de tijd onbeweeglijk en 1/10 van de tijd mobiel. Het deeltje loopt daardoor $10\times$ zo langzaam als een deeltje van een conservatieve stof. Indien

$$\alpha = \frac{\text{kg geadsorbeerde stof}}{\text{totaal aantal kg stof (in oplossing + geadsorbeerd)}}$$

en

$$\beta = 1 - \alpha = \frac{\text{kg stof in oplossing}}{\text{totaal aantal kg stof (in oplossing + geadsorbeerd)}}$$

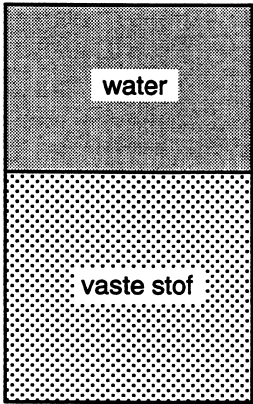
dan is de *vertragingsfactor* R_d ¹⁾

$$R_d = \frac{1}{\beta} = \frac{\text{totaal aantal kg stof (in oplossing + geadsorbeerd)}}{\text{kg stof in oplossing}}$$

Uit het bovenstaande volgt voor de distributiefactor:

$$f_d = \frac{\alpha}{\beta} = \alpha R_d = (1 - \beta) R_d = R_d - 1 \quad (4.4-4)$$

We beschouwen nu een controlevolume (V) van een verzadigde bodem dat bestaat uit het volume van de vaste fase (V_s) plus een volume poriën (V_v); het laatste is tevens gelijk aan het volume vloeistof (V_w) binnen het volume V (zie figuur 4.4-2). De massa van de vaste fase is M_s , de dichtheid ρ_s en de massa van de geadsorbeerde stof m_{ads} .

	volume	fractie	massa van de:	
			fase	stof
	V_w	n	$M_w = \rho_w V_w$	$m_{opl} = c V_w$
	V_s	$1 - n$	$M_s = \rho_s V_s$	$m_{ads} = f_d c V_w$
	V	1	M	m_{tot}

Figuur 4.4-2 Schematische verdeling van vaste- en vloeibare fase.

De relatie tussen K_d en f_d kan worden bepaald door de hoeveelheid geadsorbeerde stof in het controlevolume V te berekenen met behulp van de definities van s en van f_d :

¹⁾ Ook voor R_d vindt men in de literatuur verschillende definities, dus oppassen!

$$m_{ads} = s M_s = f_d c V_v \quad (4.4-5)$$

dus:

$$K_d c M_s = f_d c V_v \quad (4.4-6)$$

en:

$$K_d = f_d \frac{V_v}{M_s} = f_d \frac{V_v}{V_s \rho_s} = \frac{f_d}{\rho_s} \frac{n}{1-n} \quad (4.4-7)$$

In de literatuur wordt de vertragsfactor vaak geschreven als functie van de 'droge bulkdichtheid' ρ_s^b en het watergehalte θ ; ρ_s^b is gedefinieerd als het aantal kg vaste fase per m³ grond. De volumefractie water in een verzadigde grond is n , zodat uit de definitie van de vertragsfactor volgt:

$$R_d = 1 + f_d = 1 + \frac{s M_s}{c V_v} = 1 + \frac{K_d c \rho_s^b V}{c V_v} = 1 + \frac{K_d \rho_s^b}{n} \quad (4.4-8)$$

Omdat $\rho_s^b = (1 - n) \rho_s$, kunnen we de vertragsfactor met behulp van (4.4-7) ook schrijven als:

$$R_d = 1 + \frac{\rho_s K_d (1-n)}{n} \quad (4.4-9)$$

De waarde van de vertragsfactor is dus altijd groter dan 1. Zoals in paragraaf 4.5 blijkt, wordt in de differentiaalvergelijking die het transport beschrijft, de partiële afgeleide van de concentratie naar de tijd vermenigvuldigd met R_d . Dit betekent dat het gehele proces *in geval van lineaire adsorptie* R_d maal zo lang duurt als zonder adsorptie. Dit verklaart ook de naam *vertragsfactor*. Bij een convexe adsorptie-isotherm wordt het front 'scherper' dan zou volgen uit transport en dispersie alleen. De doorbraak van een dergelijke stof valt niet alleen later dan bij een conservatieve stof (door vertraging), maar verloopt ook sneller, dat wil zeggen dat de maximum concentratie in kortere tijd wordt bereikt. Op dit beginsel berust bijvoorbeeld de scheiding van componenten bij de chromatografie.

Bij een concave adsorptie-isotherm wordt het front juist vager en is de doorbraak nog geleidelijker dan bij een conservatieve stof. Voor chromatografische scheiding is dit zeer ongunstig.

In deze beide gevallen van niet-lineaire adsorptie kan men het beste een numerieke methode gebruiken voor berekening. Numerieke oplossingen worden besproken in hoofdstuk 5.

4.4.2 Afbraak door chemische en biologische omzetting

Wij behandelen hier alleen de afbraak volgens een eerste-orde proces.

Dit betekent dat de hoeveelheid stof die per tijdseenheid wordt afgebroken een lineaire functie is van de aanwezige hoeveelheid. Voor een reservoir waarin de concentratie c is geldt:

$$\frac{dc}{dt} = -\mu c \quad (4.4-10)$$

waarin μ de afbraakconstante (d^{-1}) is, dat is het aantal kg stof dat per tijdseenheid wordt afgebroken per aanwezige kg.

Als de betreffende stof niet wordt geadsorbeerd vinden we na integratie van (4.4-10):

$$c(t) = c_0 e^{-\mu t} \quad (4.4-11)$$

Bij convectief transport in een systeem met *constante reistijd* T (transport in een kolom, stroming van water naar een put in het midden van een rond eiland) geldt dan, dat op het tijdstip T niet het water met invoerconcentratie c_{in} doorbreekt, maar water met concentratie

$$c = c_{in} e^{-\mu T} \quad (4.4-12)$$

Een toepassing hiervan is de infiltratie van voorgezuiverd rivierwater in de duinen ten behoeve van de drinkwatervoorziening in West-Nederland. Na een verblijftijd van enkele weken tot enkele maanden wordt het opgepompt; in deze tijd zijn allerlei ongewenste bestanddelen door afbraakprocessen sterk in concentratie verminderd.

In systemen met ongelijke reistijd en convectief transport (bijvoorbeeld een put nabij een kanaal, paragraaf 3.3) kan voor elke stroomlijn q , met reistijd t_q , de correctie voor afbraak in rekening worden gebracht:

$$c_q = c_m e^{-\mu t_q} \quad (4.4-13)$$

Door over alle stroomlijnen te middelen verkrijgen we dan de verwachte samenstelling van het uitstromende water. De berekening geschiedt het eenvoudigst door q in klassen in te delen en de middelste stroomlijn van elke klasse als vertegenwoordiger te kiezen.

In het geval van tabel 3.3-1 voor een put nabij een recht kanaal geldt tabel 4.4-1.

Tabel 4.4-1 Stroming van water van een recht kanaal naar een winput; gedrag van een langzame afbreekbare verontreiniging.

$$n_e=0.25 \quad D=4 \text{ m} \quad a=10 \text{ m} \quad Q=100 \text{ m}^3\text{d}^{-1} \quad c_m=10 \text{ g m}^{-3} \quad \mu=0.1 \text{ d}^{-1}$$

q -klasse (%)	vertegenwoordigd door stroomlijn q (%)	reistijd t_q (d)	concentratie in effluent c_q (g m ⁻³)
0-10; 90-100	5;95	638.4	0.00
10-20; 80- 90	15;85	24.94	0.83
20-30; 70- 80	25;75	6.28	5.34
30-40; 60- 70	35;65	3.026	7.39
40-50; 50- 60	45;55	2.179	<u>8.04</u>
			<u>4.32</u>

In het opgepompte water mag dus een concentratie van 4.32 g m⁻³ (mg l⁻¹) worden verwacht.

In een goed gemengd reservoir treedt een sterke spreiding van de verblijftijden op. Sommige opgeloste deeltjes zullen zeer spoedig ontsnappen, andere blijven geruime tijd in het reservoir. De eerstgenoemde zijn dus niet aan afbraak onderhevig geweest, terwijl laatstgenoemde grotendeels verdwenen zullen zijn. Is er afbraak in een dergelijk reservoir, volgens een eerste-orde proces, dan luidt de differentiaalvergelijking (vergelijk paragraaf 4.1 en bijlage II).

$$\frac{dc}{dt} + \frac{1}{T} c = \frac{c_m}{T} - \mu c \quad (4.4-14)$$

waarin de laatste term de invloed van de omzettingen weergeeft.

De oplossing geschiedt via de integrerende factor, in dit geval:

$$e^{t \left(\frac{1}{T} + \mu \right)}$$

Invoering van de begin-voorwaarde $t = 0$, $c = c_0$ leidt tenslotte tot de oplossing voor een reservoir met een aan verval onderhevige stof:

$$c = \frac{c_{in}}{1 + \mu T} [1 - e^{-\kappa(1+\mu T)/T}] + c_0 e^{-\kappa(1+\mu T)/T} \quad (4.4-15)$$

Voor $\mu = 0$ (geen afbraak) hebben we te maken met een conservatieve stof en gaat (4.4-15) over in (4.1-7).

Is een stof onderhevig aan omzetting volgens een eerste-orde proces én aan (lineaire) adsorptie, dan is het denkbaar dat de snelheid van de afbraak in de opgeloste fase verschilt van die in de geadsorbeerde toestand (omzettingsconstanten respectievelijk μ_{opl} en μ_{ads}).

Bij lineaire adsorptie verkeert een deeltje R_d maal zo lang in de geadsorbeerde toestand als in de vloeibare fase. De gemiddelde afbraakconstante is gelijk aan:

$$\mu_{gem} = \frac{\text{totale afbraak (kg) per tijdseenheid}}{\text{totale massa stof (kg)}} = \frac{a_{tot}}{m_{tot}} \quad (4.4-16)$$

De totale afbraak is de som van de afbraak in oplossing en afbraak van de geadsorbeerde stof.

$$\mu_{gem} = \frac{a_{opl} + a_{ads}}{m_{opl} + m_{ads}} = \frac{\mu_{opl} c V_v + \mu_{ads} f_d c V_v}{c V_v + f_d c V_v} \quad (4.4-17)$$

$$\mu_{gem} = \frac{\mu_{opl} + \mu_{ads} f_d}{1 + f_d} \quad (4.4-18)$$

of in termen van de vertragingfactor:

$$\mu_{gem} = \frac{\mu_{opl} + \mu_{ads} (R_d - 1)}{R_d} \quad (4.4-19)$$

4.5.1 Transport met dispersie en diffusie van een conservatieve stof

Om de vergelijking te vinden die de waterstroming beschrijft, hebben we (in paragraaf 2.3) de massabalansvergelijking gecombineerd met de bewegingsvergelijking (Darcy). Het resultaat is een differentiaalvergelijking waarin de stijghoogte H als afhankelijke variabele voorkomt. De differentiaalvergelijking die het transport van een conservatieve stof beschrijft, wordt op eenzelfde manier verkregen, namelijk door combinatie van de massabalansvergelijking en de fluxvergelijking voor de opgeloste stof. Het resultaat is een differentiaalvergelijking waarin de concentratie als afhankelijke variabele voorkomt.

Uit de vergelijkingen (3.2-1), (4.2-1) en (4.3-1) volgt dat de totale massafluxdichtheid gelijk is aan de *vectorsom* van de drie componenten:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_{\text{conv}} + \mathbf{J}_{\text{diff}} + \mathbf{J}_{\text{disp}} \quad (4.5-1)$$

$$\mathbf{J} = \mathbf{v} c - n(D_d^* + D) \nabla c = \mathbf{v} c - n D^h \nabla c \quad (4.5-2)$$

waarin de som van de diffusie- en dispersiecoëfficiënten, bekend staat als de *hydrodynamische dispersiecoëfficiënt* D^h .

Voor de beweging van een conservatieve stof en bij afwezigheid van brontermen, kan de balansvergelijking worden verkregen door minus de divergentie van de fluxdichtheid gelijk te stellen aan de afgeleide naar de tijd van de massa opgeloste stof in een controlevolume (zie paragraaf 2.2):

$$\frac{\partial nc}{\partial t} = - \nabla \cdot \mathbf{J} \quad (4.5-3)$$

Combinatie met vergelijking (4.5-2) geeft dan:

$$\frac{\partial nc}{\partial t} = - \nabla \cdot (\mathbf{v} c - n D^h \cdot \nabla c) \quad (4.5-4)$$

Vergelijking (4.5-4) staat bekend als de convectie-dispersievergelijking.¹⁾ De dispersiecoëfficiënt is in het algemeen een functie van de poriesnelheid, zie vergelijking (4.3-2). Voor *verzadigde stroming, met constante dichtheid en porositeit*, is de divergentie van de fluxdichtheid gelijk aan nul. In die gevallen wordt de vergelijking:

$$n \frac{\partial c}{\partial t} = - v \cdot \nabla c + \nabla \cdot (n D^h \cdot \nabla c) \quad (4.5-5)$$

waarin D^h een tensor is²⁾. Dat wil zeggen dat de waarde van de dispersiecoëfficiënt afhangt van de richting van de snelheidsvector. In de praktijk wordt onderscheid gemaakt tussen de longitudinale en transversale dispersiviteit.

Omdat de dispersiecoëfficiënt evenredig blijkt te zijn met de poriënsnelheid v_e , kan de vergelijking voor een *eendimensionale stroming* ook worden geschreven als:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - v_{ex} \frac{\partial c}{\partial x} + \alpha_L v_e \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (4.5-6)$$

4.5.2 Transport met dispersie en diffusie van een niet-conservatieve stof

Wanneer adsorptie en afbraak een rol spelen moet hiermee rekening gehouden worden bij het opstellen van de massabalans. Minus de divergentie van de fluxdichtheid is nu *niet* gelijk aan de afgeleide naar de tijd van de massa *opgeloste* stof per volume poreus medium, maar gelijk aan de verandering per tijdseenheid van de som van de massa opgeloste- en geadsorbeerde stof per volume poreus medium. Deze laatste hoeveelheden worden beïnvloed door de distributiefactor en de afbraakconstante.

De hoeveelheid massa geadsorbeerde stof in een controlevolume V wordt beschreven door vergelijking (4.4-5). Per volume poreus medium bedraagt de massa geadsorbeerde stof:

$$\frac{m_{ads}}{V} = \frac{s M_s}{V} = f_d c n \quad (4.5-7)$$

1) In de engelstalige literatuur 'the advection-dispersion equation' genoemd. Veel nederlandse auteurs gebruiken daardoor de benaming advection-dispersie vergelijking. Het woord advection komt echter niet voor in het Nederlands woordenboek (van Dale 1989).

2) Het scalair product van een tensor en een vector is een vector.

$\frac{M_s}{V}$ is het aantal kg vaste fase per m³ grond die we eerder *de droge bulkdichtheid* ρ_s^b , hebben

genoemd. Zonder afbraak luidt de massabalans per volume poreus medium:

$$n \frac{\partial c}{\partial t} + \rho_s^b \frac{\partial s}{\partial t} = -\nabla \cdot J \quad (4.5-8)$$

Indien de distributiefactor f_d en de porositeit n constant zijn, kan de massabalans per volume poreus medium voor het geval met lineaire adsorptie (maar zonder afbraak) ook worden geschreven als:

$$n \left(\frac{\partial c}{\partial t} + f_d \frac{\partial c}{\partial t} \right) = -\nabla \cdot J \quad (4.5-9)$$

Invullen van (4.4-9) en (4.5-2) en delen door n geeft vervolgens:

$$R_d \frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot (v_e c - D^h \cdot \nabla c) \quad (4.5-10)$$

Is een stof onderhevig aan lineaire adsorptie én aan omzetting volgens een eerste-orde proces, dan is de totale afbraak in kg per tijdseenheid gelijk aan (zie ook vergelijking (4.4-16)):

$$a_{\text{tot}} = \mu_{\text{gem}} m_{\text{tot}} = \mu_{\text{gem}} c V_v (1 + f_d) = \mu_{\text{gem}} R_d c V_v \quad (4.5-11)$$

Per volume poreus medium is de vermindering van de hoeveelheid stof gelijk aan:

$$\frac{a_{\text{tot}}}{V} = \mu_{\text{gem}} R_d c n \quad (4.5-12)$$

Deze hoeveelheid moet nu in de stofbalans (4.5-9) aan de rechterzijde van de vergelijking in mindering worden gebracht. Voor de verplaatsing van een niet-conservatieve stof, *die onderhevig is aan lineaire adsorptie en aan afbraak volgens een eerste-orde proces*, geldt aldus de differentiaalvergelijking:

$$R_d \frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot (v_e c - D^h \cdot \nabla c) - \mu_{gem} R_d c \quad (4.5-13)$$

waarin de laatste term de invloed van het afbraakproces weergeeft en R_d de vertraging, veroorzaakt door de adsorptie.

4.6 Stoftransport in een kolom

4.6.1 Inleiding

In paragraaf 4.5 werden de differentiaalvergelijkingen afgeleid voor het transport van conservatieve en niet-conservatieve stoffen. Voor de oplossing van de convectie-dispersievergelijking is het nodig de fluxdichtheid te kennen. Dit betekent dat alvorens het transport van stoffen kan worden geanalyseerd, eerst de grondwaterstroming zelf bekend moet zijn.

Als de verontreiniging plotseling (op $t=0$) begint en verder continu aanwezig blijft dan zal, indien alleen rekening wordt gehouden met convectie, een propstroming met een scherp grensvlak ontstaan. Door longitudinale dispersie vervaagt deze scherpe overgang echter meer en meer. Ook in grondwatersystemen met een gelijke reistijd langs alle stroomlijnen, leidt dispersie tot een meer geleidelijke doorbraak van de nieuwe watersoort in plaats van een plotselinge wijziging in samenstelling. (Voorbeelden van plotselinge doorbraak zijn de convectieve stroming door een kolom en naar een put in het midden van een rond eiland). De meeste grondwatersystemen kennen echter een grote spreiding in de reistijden, zodat ook convectief transport alleen al een geleidelijke doorbraak geeft (zie hoofdstuk 3). Dispersie voegt daaraan een - meestal betrekkelijk geringe - extra afvlakking van de doorbraakcurven toe.

We bespreken in het onderstaande eendimensionaal transport in een grondkolom of bodemprofiel, met een gegeven fluxdichtheid. Eendimensionaal transport speelt een belangrijke rol in de bovengrond: in de onverzadigde zone van de bodem zal verticale verplaatsing optreden vanaf het maaiveld naar het grondwater, onder invloed van een overschot aan neerslag-of bevoeiingswater. Wordt de verontreiniging over een groot oppervlak bij het begin van de stroming ingevoerd, dan is de transversale dispersie te verwaarlozen. De verplaatsing is dan eendimensionaal. Voorbeelden van dergelijke verplaatsing zijn:

- ontziltling van de bodem onder invloed van neerslag of irrigatie;
- uitspoeling van meststoffen en verontreinigingen;

- verzilting van de bodem bij overstroming met zeewater (Zeeland, 1953).

In de onverzadigde zone van de bodem treedt uitdroging en herbevochtiging op. Verticaal vochttransport in de onverzadigde toestand vindt echter dikwijls plaats bij een vrijwel constant vochttraject (de 'veldcapaciteit' van de bodem). Is de grond natter dan zakt onder invloed van de zwaartekracht het teveel snel weg naar het grondwater, is de grond droger dan verloopt deze wijze van afvoer bijzonder traag. Wij kunnen daardoor ook voor verticaal wegzakken van bodemvocht θ wel bij benadering als constant beschouwen. Dit geldt niet voor 'ondiepe' profielen en 'opdrachtige' grond waarin afwisselend neerwaartse en opwaartse stroming optreedt, als gevolg van neerslagoverschot en -tekort. In dergelijke gevallen van niet-stationaire onverzadigde stroming moeten we uitgaan van vergelijking (4.5-4). Omdat het vochtgehalte een functie is van x en t is nu de divergentie van de flux (in dit geval alleen $\frac{\partial v_x}{\partial x}$) niet gelijk aan nul. De oplossing van de

vergelijking is daardoor zeer gecompliceerd en kan alleen met behulp van numerieke methoden worden verkregen.

In het laboratorium kunnen zulke situaties worden nagebootst met behulp van kolomexperimenten.

4.6.2 Oplossingen voor ontzilting en verzilting

4.6.2.1 Algemeen

De differentiaalvergelijking voor de verplaatsing van een conservatieve stof in een eendimensionale verzadigde stroming met constante dichtheid en porositeit of voor stationaire onverzadigde stroming luidt:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v_e \frac{\partial c}{\partial x} - \alpha_L v_e \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0 \quad (4.5-6)$$

We kiezen hier x als variabele voor de afstand, ook wanneer we transport in een verticale kolom bedoelen. In het geval van stationaire onverzadigde stroming is het vochtgehalte θ niet een functie van de tijd. Bij verzadigd grondwater is θ gelijk aan de poriënfractie n .

Bij ontzilting van de bodem met een constant vochtgehalte zijn de voorwaarden:

- i) $x > 0 \quad t = 0 \quad c = c_0$ (oorspronkelijk zoute kolom)
- ii) $x = 0 \quad t > 0 \quad c = 0$ (invoer schoon water)

- iii) $x \rightarrow \infty$ t eindig $c = c_0$ (op grote diepte)
 iv) x eindig $t \rightarrow \infty$ $c = 0$ (na lange tijd)

Voorwaarde ii) is omstreden, zie ook paragraaf 4.6.2.2.

Onder bovengenoemde voorwaarden is de oplossing:

$$c = \frac{c_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \frac{(v_e t - x) \sqrt{v_e t}}{2 v_e t \sqrt{\alpha_L}} - e^{x/\alpha_L} \operatorname{erfc} \frac{(v_e t + x) \sqrt{v_e t}}{2 v_e t \sqrt{\alpha_L}} \right] \quad (4.6-1)$$

waarin:

$$\operatorname{erfc} m = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_m^{\infty} e^{-\zeta^2} d\zeta \quad \text{de 'error function complement'}$$

Invullen in bovenstaande vergelijking leidt tot:

$$c = \frac{c_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \frac{(vt - n_e x) \sqrt{vt}}{2 vt \sqrt{n_e \alpha_L}} - e^{x/\alpha_L} \operatorname{erfc} \frac{(vt + n_e x) \sqrt{vt}}{2 vt \sqrt{n_e \alpha_L}} \right] \quad (4.6-2)$$

Bovenstaande formules voor een ontziltende kolom worden wat eenvoudiger door invoering van de dimensieloze grootheden:

$$N = \frac{x}{2\alpha_L}, \quad \text{het aantal elementaire eenheden (elk ter dikte } 2\alpha_L) \text{ tussen het begin van de kolom}$$

en de afstand x .

$$P = \frac{v_e t}{x} = \frac{vt}{n_e x}, \quad \text{het aantal malen, dat het totale poriënwater in deze } N \text{ eenheden tijdens het}$$

uitspoelingsproces is ververst op het tijdstip t .

Invullen leidt voor een ontziltende kolom ($c_0, c_{in} = 0$) tot:

$$A = \frac{c(N,P)}{c_0} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \frac{(P-1)\sqrt{N}}{\sqrt{2P}} - \frac{1}{2} e^{2N} \operatorname{erfc} \frac{(P+1)\sqrt{N}}{\sqrt{2P}} \quad (4.6-3)$$

Voor grote N (in de praktijk vanaf $N = 3$ à 5) is de tweede term te verwaarlozen ten opzichte van

de eerste. Weliswaar neemt e^{2N} zeer sterk toe, maar de bijbehorende erfc neemt nog sterker af.

Bij verzilting of vervuiling van een oorspronkelijk schone kolom ($c_0 = 0$) door invoer van water met een concentratie c_{in} geldt de analoge formule:

$$B = \frac{c(N,P)}{c_{in}} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \frac{(1-P)\sqrt{N}}{\sqrt{2P}} + \frac{1}{2} e^{2N} \operatorname{erfc} \frac{(1+P)\sqrt{N}}{\sqrt{2P}} \quad (4.6-4)$$

nu met $(1-P)$ in plaats van $(P-1)$ en de tweede term opgeteld in plaats van afgetrokken. De grootte A geeft het aandeel van het oorspronkelijke water in het uittredende mengsel, $B = 1-A$ is het aandeel van het ingevoerde water. De som van deze beide is uiteraard 1.0.

Verschillen de concentraties c_0 (oorspronkelijk) en c_{in} (inkomend) beide van nul, dan geldt dus voor het uit de kolom tredende mengsel:

$$c = c_0 A + c_{in} B = c_0 A + c_{in}(1-A) \quad (4.6-5)$$

of:

$$c = c_{in} + A(c_0 - c_{in}) \quad (4.6-6)$$

4.6.2.2 Een andere randvoorwaarde

Bij de bespreking van de randvoorwaarden is vermeld dat de 'concentratievoorwaarde', die voorschrijft dat vanaf $t = 0$ het oppervlak van de kolom de concentratie van het ingevoerde water aanneemt, omstreden is. Het blijkt dat bij deze voorwaarde de stofbalans niet klopt: de ingevoerde hoeveelheid is iets groter dan de totale verandering die men in de gehele kolom berekent. Bij een conservatieve stof is dit uiteraard onmogelijk.

Vervangt men deze concentratie-voorwaarde:

$$\text{ii) } x = 0 \quad t > 0 \quad c = c_{in} \text{ (bij ontzilting is } c_{in} = 0 \text{)}$$

door de 'flux-voorwaarde' (zie bijlage III):

$$\text{ii) } x = 0 \quad t > 0 \quad \left(c - \alpha_L \frac{\partial c}{\partial x} \right)_{x=0} = c_{in}$$

dan wordt een sluitende stofbalans verkregen.

De oplossing voor een *ontziltende* kolom wordt nu:

$$A = \frac{c(N,P)}{c_0} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \frac{(P-1)\sqrt{N}}{\sqrt{2P}} - \frac{2NP}{\pi} \exp \frac{-(P-1)^2 N}{2P} + \frac{1}{2}(1+2N+2NP) e^{2N} \operatorname{erfc} \frac{(P+1)\sqrt{N}}{\sqrt{2P}} \quad (4.6-7)$$

en voor een *verziltende* kolom:

$$B = \frac{c(N,P)}{c_{in}} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \frac{(1-P)\sqrt{N}}{\sqrt{2P}} - \frac{2NP}{\pi} \exp \frac{-(1-P)^2 N}{2P} + \frac{1}{2}(1+2N+2NP) e^{2N} \operatorname{erfc} \frac{(1+P)\sqrt{N}}{\sqrt{2P}} \quad (4.6-8)$$

Ook hier geldt weer de 'mengregel':

$$c = c_{in} + A (c_0 - c_{in}) \quad (4.6-9)$$

Er bestaan veel oplossingen van dit type, voor allerlei voorwaarden en zowel voor de concentratie- als de flux-randvoorwaarde bij $x=0$. Een goed overzicht geven Van Genuchten en Alves, 1982 (met andere notatie: hun v komt overeen met onze v_e , hun A met onze B).

Dergelijke uitkomsten zijn echter tamelijk ingewikkeld, in het verleden werd daarom ook wel gebruik gemaakt van een eenvoudig model, het zogenaamde *cascade model*, zie bijlage V. In dit model wordt de grondkolom beschouwd als een reeks goed gemengde reservoirs, die in serie geschakeld zijn. Elk reservoir ontvangt het effluent van het vorige, vermengt dat met het reeds aanwezige water (het in de bodemlaag aanwezige bodemvocht) en geeft dit mengsel door aan het volgende reservoir (bodemlaagje). Deze schakeling vormt een 'cascade': elk reservoir beïnvloedt alle volgende, maar heeft geen invloed op zijn voorgangers.

Dit model is een benadering, omdat in de grond de menging door dispersie overal, bij elke x , geschiedt, terwijl deze in het model plaats vindt in een aantal afzonderlijke reservoirs. De continue variabele x wordt daarbij opgedeeld in een aantal discrete stappen $\Delta x = 2\alpha_L$.

Alle hierboven genoemde methoden leiden tot moeilijkheden wanneer de concentratieverandering een ingewikkelde functie van de tijd is. Voor lineaire systemen en eenvoudige vormen van deze

tijdsfunctie, bijvoorbeeld $c = c_0 e^{-t/T}$, zijn door convolutie van de responsfunctie¹⁾ nog wel oplossingen te vinden, maar bij veel natuurlijke variabelen (bijvoorbeeld verontreiniging van de neerslag met bepaalde stoffen) is de verandering daartoe veel te grillig.

In dergelijke gevallen is men aangewezen op een numeriek model, dat veel algemener toepasbaar is. Het schrijven van een computerprogramma voor een numerieke oplossing is in principe niet moeilijk, maar kan wel een tijdrovende aangelegenheid zijn. Tegenwoordig (1998) is er een groot aantal programma's, met uiteenlopende mogelijkheden, commercieel verkrijgbaar. In hoofdstuk 5 worden de grondslagen van een eenvoudige numerieke methode besproken.

4.7 Schaalproblemen bij de modellering van grondwaterstroming en stoftransport

Bij de introductie van het begrip doorlatendheid werd er al op gewezen dat in een natuurlijk poreus medium, zoals grond, de eigenschappen kunnen variëren als functie van de ruimtelijke coördinaten. De doorlatendheid 'in een punt' is in werkelijkheid een over een rev gemiddelde waarde. Uiteraard heeft de keuze van het rev invloed op de uitkomst. Dit geldt ook voor de dispersielengte, die een maat is voor de onregelmatigheden in de structuur van het medium. Dat leidt er toe dat ook de dispersielengte afhankelijk is van de schaal waarop de stroming wordt beschreven. Hier worden we geconfronteerd met schaalproblemen. De wet van Darcy en de beschrijving van dispersief transport zijn in principe alleen geldig op de schaal van een rev. De effecten van diffusie en dispersie worden in de convectie-dispersievergelijking samengevoegd in één hydrodynamische dispersie-coëfficiënt, maar spelen zich af op een verschillende schaal.

Praktische voorbeelden zijn:

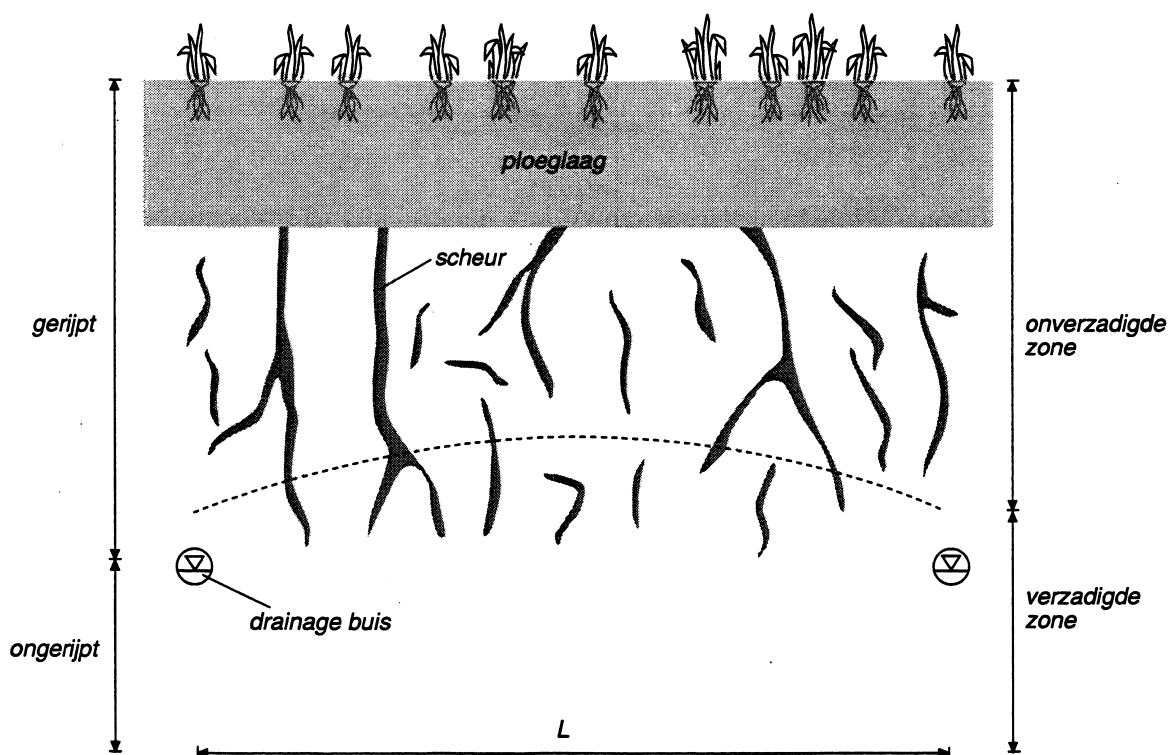
- stroming van grondwater op regionale schaal in een gelaagd systeem van watervoerende en slecht doorlatende lagen,
- stroming in de onverzadigde zone in een gescheurde kleigrond.

In het eerste geval wordt aangenomen dat de wet van Darcy ook op grote schaal van toepassing is en voorts dat de Dupuit-aanname geldig is in de goed doorlatende lagen. Verdere schematisatie vindt plaats door aan te nemen dat er alleen verticale stroming is in de slecht doorlatende lagen. Binnen elke laag die wordt onderscheiden, neemt men aan dat doorlatendheid niet varieert in de verticale richting. Bovendien wordt het doorlaatvermogen vaak over grote afstanden als constant verondersteld. Wenst men ook het transport van stoffen in zo'n systeem te berekenen dan gebeurt dat met behulp van (numerieke) modellen die zijn gebaseerd op de in paragraaf 4.5 besproken differentiaalvergelijkingen. De dispersielengte zal bij een grote schaal constant worden

¹⁾ Zie bijlage V

verondersteld over afstanden die niet kleiner zijn dan de elementen waaruit het model is opgebouwd. Derhalve zal in vrijwel alle praktische toepassingen de dispersielengte toenemen met de modelschaal.

In het tweede geval hebben we te maken met een grondkolom die, onder de geploegde laag, door scheuren in basaltvormige kleibrokken is verdeeld, zie figuur 4.7-1.



Figuur 4.7-1 Schema van het profiel van een gerijpte zware kleigrond (naar Groen, 1997).

Water en opgeloste stoffen bewegen zich door de kleibrokken én door de scheuren. Het laatste alleen in het geval van overvloedige neerslag. Uit veldwaarnemingen blijkt dat opgeloste stoffen zoals pesticiden, meststoffen en dergelijke veel sneller in het grondwater terecht komen dan op grond van modelberekeningen, waarbij een homogeen medium wordt aangenomen, mag worden verwacht. Dit verschijnsel doet zich overigens ook voor in zandige profielen met een minder geprononceerde structuur. Men spreekt in deze gevallen ook wel van *preferente stroombanen* (De Rooij, 1996). Door de dispersiecoëfficiënt 'op te schalen' kunnen waarnemingen en modelresultaten in overeenstemming worden gebracht (Groen, 1997).

Schaalproblemen bij de opschaling van processen en definitie van effectieve parameters komen uitvoerig aan de orde in het college *Regionale grondwaterstroming en kwaliteit*, (Leijnse, 1998).

5 NUMERIEKE OPLOSSINGEN VAN GRONDWATERSTROMING EN TRANSPORT

Voor het berekenen van grondwaterstromingen wordt sinds 1970 veelvuldig gebruik gemaakt van 'computermodellen'. In een computermodel wordt een differentiaalvergelijking (eigenlijk een integraalvergelijking) opgelost met behulp van een numerieke methode. De vergelijking beschrijft bijvoorbeeld de verdeling van de stijghoogte of de concentratie van opgeloste stoffen in de ruimte, als functie van de tijd. Het principe van numerieke oplossingsmethoden was al in de 19-de eeuw bekend. Omdat ze echter meestal gepaard gaan met zeer omvangrijk rekenwerk, vonden ze aanvankelijk weinig praktische toepassing. Sinds het verschijnen van krachtige computers- in de tweede helft van de 20-ste eeuw- kunnen ze nu daadwerkelijk routinematig worden gebruikt. Een numeriek model bestaat in de praktijk uit een computerprogramma. In dit hoofdstuk worden, na een algemene inleiding over modellen, de principes besproken van één van de belangrijkste numerieke technieken: de eindige differentie methode.

5.1 Systemen en modellen

5.1.1 Systemen

Nu de differentiaalvergelijkingen bekend zijn, kan de stroming van water en het transport van opgeloste stoffen in principe worden berekend. Daarvoor is nodig dat de differentiaalvergelijking wordt opgelost. De oplossing is de functionele relatie tussen de afhankelijke variabele, bijvoorbeeld stijghoogte of concentratie, en de onafhankelijke variabelen, dat zijn de ruimtelijke coördinaten en de tijd.

De differentiaalvergelijkingen zijn de zogenaamde *systeemvergelijkingen*, zij beschrijven het gedrag van het systeem dat we bestuderen. Een *systeem* is een verzameling van elementen, welke een oorzaak-en-gevolg relatie hebben met variabelen. Men onderscheidt daarbij reële en abstracte systemen. Een *reëel systeem* is een begrensd en samenhangend deel van de ervaringswereld: het bestaat uit reële (fysische) elementen. Een *abstract systeem* is van wiskundige aard: het bestaat uit een aantal wiskundige relaties tussen verschillende variabelen. Een reëel systeem is bijvoorbeeld een bepaald volume grond dat in de natuur voorkomt en dat aan de bovenzijde, bij het maaiveld door de atmosfeer begrensd wordt. Dit systeem bestaat uit elementen zoals bodemdeeltjes, water, opgeloste stoffen en gassen en het treedt op velerlei wijze in wisselwerking met de omgeving: er is uitwisseling van water, van stoffen, van warmte, van straling en van gas met de omgeving.

Beperken wij ons tot grondwaterstroming en transport van opgeloste stoffen, dan zien wij invoer van neerslag en stoffen (ingangsvariabelen), afvoer van grondwater en opgeloste stoffen naar drains, putten en waterlopen (uitgangsvariabelen) en afvoer van bodemvocht en voedingsstoffen door planten (ook uitgangsvariabelen). Al deze processen leiden tot veranderingen in stijghoogten

en concentraties van stoffen. Deze grootheden geven de toestand weer waarin het systeem verkeert: het zijn toestandvariabelen. Omdat het in wisselwerking treedt met de omgeving en daarmee materie uitwisselt noemen men dit een *open systeem*.

Al deze variabelen veranderen in de tijd, het systeem is dus *tijdsafhankelijk of niet-stationair*.

Een systeem kan *lineair* zijn, maar ook *niet-lineair*. Voor lineaire systemen geldt dat een verdubbeling van de invoer ook een verdubbeling van de uitvoer teweeg brengt (koffie-automaat, binnen zekere grenzen), voor niet-lineaire systemen geldt dit niet (kip: tweemaal zoveel voer geeft niet tweemaal zoveel eieren). *Lineaire systemen worden beschreven door lineaire differentiaalvergelijkingen*. In een lineaire differentiaalvergelijking komt de afhankelijke variabele alleen voor in de eerste graad (inclusief in de afgeleiden). Alleen bij lineaire systemen geldt het *beginsel van superpositie*: men mag dan de effecten van twee verschillende invoeren bij elkaar optellen om aldus het effect te vinden van de som van beide invoeren¹⁾. Deze eigenschap maakt het rekenen met lineaire systemen gemakkelijk, in het bijzonder de voorspelling van het gedrag onder uitzonderlijke omstandigheden.

Helaas zijn de meeste natuurlijke systemen verre van lineair. Bij benadering lineair zijn bijvoorbeeld warmtegeleiding, stofoverdracht en ook vele vormen van grondwaterstroming. In de voorgaande hoofdstukken werden verschillende lineaire vergelijkingen besproken, zoals: (2.3-1), (2.5-5), (2.6-4), (3.2-3), (4.2-4) en (4.5-5). Vergelijking (2.6-3) die verzadigde grondwaterstroming beschrijft, is meestal zwak niet-lineair; zeer sterk niet-lineair is daarentegen de stroming van bodemvocht in de onverzadigde zone van de bodem.

Natuurlijke systemen zijn meestal bijzonder ingewikkeld. Men poogt vaak deze ingewikkelde systemen te beschrijven met behulp van modellen.

5.1.2 Modellen

Een model is een vereenvoudigde versie van een reëel systeem dat zich gemakkelijker leent voor onderzoek, en waarvan men hoopt dat de uitkomsten het gedrag van het natuurlijke systeem in voldoende mate zullen weerspiegelen.

De vereenvoudiging wordt geïntroduceerd in de vorm van een aantal veronderstellingen. De overeenkomst tussen het *prototype* (het natuurlijke systeem) en het *model* moet altijd zorgvuldig worden getoetst.

Modellen worden zeer algemeen gebruikt, vooral voor het voorspellen van effecten. Het gebruik

¹⁾ Zie tekstboeken wiskunde, bijvoorbeeld Grossman en Derrick, 1988, blz. 86.

van modellen is in de laatste tijd sterk uitgebreid, omdat het door toepassing van betere technieken mogelijk is geworden ook gecompliceerde modellen (met talrijke in- en uitgangsvariabelen) te onderzoeken. Voorheen werden modellen alleen gebruikt om betrekkelijk eenvoudige relaties te onderzoeken waarbij vele andere variabelen constant werden gehouden (*ceteris paribus* beginsel).

De voorspelling, die met behulp van een model kan worden verkregen, kan bijvoorbeeld betrekking hebben op de invloed van veranderingen die men in het natuurlijke systeem denkt aan te brengen, maar die nog in de ontwerpfase verkeren. Een ander voorbeeld is het gebruik van modellen voor het voorspellen van zeldzame gebeurtenissen, waarvan het onwaarschijnlijk is dat deze zich binnen een redelijke waarnemingsperiode zullen voordoen. In beide gevallen zijn waarnemingen in de natuur niet zinvol en neemt men zijn toevlucht tot modellen.

Deze modellen zijn van zeer uiteenlopende aard, maar er zijn twee belangrijke groepen:

- Het *zwarte-doos model*: men bekommert zich niet over de inhoud of de werking van het geheimzinnige kastje, maar tracht de betrekking tussen de invoervariabelen en de uitvoervariabelen te beschrijven. Een voorbeeld voor één invoer- en één uitvoervariabele is de wet van Mitscherlich, die een beschrijving geeft van de betrekking tussen de invoer van een plantenvoedende stof en de opbrengst van een gewas, zonder te treden in de uiterst ingewikkelde mechanismen, die deze relatie veroorzaken.
- De *conceptuele modellen*: daarbij poogt men de inwendige structuur van het natuurlijke systeem zo goed mogelijk in rekening te brengen, zij het meestal in sterk vereenvoudigde vorm. Bij dergelijke modellen, die trachten iets van de inwendige structuur op te nemen, kan men onderscheid maken tussen *schaalmodellen*, *analoge modellen* en *wiskundige modellen*.

Omdat de transportprocessen die in dit dictaat worden behandeld in beginsel goed bekend zijn, zullen wij ons alleen bezighouden met de tweede groep

Bij *schaalmodellen* is het fysisch proces hetzelfde als bij het prototype, maar de schaal is anders en in de regel zijn de afmetingen veel kleiner. Een *proefveld* is een zeer eenvoudig schaalmodel; andere meer gecompliceerde voorbeelden zijn de waterloopkundige en scheepsbouwkundige modellen.

Analoge modellen benutten een fysisch proces, dat afwijkt van het proces in het prototype, maar dat wel aan overeenkomstige wetten gehoorzaamt. Een voorbeeld is het neerslag-afvoer model van paragraaf 2.8, waarin de afvoer van een gedraineerde kavel wordt voorgesteld als de stroming uit een reservoir door een dun buisje. Dit is een conceptueel analoog model: het reservoir stelt de berging voor in de bodem tussen de drains, de waterhoogte in het reservoir vertegenwoordigt de stijghoogte midden tussen de drains m_0 en de relatie tussen afvoer en m_0 wordt gesimuleerd door de laminaire stroming door een dun buisje.

Analytische oplossingen van differentiaalvergelijkingen zijn ons vanouds bekend als 'formules'. In het algemeen zijn dergelijke analytische oplossingen alleen mogelijk in sterk vereenvoudigde gevallen. Bij een conceptueel grondwatermodel vormt men zich door schematisatie een beeld van de werkelijkheid. Het beeld wordt meestal verkregen door een aantal veronderstellingen die betrekking hebben op:

- de geometrie van het stroomdomein;
- de samenstelling en eigenschappen van het poreuze medium;
- de eigenschappen van de vloeistof (of vloeistoffen);
- de randvoorwaarden;
- het type stroming (laminair of turbulent, in één of meer dimensies).

Een verdere stap in de conceptualisatie is het formuleren van de natuurkundige processen (bijvoorbeeld het transport) als wiskundige relaties. Op deze wijze verkrijgen we een differentiaalvergelijking ofwel: *een wiskundig model*.

In de voorgaande hoofdstukken werd de stroming van grondwater en de verplaatsing van opgeloste stoffen besproken. Zoals we zagen is voor een aantal gevallen (bepaald door de randvoorwaarden) een analytische oplossing bekend. Voor veel situaties zijn de gebruikelijke mathematische oplossingsmethoden echter niet toereikend om een analytische oplossing te vinden. Alleen een *numerieke methode* kan dan de oplossing brengen.

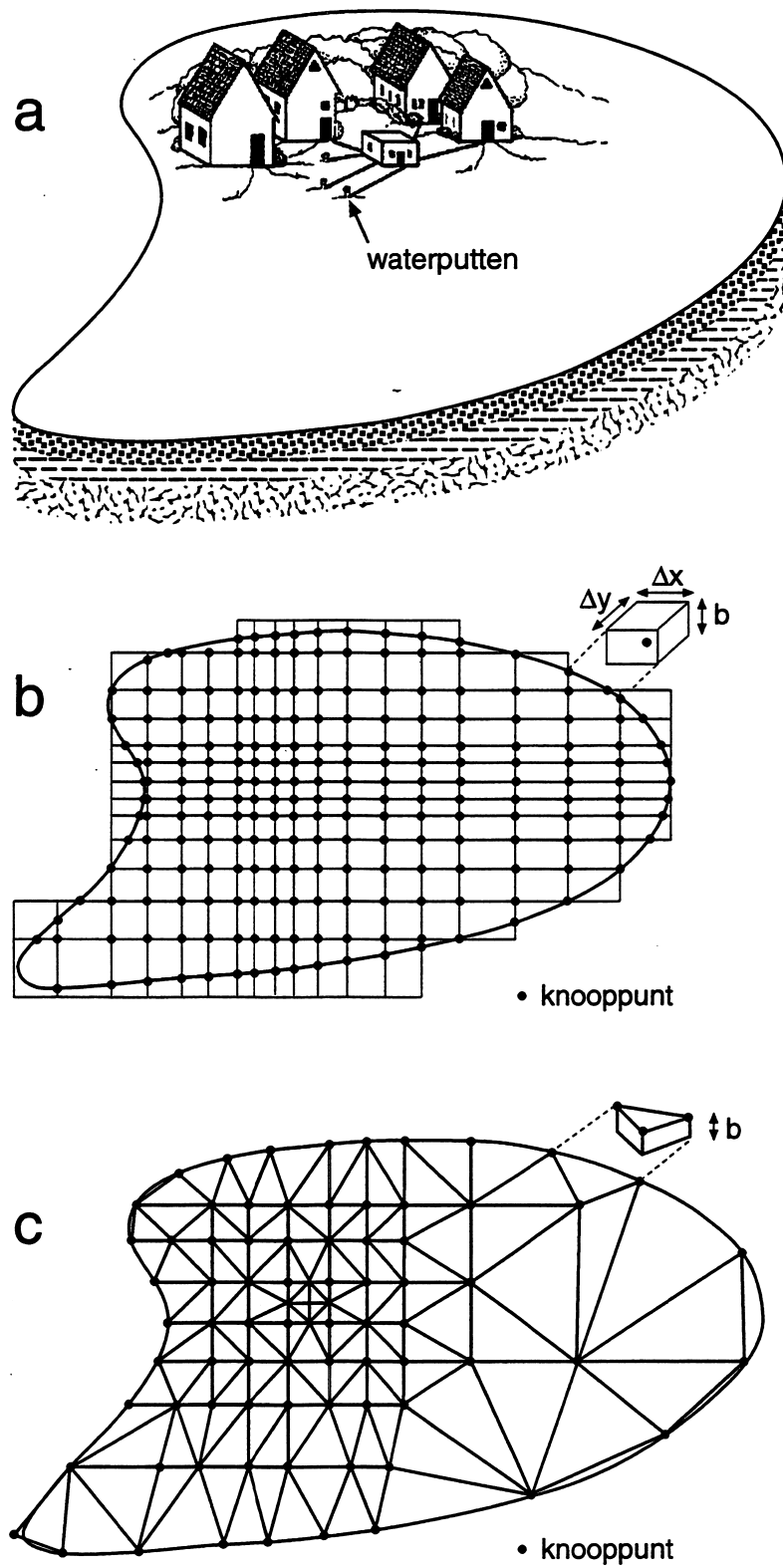
Numerieke methoden worden thans veelvuldig toegepast. Onregelmatigheden in randvoorwaarden, zelfs niet-lineairiteit, zijn zonder veel problemen in te voeren. Numerieke methoden zijn daardoor bijzonder flexibel. Het grootste vraagstuk is de complexiteit van het model, met andere woorden in hoeverre wordt de werkelijkheid tot in detail nagebootst? Ook bij numerieke oplossingen worden tot nu toe (1998) vereenvoudigingen toegepast. Zo zijn regionale grondwatermodellen vrijwel zonder uitzondering gebaseerd op de Dupuit-aanname. Men kan wél verschillende grondlagen onderscheiden, maar de veronderstelling is dat in iedere laag het water stroomt volgens Dupuit. De driedimensionale stroming wordt in het model vervangen door een aantal tweedimensionale stromingen die via slechtdoorlatende lagen met elkaar communiceren. Hoewel computers nu zeer veel sneller en krachtiger zijn dan vijftien jaar geleden, is de hoeveelheid rekenwerk voor sommige toepassingen zelfs zo groot dat ook de huidige computers nog veel tijd nodig hebben om het vraagstuk op te lossen. Het essentiële verschil tussen een analytische en een numerieke oplossing is, dat voor de laatste het gehele stromingsproces daadwerkelijk moet worden gesimuleerd: om de oplossing op $t = t_1$ te berekenen *moeten alle voorgaande tijdstappen tussen $t = 0$ en $t = t_1$ worden doorgerekend*.

Het ontwerpen van een numeriek grondwatermodel vereist kennis van fysische transportschijnselen

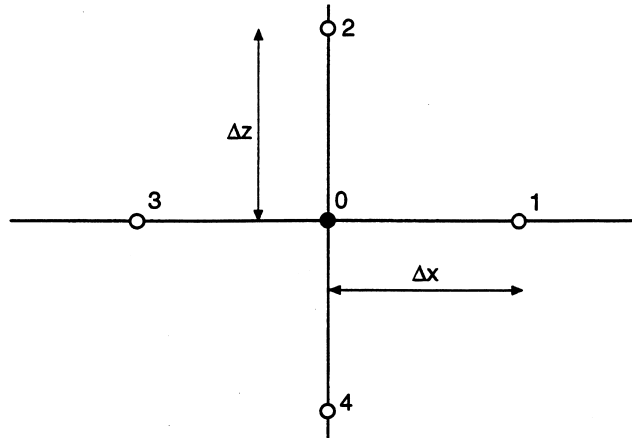
en van de vertaling van differentiaalvergelijkingen en hun randvoorwaarden in numerieke rekenschema's. Numerieke methoden berusten op discretisatie, zowel naar de tijd als naar de plaats: afstanden worden door knooppunten in stukjes ingedeeld en de tijd in kleine tijdstappen. In tweedimensionale vraagstukken worden de knooppunten in het ruimtelijke vlak onderling verbonden met hun burens; zo doende ontstaat een netwerk en wordt het vlak verdeeld in elementen. De differentiaalvergelijking wordt nu vervangen door een groot aantal algebraïsche vergelijkingen (één voor ieder knooppunt), waarmee het probleem is teruggebracht tot de oplossing van een stelsel algebraïsche vergelijkingen. Door deze procedure voor iedere tijdstap te herhalen, schrijdt de oplossing voort in de tijd. Een numerieke oplossing geeft dus als resultaat de waarden van de onbekende variabele in een discreet stel punten die in de ruimte en in de tijd zijn gesitueerd. Hoeveel punten men kiest hangt in het algemeen af van de gevraagde nauwkeurigheid. De twee meest gebruikte numerieke methoden zijn thans de *eindige differentie methode* en de *eindige elementen methode*. Bij de eerste liggen de knooppunten op elkaar loodrecht kruisende lijnen en zijn de elementen vierkantjes of rechthoeken, bij de tweede methode liggen de knooppunten meestal onregelmatig verspreid en vormen driehoeken, zie figuur 5.1-1, bladzijde 148. In het onderstaande zal alleen de eindige differentiemethode worden besproken.

5.2. De eindige differentiebenadering

Bij de eindige differentiemethode (e.d.m.) wordt de partiële differentiaalvergelijking vervangen door een stelsel *differentievergelijkingen* en het continu verloop van de onbekende functie vervangen door de waarden in een aantal discrete punten. Deze punten verkrijgen we door het stroomveld te bedekken met een netwerk. In een tweedimensionaal geval is dat een rechthoekig netwerk. De roosterlengten Δx en Δz behoeven niet gelijk te zijn en kunnen bovendien variëren. In eendimensionale gevallen reduceert het rooster tot een lijn waarop de knooppunten op afstanden Δx van elkaar liggen (Δx kan variëren). We kunnen, door discretisatie van de differentiaalvergelijking, de waarde van de onbekende variabele in een knooppunt schrijven als functie van de waarden in naburige punten. Om de procedure toe te lichten, bezien we een willekeurig knooppunt in een tweedimensionaal netwerk dat omgeven is door vier andere punten, zoals weergegeven in figuur 5.2-1.



Figuur 5.1-1 Knooppuntenconfiguraties bij eindige differentie- en eindige elementenmethode (naar Mercer en Faust, 1981) .



Figuur 5.2-1 Een normaal roosterpunt 0 omgeven door vier aangrenzende roosterpunten in een vierkantennet.

Voor een continue functie u , zoals de stijghoogte, kunnen we de waarde in punt 1 schrijven in vorm van een Taylor-reeks ten opzichte van punt 0¹⁾.

$$u_1 = u_0 + \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_0 + \frac{\Delta x^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_0 + \frac{\Delta x^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_0 + \frac{\Delta x^4}{4!} \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_0 + \dots \quad (5.2-1)$$

evenzo kunnen we voor punt 3 schrijven:

$$u_3 = u_0 - \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_0 + \frac{\Delta x^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_0 - \frac{\Delta x^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_0 + \frac{\Delta x^4}{4!} \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_0 - \dots \quad (5.2-2)$$

Aftrekken van beide reeksen geeft:

$$u_1 - u_3 = 2\Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_0 + 2 \frac{\Delta x^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_0 + \dots \quad (5.2-3)$$

Hieruit volgt voor de eerste (partiële) afgeleide in punt 0:

¹⁾ Waar in vergelijking (5.2-1) en volgende Δx^n staat, wordt bedoeld $(\Delta x)^n$.

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_0 = \frac{u_1 - u_3}{2\Delta x} - \frac{\Delta x^2}{3!} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_0 - \dots \quad (5.2-4)$$

De tweede term van het rechterlid bevat $(\Delta x)^2$ in de teller en zal, wanneer we Δx klein genoeg kiezen, zeer klein worden ten opzichte van de eerste term. Vergelijking (5.2-4) schrijven we nu als:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_0 = \frac{u_1 - u_3}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (5.2-5)$$

Dit is de zogenaamde centrale differentie benadering met een 'afbreekfout' van de orde $(\Delta x)^2$, we schrijven dit als $O(\Delta x^2)$.

De eerste afgeleide in punt 0 kunnen we ook berekenen door alleen vergelijking (5.2-1) of (5.2-2) te gebruiken. Wordt (5.2-1) gebruikt dan vinden we:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_0 = \frac{u_1 - u_0}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_0 - \dots \quad (5.2-6)$$

en bij gebruik van (5.2-2):

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_0 = \frac{u_0 - u_3}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_0 - \dots \quad (5.2-7)$$

Dit zijn respectievelijk de voorwaartse en achterwaartse benadering, met een afbreekfout van de orde Δx , een orde groter dan de centrale differentie. Voorwaartse of achterwaartse benaderingen van de ruimtelijke differentie zijn vaak noodzakelijk aan de randen van het stroomveld. Differentie benaderingen in de tijd kunnen ook voorwaarts of achterwaarts genomen worden ten opzichte van een bepaald tijdniveau.

Een differentie-expressie voor de tweede afgeleide kan worden gevonden door de (5.2-1) en (5.2-2) bij elkaar op te tellen en te delen door $(\Delta x)^2$. Hieruit volgt voor de tweede partiële afgeleide in de x richting in *punt 0*:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_0 = \frac{u_1 + u_3 - 2u_0}{\Delta x^2} - \frac{\Delta x^2}{12} \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)_0 - \dots \quad (5.2-8)$$

Gebruiken we alleen de eerste term van het rechterlid dan heeft deze benadering een afbreekfout $O(\Delta x^2)$.

Omdat in bepaalde delen van het stroomdomein de verandering van de stijghoogte als functie van de coördinaten veel groter kan zijn dan in andere delen, is het gebruik van netwerken met een variabele roosterafstand dikwijls te verkiezen boven netwerken met een constante roosterafstand. Voor een veralgemening van de differentievergelijkingen voor de eerste en tweede afgeleide zie Koopmans, (1986). Een rooster kan zowel worden aangebracht in het kaartvlak als in een dwarsdoorsnede. Betreft het een model met meerdere watervoerende lagen *in het kaartvlak*, dan worden voor iedere laag in ieder roosterpunt de stijghoogten berekend. De randen van het te modelleren gebied worden bij voorkeur gekozen langs open waterlopen - rivieren, kanalen, etc. die in contact staan met de watervoerende laag - of langs de stroomlijnen en/of waterscheidingen. In het eerste geval is langs zo'n rand de stijghoogte bekend als functie van de tijd en in het tweede geval is de gradiënt van de stijghoogte gelijk aan nul. Is een afbakening langs dergelijke grenzen niet uitvoerbaar dan zullen de randvoorwaarden op een andere wijze moeten worden bepaald, bijvoorbeeld uit een isohypsenkaart.

Betreft het een rooster *in een dwarsdoorsnede*, dan worden de randen meestal gevormd door stroomlijnen (bijvoorbeeld langs ondoorlatende lagen of langs symmetrielijnen), door de vrije waterspiegel, door kweloppervlakken of door de grens tussen grond en open water.

In de volgende paragraaf wordt een eenvoudig voorbeeld gebruikt om aan te tonen hoe het stelsel differentievergelijkingen wordt verkregen en welke rol de randvoorwaarden daarbij spelen.

5.3 Voorbeelden van differentievergelijkingen

5.3.1 Differentievergelijkingen voor verzadigde grondwaterstroming

De differentiaalvergelijking voor verzadigde stroming naar evenwijdige leidingen in een homogene, isotrope watervoerende laag met bergingsmogelijkheden, en onder aanname van de Dupuit-veronderstelling, werd besproken in paragraaf 2.6. Het resultaat luidt:

$$kD \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} + R = S \frac{\partial H}{\partial t} \quad (5.3-1)$$

Omdat de stroming in dit geval door toepassing van de Dupuit-aanname, eendimensionaal wordt gemodelleerd, bestaat het netwerk uit een lijn met daar op knooppunten op een onderlinge afstand

Δx . Voor punten waar de stijghoogte onbekend is, dat wil zeggen alle interne knooppunten én randpunten waarvoor de Neumann-voorwaarde geldt, moet vervolgens de differentievergelijking worden opgesteld (waarom niet voor punten met een Dirichlet-voorwaarde?).

In de differentiebenaderingen voor de eerste en tweede afgeleide in punt i komen, zoals we hebben gezien in paragraaf 5.2, de waarden voor van de afhankelijke variabele in het knooppunt zelf en in de naburige punten. Voor alle knooppunten tezamen ontstaat dus een stelsel vergelijkingen met evenveel onbekenden als er vergelijkingen zijn. Voor interne punten wordt de tweede afgeleide vervangen door de centrale differentiebenadering volgens vergelijking (5.2-8). Gebruiken we voor de gediscretiseerde functie in het punt (x) het symbool u_i^n , waarbij i de index is in de x -richting en n het tijdniveau aangeeft dan gaat, bij verwaarlozing van de resttermen, vergelijking (5.3-1) over in:

$$kD \frac{u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n}{\Delta x^2} + R = S \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} \quad (5.3-2)$$

Na herschikking wordt de vergelijking:

$$u_i^{n+1} = \frac{kD}{S} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n) + u_i^n + \frac{R\Delta t}{S} \quad (5.3-3)$$

En indien we $\frac{kD}{S} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$ vervangen door r , kunnen we schrijven:

$$u_i^{n+1} = ru_{i-1}^n + (1-2r)u_i^n + ru_{i+1}^n + \frac{R\Delta t}{S} \quad (5.3-4)$$

Er wordt hier gebruik gemaakt van twee tijdniveaus n en $n+1$, de nieuwe waarde u_i^{n+1} kan expliciet worden gevonden in termen van bekende waarden u^n op $t = n\Delta t$. Door nu alle knooppunten stap voor stap te berekenen, schrijft de berekening één stap voort in de tijd. Het eerste bekende tijdniveau ($t = 0$, $n = 0$) wordt gevormd door beginwaarden, die gegeven zijn.

Met zulk een eenvoudige, en directe berekeningsmethode zouden andere methoden overbodig lijken, ware het niet dat *de mogelijkheden van expliciete berekening ernstig worden beperkt door problemen die verband houden met stabiliteit*. Zoals we hebben gezien voldoen de waarden van u

niet exact aan de differentiaalvergelijking (5.3-1) wanneer de resttermen worden weggelaten. Het blijkt nu dat bij expliciete rekenschema's, zoals vergelijking (5.3-4), kleine afwijkingen van de werkelijke waarden bij toenemende t explosief kunnen groeien. Dat komt, omdat de nieuwe waarde in punt i wordt berekend uit drie waarden van het onderliggende tijdniveau die op hun beurt weer uit het daaronderliggende niveau zijn berekend. Aldus ontstaat een pyramide die de fouteninvoer duidelijk maakt. De gevolgen voor de berekening zijn desastreus, het gaat niet om een onnauwkeurigheid, maar om totaal foutieve resultaten. Instabiliteit is een fundamenteel probleem bij de numerieke oplossing van differentiaalvergelijkingen. In dit bestek wordt het slechts gesignaleerd, voor een uitgebreide behandeling ervan raadplege men de literatuur (Forsythe en Wasom, 1960; Remson, Hornberger en Molz, 1972; Greenspan, 1974) Of dit verschijnsel al dan niet optreedt, hangt af van de keuze van Δx en Δt . We spreken van een stabiele berekening wanneer kleine afwijkingen niet onbeperkt groeien. Het blijkt dat de berekening stabiel blijft wanneer $r < 0.5$.

Het ligt dus voor de hand te zoeken naar een methode waarbij Δt en Δx onafhankelijk van elkaar kunnen worden gekozen, zonder dat de berekening instabiel wordt. *Dit is het geval bij de zogenaamde impliciete benadering.* Deze wordt verkregen door de differentiebenadering in de x -dimensie te schrijven op $t = (n+1)\Delta t$ en voor de operator in de tijd een achterwaartse benadering te kiezen (achterwaarts ten opzichte van $(n+1)\Delta t$), aldus ontstaat:

$$kD \frac{u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + R = S \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} \quad (5.3-5)$$

Het impliciete karakter van deze vergelijking blijkt hieruit dat u_i^{n+1} wordt gevonden in termen van u_i^n (bekend) en u_{i+1}^{n+1} en u_{i-1}^{n+1} , beide onbekend.

Wordt $\frac{kD}{S} \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ weer vervangen door r dan kan vergelijking (5.3-5) na herschikking worden geschreven als:

$$ru_{i-1}^{n+1} - (1 + 2r)u_i^{n+1} + ru_{i+1}^{n+1} = -u_i^n - \frac{R\Delta t}{S} \quad (5.3-6)$$

Alle roosterpunten i waar u_i^{n+1} moet worden berekend leveren een vergelijking van het type (5.3-6). Het impliciet zijn van de vergelijkingen betekent dat de oplossing alleen gevonden kan

worden door alle vergelijkingen tegelijkertijd op te lossen. Men kan dus nu de roosterpunten niet één voor één berekenen, maar moet *per tijdstap voor alle punten de nieuwe waarden tegelijk berekenen uit een stelsel van k vergelijkingen met k onbekenden*. Omdat de differentiaalvergelijking (5.3-1) *lineair* is, zijn ook alle differentievergelijkingen *lineaire algebraïsche vergelijkingen*. Dit is een belangrijk gegeven, omdat voor het oplossen van een stelsel lineaire algebraïsche vergelijkingen, effectieve wiskundige technieken (de zogenaamde matrixmethoden) kunnen worden toegepast.

In dit eendimensionale voorbeeld is het invoeren van de randvoorwaarden in de differentievergelijkingen zeer eenvoudig. Bij tweedimensionale vraagstukken kan dat veel gecompliceerder zijn wanneer er randen voorkomen, zoals de waterspiegel, die niet samenvallen met een roosterlijn. Er zijn dan niet-reguliere roosterpunten, zoals:

- de snijpunten van roosterlijnen met onregelmatige randen;
- knooppunten in de nabijheid van onregelmatige randen.

De afstanden van zo'n punt tot buurknooppunten in het rooster zijn dan niet allemaal gelijk aan de reguliere roosterafstanden. Dit heeft tot gevolg dat de differentiebenaderingen voor de eerste en tweede afgeleiden er anders uitzien. Ook voor grenzen waarlangs een Neumann voorwaarde geldt, is de differentiebenadering afwijkend (zie opgave 5.3.2.). Het is uiteraard ook mogelijk dat grenzen waarlangs de gradiënt loodrecht op de rand bekend is, niet samenvallen met roosterlijnen. Een vrije waterspiegel bijvoorbeeld, zal in het algemeen de roosterlijnen op willekeurige afstanden doorsnijden. Voor de berekening van $u_{i,j}$ op het snijpunt met behulp van de Neumann voorwaarde en voor berekeningen in niet homogene media wordt verwezen naar de literatuur. (Remson, Hornberger en Molz, 1972; Wang en Anderson, 1982; Koopmans, 1986). Zijn aldus voor alle punten de vergelijkingen bekend, dan hebben we een stelsel van k vergelijkingen met k onbekenden.

5.3.2 Differentievergelijkingen voor de convectievergelijking

De convectievergelijking kan voor eendimensionale stroming worden geschreven als:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v_{ex} \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad (3.2-5)$$

Gediscretiseerd wordt dit:

$$\frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} + v_{ex} \frac{c_i^n - c_{i-1}^n}{\Delta x} = 0 \quad (5.3-7)$$

of:

$$c_i^{n+1} = c_i^n + \frac{v_{ex} \Delta t}{\Delta x} (c_{i-1}^n - c_i^n) \quad (5.3-8)$$

In dit geval krijgt de numerieke oplossing een bijzonder karakter. Door de discretisatie treden afrondingsfouten op die tot gevolg hebben dat de concentratie in knooppunten al verandert voordat stoftransport convectief tot die plek is doorgedrongen. Dit proces lijkt op fysische dispersie en wordt daarom wel 'numerieke dispersie' genoemd. Bij de berekening is het noodzakelijk dat

$$\left| \frac{v_e \Delta t}{\Delta x} \right| < 1 ; \text{ dit houdt in dat de hoeveelheid water, die per tijdstap wordt toegevoegd aan een}$$

compartiment ($n_e A v_e \Delta t$), klein moet zijn ten opzichte van de inhoud van elk compartiment ($n_e A \Delta x$).

Een voorbeeld moge een en ander duidelijk maken:

Voorbeeld: Stel, we hebben een verticale kolom grond met $2\alpha_L = 0.10$ m en $n_e = 0.40$. Men voegt per dag aan de bovenzijde ($i = 0$) een waterkolom van 0.2 m hoogte toe (fluxdichtheid), zodat in de kolom de effectieve snelheid $v_e = \frac{v}{n_e} = 0.5$ m d⁻¹ bedraagt. De x-richting is in dit geval

positief naar beneden toe. We kiezen een expliciete oplossing met $\Delta t = 0.02$ d en $\Delta x = 0.10$ m.

Op een bepaald tijdstip geldt in het reservoir aan de bovenzijde (knooppunt 0) dat $c_0^n = 5$ kg m⁻³,

terwijl $c_1^n = c_2^n = c_3^n = \dots = 6$ kg m⁻³.

Op het tijdstip $t = \Delta t(n+1)$ geldt dan in knooppunt 1:

$$c_1^{n+1} = 6.0 + \frac{1}{10} (5.0 - 6.0) = 5.90$$

De concentratie in het volgende knooppunt (2) blijft onveranderd (controleer dat!).

Is nu bij de volgende tijdstap de concentratie in het reservoir gedaald tot 4.90 kg m⁻³ (externe

invloeden), dan geldt na afloop van deze tijdstap voor het knooppunt 1 op het tijdstip $n+2$:

$$c_1^{n+2} = 5.90 + 0.1(4.90 - 5.90) = 5.80$$

en voor knooppunt 2:

$$c_2^{n+2} = 6.0 + 0.1(5.90 - 6.0) = 5.99$$

Op deze wijze kan laag voor laag en stap voor stap het proces worden doorerekend. De methode kan gemakkelijk in een eenvoudig computerprogramma worden vastgelegd of met behulp van een 'spreadsheet' worden opgelost.

Uit het rekenvoorbeeld blijkt ook direct het verschijnsel van de numerieke dispersie. Indien namelijk alleen convectief transport zou optreden, is het water uit het reservoir na één tijdstap doorgedrongen tot op een afstand $v_e \Delta t = 0.01$ m. Op de plaats van het eerste knooppunt ($x = 0.10$ m) moet de concentratie volgens dit proces, de eerste negen tijdstappen onveranderd blijven. Uit het voorbeeld blijkt ook, dat de concentratie in het tweede knooppunt (op 0.20 m afstand) al na 2 tijdstappen is gewijzigd. De scherpe overgang tussen ingevoerd en oorspronkelijk water wordt dus door het rekenproces vervaagd. Dit lijkt dus op het proces dat beschreven wordt door de convectie-dispersievergelijking.

De numerieke dispersie maakt het mogelijk om voor bepaalde situaties (eendimensionaal en bekende fluxdichtheid) een oplossing van de convectie-dispersievergelijking voor de stroming door een kolom te vinden, door de convectievergelijking (3.2-5) numeriek op te lossen en de numerieke dispersie gelijk te maken aan de fysische (werkelijk optredende) dispersie. Dit wordt nader toegelicht in bijlage IV.

Opgaven

5.3.1. Wat is de differentiebenadering voor de tweede afgeleide in een roosterpunt op een ondoorlatende verticale rand? Aanwijzing: ondoorlatend betekent $(\frac{\partial u}{\partial x})_i = 0$, gebruik slechts één

Taylor-reeks!

5.3.2. Schrijf nu de impliciete differentievergelijking op voor een randpunt zoals in opgave 5.3.1. voor vergelijking (5.3-1).

5.4 Oplossingsmethoden voor stelsels differentievergelijkingen

In paragraaf 5.3.1 zagen we dat het bij de toepassing van een impliciete methode nodig is om een *stelsel vergelijkingen* op te lossen. Om het schrijven van stelsels lineaire vergelijkingen te vergemakkelijken maakt men gebruik van de zogenaamde matrixnotatie. We schrijven daarvoor alle vergelijkingen van het type (5.3-6) onder elkaar in een zodanige rangschikking dat de onbekenden u_i^{n+1} - met hun bijbehorende coëfficiënten - voor eenzelfde waarde van i op dezelfde plaats staan. Door nu vervolgens alleen de coëfficiënten in dezelfde rangschikking te schrijven zoals ze in de vergelijkingen voorkomen, ontstaat een schema dat we een matrix noemen.

Door de introductie van matrixalgebra en de bijbehorende notatie (zie bijvoorbeeld De Gee, 1995, Grossman en Derrick, 1982) is het mogelijk het stelsel lineaire vergelijkingen op te vatten als de vermenigvuldiging van een coëfficiëntenmatrix en een kolomvector van onbekenden u_i^{n+1} waarbij i loopt van 1 tot k , het aantal knooppunten met onbekende waarden u_i .

De coëfficiëntenmatrix van (5.3-6) bevat in iedere rij slechts drie coëfficiënten ongelijk aan nul, alleen in de eerste en laatste rij komen twee coëfficiënten voor. Bovendien zien we in iedere rij dezelfde drie coëfficiënten verschijnen. Een matrix die behalve op de hoofddiagonaal per rij steeds een beperkt, maar gelijk, aantal coëfficiënten te zien geeft ter weerszijden van de diagonaalcoëfficiënt noemen we een bandmatrix. Een bandmatrix is een zogenaamde ijle matrix, omdat veel van de coëfficiënten nul zijn. Bij de oplossing wordt van die eigenschap gebruik gemaakt. De matrix van het stelsel (5.3-6) wordt ook wel een *tridiagonale matrix* genoemd. Bij tweedimensionale problemen kent de gediscretiseerde variabele twee indices voor de ruimtelijke coördinaten: u_{ij}^n , respectievelijk voor de x - en y -richting waarbij i loopt van 1 tot k en j van 1 tot l . Daardoor ontstaat een *pentagonale matrix*. Matrixvermenigvuldiging kan worden samengevat als:

$$A u = f \tag{5.3-7}$$

Vergelijking (5.3-7) kan worden opgelost met behulp van Gauss-eliminatie (directe methode) of iteratieve technieken (indirecte methode), zoals Jacobi of Gauss-Seidel. In dit dictaat worden de bijzonderheden, alsmede de voor- en nadelen van de verschillende numerieke rekenschema's, niet besproken. Men raadplege daarvoor tekstboeken (numerieke) wiskunde en/of literatuur over numerieke oplossingen van grondwaterstroming (Remson, Hornberger en Molz, 1972; Wang en Anderson, 1982; Koopmans, 1986). Bij het oplossen van dergelijke systemen kan men gebruik

maken van commercieel verkrijgbare standaard computerprogramma's ('software packages') zoals bijvoorbeeld *IMSL* en *Numerical Recipes*, in FORTRAN, PASCAL en C⁺ (Press, Flannery, Teukolsky en Vetterling, 1986, 1989, 1992, 1996).

Opgaven

5.4.1. a Waarom bevat de tridiagonale matrix slechts twee coëfficiënten in de eerste en laatste rij?
b. Schrijf de eerste en laatste regel van de tridiagonale matrix voor stroming naar twee evenwijdige kanalen, waarvan het waterpeil gegeven is.

5.4.2. Schrijf de differentievergelijking op voor een regulier knooppunt in een tweedimensionale stroming (in het kaartvlak) in een horizontale, gedeeltelijk afgesloten, watervoerende laag (zie opgave 2.6.3.).

5.4.3. (voor de liefhebbers!) a. Schrijf een computerprogramma in FORTRAN of PASCAL voor de stroming tussen twee evenwijdige kanalen zonder neerslag, zoals in figuur 2.7-1.

Gegeven: $k = 2.0 \text{ m d}^{-1}$, $L = 100 \text{ m}$ en $S = 0.1$. Oorspronkelijk is de waterspiegel in beide kanalen (en het freatisch vlak) 5.0 m boven de ondoorlatende laag, op $t = 0$ wordt het niveau aan de linkerzijde plotseling verlaagd tot 4.0 m. Bereken het verloop van de waterspiegel voor de eerste 30 dagen. Aanwijzing: Kies een expliciete methode $\Delta x = 10.0 \text{ m}$ en $\Delta t = 0.1 \text{ d}$.

b. Voer de berekening nu uit voor $\Delta t = 0.5 \text{ d}$ en $\Delta t = 1.0 \text{ d}$.

5.5 Modelleren van de convectie-dispersievergelijking in twee dimensies

5.5.1 Inleiding

De berekening van de concentratie van opgeloste stoffen in stromend grondwater is in werkelijkheid een driedimensionaal probleem. Door schematisatie van het stroombeeld met behulp van de Dupuit-veronderstelling is een tweedimensionale beschrijving in veel gevallen acceptabel. De convectie-dispersievergelijking (vgl. 4.5-4, met een bronterm) luidt:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} (D_{ij}^h \frac{\partial c}{\partial x_j}) - \frac{v_i}{n_e} c + \frac{c^* W^*}{n_e} \quad (5.5-1)$$

hierin is c de concentratie van opgeloste stoffen (kg m^{-3}), D_{ij}^h de hydrodynamische dispersiecoëfficiënt ($\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$) en W^* de volumeflux van een bron (positief) of put (negatief) ($\text{m}^3 \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$).

c^* is de concentratie van de bron of put. Bij onttrekking is c^* gelijk aan c , bij voeding een gegeven

waarde $c^*(x_p, t)$.

Uit deze vergelijking blijkt dat we de snelheidsverdeling moeten kennen, om haar op te lossen. De snelheidsverdeling (in ruimte en tijd) verkrijgt men door de differentiaalvergelijking die de stroming van de vloeistof beschrijft, op te lossen (zie vergelijking 2.5-5). Het vraagstuk van de verdeling van de concentratie bestaat dus uit twee differentiaalvergelijkingen die in combinatie moeten worden opgelost. Het computerprogramma lost daarom voor iedere tijdstap (meestal iteratief) eerst de stromingsvergelijking op en daarna de convectie-dispersie vergelijking.

In paragraaf 3.5 werd de beïnvloeding van de snelheidsverdeling door de dichtheid van de vloeistof besproken. Indien dit effect een rol speelt, is een derde vergelijking nodig om het probleem op te lossen, namelijk met de relatie tussen de dichtheid en de concentratie, .

5.5.2 De numerieke oplossing van de convectie-dispersie vergelijking

Bij de numerieke oplossing van de convectievergelijking in paragraaf 5.3, zagen we al dat de numerieke methode geplaagd wordt door het verschijnsel van numerieke dispersie. Dit kan nader worden toegelicht door de termen in vergelijking (5.2-1), waarin de eerste en tweede orde afgeleide naar x voorkomen, met elkaar te vergelijken.

Uit de Taylor-reeks ontwikkeling voor c_{i+1} volgt namelijk:

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{c_{i+1} - c_i}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) - O(\Delta x^2) \quad (5.5-2)$$

waarin $O(\Delta x^2)$ de 'afbreekfout' van de orde $(\Delta x)^2$ voorstelt.

De eerste term van de rechterzijde is de differentieëbenadering voor de eerste afgeleide, de overige termen vertegenwoordigen de fout die daarbij wordt gemaakt. De tweede term rechts, die dezelfde gedaante heeft als de dispersieterm, is een orde groter dan de fout in de dispersieterm, omdat daarin $(\Delta x)^2$ voorkomt. Zelfs al is de dispersiecoëfficiënt gelijk aan nul, dan treedt toch numerieke dispersie op als gevolg van het rekenproces. De 'numerieke dispersiecoëfficiënt' is daarbij gelijk aan $\frac{1}{2} v_{ex}(\Delta x - v_{ex}\Delta t)$ ¹⁾, zodat de dispersie direct afhangt van de keuze van de roosterlengte Δx en de tijdstaplengte Δt . De natuurlijke dispersiecoëfficiënt is gelijk aan $\alpha_L v_e$, waarbij α_L in Nederland varieert van circa 10 cm (IJsselmeerpolders) tot 1 à 2 m (Pleistoceen zandpakket). Om de numerieke dispersie te beperken, zou het nodig zijn de roosterafstanden in dezelfde orde van grootte te houden. Een veldprobleem met afmetingen van enkele kilometers leidt dan tot zeer

¹⁾ Zie bijlage IV.

grote hoeveelheden rekenwerk.

De problemen die zich voordoen bij de oplossing van vergelijkingen van het type (5.5-1) hebben te maken met het gemengde parabolische en hyperbolische karakter. Wanneer $v_i = 0$ en de dispersiecoëfficiënt is constant, dan wordt vergelijking (5.5-1) gereduceerd tot een parabolische vergelijking. Dit type kan numeriek met succes worden opgelost (zie Torfs, 1993; Koopmans, 1986). Indien echter de dispersiecoëfficiënt D_{ij}^h zeer klein is, overheerst het hyperbolische karakter van de vergelijking en is de oplossing veel moeilijker, door de numerieke dispersie. Een methode waarbij geen numerieke dispersie wordt geïntroduceerd is de 'methode van de karakteristieken' die hieronder wordt toegelicht.

De tweedimensionale vorm van vergelijking (5.5-1), met constante D_x^h en D_z^h en een onsamendrukbare vloeistof, zonder brontermen) luidt:

$$D_x^h \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_z^h \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - \frac{v_x}{n_e} \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{v_z}{n_e} \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial c}{\partial t} \quad (5.5-3)$$

Aangezien de zogenaamde materiële afgeleide van de concentratie (dat is de verandering zoals waargenomen door een waarnemer die met de vloeistof mee beweegt) geschreven kan worden als:

$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{v_x}{n_e} \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{v_z}{n_e} \frac{\partial c}{\partial z} + \frac{\partial c}{\partial t} \quad (5.5-4)$$

waarbij:

$$\frac{v_x}{n_e} = \frac{dx}{dt} \text{ en } \frac{v_z}{n_e} = \frac{dz}{dt} \quad (5.5-5)$$

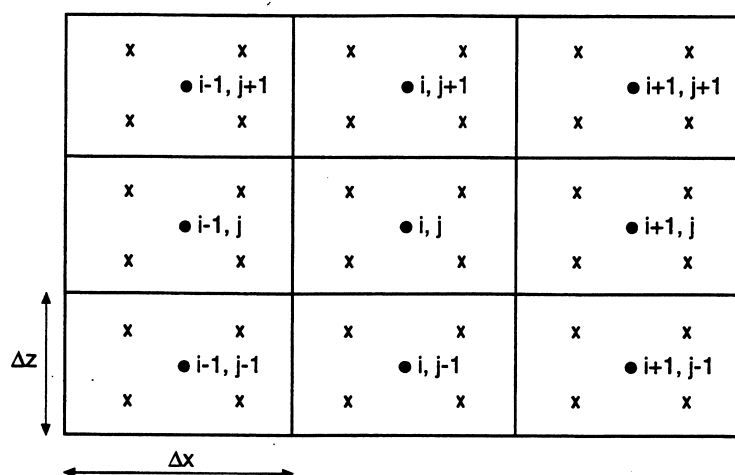
kunnen we (5.5-3) herschrijven als:

$$\frac{Dc}{Dt} = D_x^h \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_z^h \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \quad (5.5-6)$$

De rechterzijde van deze vergelijking berekent de *concentratieverandering alleen ten gevolge van dispersie*. De afrondingsfout (dat wil zeggen de som van de weggelaten termen uit de Taylor-reeks)

is voor beide termen van dezelfde orde van grootte.

Bij de methode van de karakteristieken wordt gebruik gemaakt van een normaal roosternet plus een aantal bewegende punten. Rond elk roosterpunt wordt een rechthoek (aannemende dat we met een rechthoekig rooster te doen hebben) geconstrueerd, waarvan het roosterpunt het middelpunt is. In iedere rechthoek worden een aantal bewegende punten gekozen, die aan het begin van de berekening ($t = 0$) regelmatig over de rechthoeken verdeeld zijn. Eén en ander wordt verduidelijkt door figuur 5.5-1.



Figuur 5.5-1 Vaste roosterpunten (•) en in de daarbij behorende rechthoeken de beginpositie van de bewegende punten (x).

Aan alle bewegende punten in één rechthoek wordt dezelfde beginconcentratie toegekend (aangeduid als c_p) en wel de concentratie van het bijbehorende roosterpunt, dus $c_p^n = c_{i,j}^n$.

Om te beginnen, wordt voor de eerste tijdstap de differentiaalvergelijking die de stroming beschrijft, opgelost met behulp van de begin- en randvoorwaarden. Voor alle roosterpunten worden vervolgens v_x en v_z berekend, waarna voor alle bewegende punten (genummerd 1 t/m p) de nieuwe positie wordt berekend. Hierbij worden de snelheidscomponenten van een bewegend punt gelijk gesteld aan de snelheidscomponenten van het dichtstbijzijnde roosterpunt. Dat wil dus zeggen dat v_x en v_z voor alle bewegende punten in één rechthoek gelijk zijn aan de snelheden in het bijbehorende roosterpunt.

Nadat de nieuwe posities van alle bewegende punten bekend zijn, worden de concentraties $c_{i,j}^{n+1}$ van alle rechthoeken gevonden als het gemiddelde van de nu binnen de rechthoeken gelegen bewegende punten:

$$c_{ij}^{*n+1} = \frac{\sum c_p^{n+1}}{m}$$

$(c_{ij}^{*n+1} - c_{ij}^n)$ is dus de concentratie verandering ten gevolge van convectie

Vervolgens berekent men de verandering van concentratie *als gevolg van dispersie voor iedere rechthoek* conform vergelijking (5.5-5):

$$\Delta c_{ij}^{*n} = \Delta t (D_x^h \Delta_x^2 c_{ij}^{*n} + D_z^h \Delta_z^2 c_{ij}^{*n}) \quad (5.5-7)$$

waarin $\Delta_x^2 c_{ij}$ en $\Delta_z^2 c_{ij}$ verkorte schrijfwijzen zijn van de centrale differentiebenaderingen

Alle punten binnen een rechthoek ondergaan nu dezelfde concentratieverandering. De vaste punten krijgen dus een concentratie:

$$c_{ij}^{n+1} = c_{ij}^{*n} + \Delta c_{ij}^{*n} \quad (5.5-8)$$

en de bewegende punten

$$c_p^{n+1} = c_p^n + \Delta c_{ij}^{*n} \quad (5.5-9)$$

Uit bovenstaande vergelijkingen blijkt, dat de concentratie van de vaste punten zowel door convectie als door dispersie wordt beïnvloed. De concentratie van de bewegende punten verandert alleen door dispersie.

Hiermede is één tijdstap compleet en kan worden begonnen aan de volgende.

Dispersie wordt bij deze methode dus expliciet berekend met behulp van vergelijking (5.5-7), zodat de stabiliteitsvoorwaarde bepaalde beperkingen op zal leggen aan de tijdstapgrootte. Bij afwezigheid van dispersie ($D_x^h = D_z^h = 0$) en verwaarlozing van diffusie, zullen de concentraties van de bewegende punten c_p^n niet veranderen, zodat discontinuïteiten en sterke verschillen in concentratie blijven bestaan, hetgeen duidt op de afwezigheid van numerieke dispersie.

Het aantal bewegende punten per rechthoek moet ongeveer gelijk blijven, omdat per rechthoek een constant volume wordt aangenomen. Indien bewegende punten een rand overschrijden worden ze uit de berekening verwijderd, in de buurt van een rand waarover vloeistof het stroomveld

binnenstroomt moeten nieuwe bewegende punten worden geïntroduceerd.

5.5.3 Modellen voor stoftransport

De methode van de karakteristieken is door Konikow en Bredehoeft (1978) toegepast in het model MOC voor de simulatie van het transport van opgeloste stoffen in een watervoerende laag; evenwel zonder adsorptie of chemische reacties. Het is een tweedimensionaal e.d. model.

Voor het vloeistoftransport gebruiken de auteurs de volgende vergelijking:

$$\frac{\partial}{\partial x} (T_{xx} \frac{\partial H}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (T_{yy} \frac{\partial H}{\partial y}) = S \frac{\partial H}{\partial t} - W(x,y,t) \quad (5.5-10)$$

Hierin zijn T_{xx} en T_{yy} de transmissibiliteit respectievelijk in de x - en y -richting, S is de bergingscoëfficiënt en $W(x,y,t)$ is het netto accres (volume flux per m^2), dat wil zeggen W is positief bij voeding en negatief bij onttrekking.

Het transport van de opgeloste stoffen wordt beschreven door:

$$\frac{\partial bc}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} (b D_{ij}^h \frac{\partial c}{\partial x_j}) - \frac{\partial}{\partial x_i} (bc \frac{v_i}{n_e}) + \frac{c^* W}{n_e} \quad (5.5-11)$$

waarin b de verzadigde dikte is van de watervoerende laag. c^* is de concentratie van de voeding of onttrekking. Hoewel de auteurs hier geen verschil tussen maken, is het duidelijk dat in het laatste geval $c^* = c$, maar in het geval van voeding zal c^* een gegeven waarde zijn. Omdat in enigszins dikke watervoerende pakketten de elasticiteit in het algemeen niet verwaarloosd mag worden

kunnen ook de termen die $\frac{\partial v_i}{\partial x_i}$ bevatten, niet worden weggelaten zoals in vergelijking (5.5-2). De

verandering van b als functie van t kan in vrijwel alle gevallen verwaarloosd worden, in de toelichting op het model MOC wordt deze term nog wel 'meegenomen'.

Sanford en Konikow (1985) hebben het model MOC aangepast voor het geval de concentratieveranderingen van invloed zijn op de dichtheid van de vloeistof (MOC-DENSE). In zulke situaties is de stijghoogte geen bruikbare variabele. Men moet nu de druk en de dichtheid als variabelen kiezen en voor de wet van Darcy de formulering uit paragraaf (1.6-3) gebruiken:

$$\mathbf{v} = - \frac{\kappa}{\eta} (\nabla p + \rho g \nabla z) \quad (5.5-15)$$

waarin κ de intrinsieke doorlatendheid (m^2) is en η de dynamische viscositeit ($\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-1}$).

Voor vloeistofstroming in drie dimensies door een poreus medium (met een star korrelskelet), moet deze vergelijking worden gecombineerd met de massabalans voor de vloeistof:

$$-\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = n \frac{\partial \rho}{\partial t} - W^* \rho^* g \quad (5.5-16)$$

waarin W^* de volumeflux per volume is van een eventuele bronterm (d^{-1}) en ρ^* de dichtheid (kg m^{-3}) van de flux W^* .

De dichtheid kan worden beschouwd als een functie van de druk en de concentratie van opgeloste stoffen. Vaak worden daarvoor semi-empirische relaties gebruikt, zie vergelijking (3.5-7). Ook de viscositeit van de oplossing kan als functie van de concentratie worden berekend, zie paragraaf 3.5. De massabalans van de opgeloste stof resulteert in de differentiaalvergelijking voor convectief-dispersief transport, vergelijking (5.5-1). Door invullen van (5.5-15) in (5.5-16) en (5.5-1) ontstaan drie vergelijkingen die simultaan moeten worden opgelost om de ruimtelijke en temporele verdeling van de drie onbekenden (p , ρ en c) te vinden.

Naast MOC-DENSE zijn er nog veel andere modellen ontwikkeld om dichtheidafhankelijke stroming te beschrijven. Wij noemen hier: METROPOL-3, SUTRA en FEMWATER.

Hoewel de theorie van deze modellen is gebaseerd op het bovenstaande, is het stelsel vergelijkingen dat in ieder van de modellen wordt opgelost niet identiek. Het verdient daarom aanbeveling om voor het gebruik de toegepaste formuleringen zorgvuldig te bestuderen.

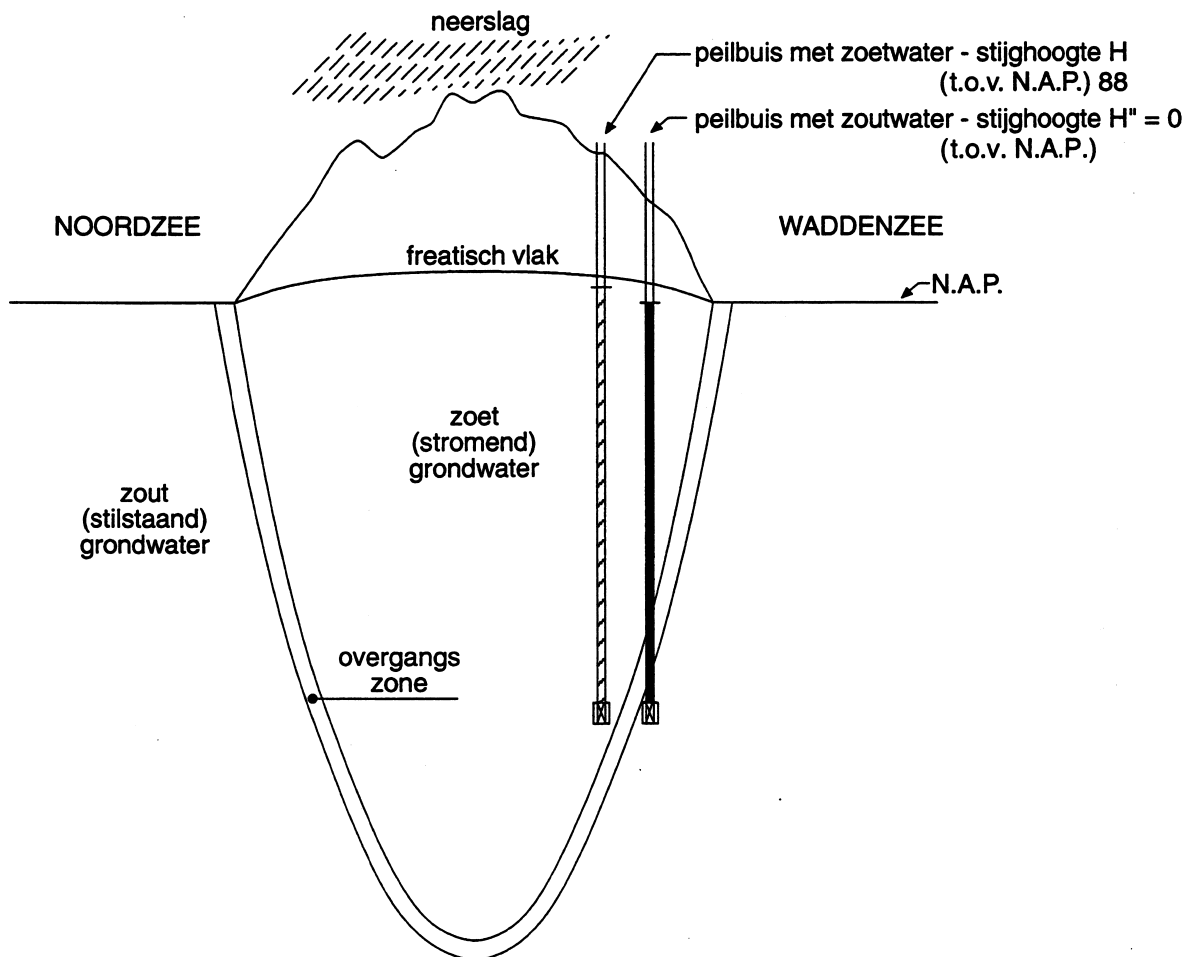
6 ZOET EN ZOUT GRONDWATER

6.1 Het grensvlak tussen zoet en zout water

6.1.1 Inleiding

In kustgebieden vindt men vaak zoet grondwater boven zwaarder, zout water. Tussen beide watersoorten bevindt zich een brakke overgangszone, maar deze is onder natuurlijke omstandigheden meestal vrij dun, minder dan 10 m en doorgaans slechts enkele meters dik.

Wij kunnen daarom bij benadering aannemen dat er een scherp grensvlak tussen zoet en zout water bestaat. In duingebieden langs de zeekust komt het zoete water voor als een lens van stromend grondwater, die gevoed wordt door het neerslagoverschot en die 'drijft' op zout water (Figuur 6.1-1).



Figuur 6.1-1 Zoet en zout grondwater in een duingebied (niet op schaal).

Zoet en zout water zijn in werkelijkheid mengbare vloeistoffen. De overgangszone kan dan ook worden berekend met behulp van de convectie-dispersie vergelijking. Omdat de overgangszone vaak relatief dun is, kan het probleem worden opgevat als een twee-vloeistoffen probleem met een abrupt grensvlak. De positie van het grensvlak is a priori onbekend en moet als onderdeel van de oplossing worden gevonden. Dit is analoog aan de berekening van de vrije water spiegel, die het grensvlak vormt tussen water en lucht. Bij de gevallen van grondwaterstroming met een vrije waterspiegel die in dit dictaat worden behandeld (hoofdstuk 2), wordt alleen rekening gehouden met de stroming van het water. Dit betekent dat we hebben aangenomen dat de lucht in rust is, hetgeen bij stroming door poreuze media zeker geoorloofd is. Voorts werden alleen voorbeelden uitgewerkt waarbij de Dupuit-aanname geldt, zodat slechts één randvoorwaarde ($p = 0$) hoeft te worden gebruikt.

De stroming van zoet en zout water is in werkelijkheid een drie-dimensionaal probleem dat, evenals andere stromingsvraagstukken, kan worden gereduceerd tot een tweedimensionaal probleem in een doornede als er sprake is van verticale symmetrievlakken, of tot een twee-dimensionaal probleem in het kaartvlak als er sprake is van de Dupuit-aanname. Is er sprake van beide, dan reduceert het probleem tot het type eendimensionale vraagstukken dat in hoofdstuk 2 wordt behandeld.

Wordt de stroming van zoet en zout water opgevat als een tweedimensionale stroming in een dwarsdoorsnede met een scherp grensvlak, dan geldt in ieder van de vloeistoffen vergelijking (2.5-5):

$$k \nabla^2 H = S_s \frac{\partial H}{\partial t} \quad (6.1-1)$$

$$k' \nabla^2 H' = S_s \frac{\partial H'}{\partial t} \quad (6.1-2)$$

In vergelijking (6.1-2) heeft het ' teken betrekking op het zoute water. Aangenomen werd dat de specifieke bergingscoëfficiënt in beide gevallen gelijk is. Uit vergelijking (1.6-11) volgt dat de doorlatendheid voor zoet en zout water verschillend is, omdat de dichtheid en de viscositeit een functie zijn van de zoutconcentratie. In de praktijk is de onzekerheid van de doorlatendheidsbepaling zo groot dat men dikwijls ook geen onderscheid maakt tussen k en k' . Het stelsel vergelijkingen (6.1-1) en (6.1-2) met de bijbehorende randvoorwaarden, moet simultaan worden opgelost. Omdat de positie van het grensvlak een onderdeel van de oplossing vormt, is het

noodzakelijk dat er ter plekke twee randvoorwaarden bekend zijn. Bij een scherp grensvlak is de druk p continu. De voorwaarden zijn:

- de vloeistofdruk aan weerszijden van het grensvlak is gelijk ($p = p'$);
- de flux loodrecht op het grensvlak is gelijk ($v_n = v'_n$).

In het onderstaande zullen alleen de vergelijkingen worden behandeld waarin sprake is van hydrostatische drukverdeling. Dat betekent dat voorzover er stroming is, deze alleen in de horizontale richting verloopt (Dupuit-stroming), zie ook opgave 2.6.1.

6.2.1 Het beginsel van Badon Ghyben en Herzberg

We nemen in eerste instantie aan dat het zoute water in rust verkeert. Uit de stilstand van het diepe zoute water volgt, dat daarin de stijghoogte overal dezelfde moet zijn. Deze stijghoogte is (in beginsel) gelijk aan het gemiddelde zeeniveau (in Nederland N.A.P.).

Het zoete water stroomt naar zee. Omdat ook het grensvlak (aan de zoetwaterzijde) een stroomlijn van het systeem is, wordt dit vlak regelmatig 'schoongespoeld' (zij het met een zeer kleine stroomsnelheid). Zout, dat door diffusie of door transversale dispersie het grensvlak passeert, wordt daardoor effectief verwijderd, zodat de overgangszone steeds tamelijk dun blijft.

In tegenstelling tot de druk, treedt in de potentialen en ook in de stijghoogten bij het grensvlak een sprong op: ψ , p^* en H zijn *discontinu*.

Een stijgbuis met een filter juist onder het grensvlak (de plaatshoogte ten opzichte van NAP, z_g , is dus negatief) zal zich vullen met zout water. Dit water heeft een dichtheid $\rho' \approx 1025 \text{ kg m}^{-3}$ en stijgt tot de hoogte H' . Als het zoute water in rust is en in contact staat met de zee, dan geldt $H' = \text{NAP} + 0.00 \text{ m}$.

Een stijgbuis met een filter juist boven het grensvlak (ook met plaatshoogte z_g) zal zich vullen met zoet water (dichtheid $\rho \approx 1000 \text{ kg/m}^3$) en evenwicht bereiken bij een stijghoogte H ten opzichte van NAP).

Bij het grensvlak geldt nu voor de druk p :

- boven het grensvlak (zoet water) $p_{\text{zoet}} = \rho g(H - z_g)$
- onder het grensvlak (zout water) $p_{\text{zout}} = \rho' g(H' - z_g)$

Omdat ter weerszijden de druk gelijk is, volgt door gelijkstelling:

$$z_g = \frac{\rho' H' - \rho H}{\rho' - \rho} = \frac{\rho'}{\Delta \rho} H' - \frac{\rho}{\Delta \rho} H \quad (6.1-3)$$

Kiezen we het zeeniveau als referentievlak dan is $H' = 0$ en geldt:

$$z_g = h' = - \frac{\rho}{\Delta \rho} H \approx - 40 H \quad \text{omdat } \rho \approx 1000; \rho' \approx 1025 \text{ kg m}^{-3}$$

waarin z_g de ligging is van het grensvlak, h' de lengte van de zoetwaterkolom onder het zeeniveau en H de zoetwater-stijghoogte.

Is de bodem goed doorlatend, dan is H (gemeten bij het grensvlak) niet erg verschillend van de hoogte van het freatisch vlak. De eerste onderzoekers van deze verschijnselen, Badon Ghyben (1889) in Nederland en Herzberg (1901) in Duitsland, waren dan ook van mening, dat de relatie ook geldig was als H de hoogte is van het freatisch vlak in het duingebied.

Vaak komen er in het zoete duinwater verschillen in stijghoogte voor in de verticaal, en is het freatisch vlak gelegen boven de stijghoogte van het zoete water bij het grensvlak. Dit wordt veroorzaakt door de neerwaartse stroming van het zoete water in combinatie met de aanwezigheid van weinig doorlatende lagen in de bodem.

Voorbeeld: Als in de duinen het freatisch vlak ligt op NAP+3.00 m, dan zou men volgens Badon Ghyben en Herzberg het grensvlak mogen verwachten op NAP-120 m; in werkelijkheid ligt het wat minder diep (op Terschelling bijvoorbeeld op ongeveer NAP-100 m).

De berekening van de stroming in dergelijke systemen en de invloed die waterwinning daarop uitoefent, worden hier niet uitvoerig behandeld. Er bestaat daarover een uitgebreide literatuur, zie bijvoorbeeld het college *Geohydrologie*, Faculteit Civiele Techniek en Geowetenschappen, TUD en de SWIM (Salt Water Intrusion Meeting) bijeenkomsten.

In de volgende paragraaf worden enkele voorbeelden gegeven.

6.2 Winning van water uit kustgebieden

In de Nederlandse kustduinen kwam de hierboven geschetste toestand omstreeks 1850 nog overal voor. Behalve op de Waddeneilanden is zij nu zeer zeldzaam geworden.

In 1853 begon de stad Amsterdam met de winning van het zoete duinwater, aanvankelijk door middel van in het duin gegraven open kanalen, die in een verzamelkom uitmondten. Door deze

onttrekking begon het freatisch vlak zeer langzaam te dalen en het zoet-zoutgrensvlak relatief veel sneller te stijgen. Wegens de genoemde daling en vooral wegens het inmiddels sterk toegenomen waterverbruik, werd in 1917 begonnen met het oppompen van zoet water op wat grotere diepte, gewonnen uit putten. Door de steeds verder gaande daling van het freatisch vlak verdroogden de oorspronkelijk natte duinvalleien en de kenmerkende flora verdween. Daarentegen werd drinkwater van uitstekende kwaliteit verkregen.

Omdat er al spoedig meer water aan het duin werd onttrokken dan de aanvulling door de neerslag, werd op de bestaande, aanvankelijk zeer grote voorraad ingeteerd. Bovendien bracht de verstoring van de natuurlijke stromingen een verandering teweeg, die leidde tot een sterke verbreding van de brakke overgangszone tussen zout en zoet water, vooral in de nabijheid van de winningsmiddelen. Omstreeks 1950 begon water uit deze mengzone sommige winputten onbruikbaar te maken, waardoor deze moesten worden gesloten.

De oplossing werd gevonden in de aanvoer van water uit de Rijn via een transportleiding van Jutfaas (Nieuwegein) naar Vogelenzang. Het voorgezuiverde rivierwater wordt via kanalen en plassen in de duinen geïnfiltreerd. Door de aanvoer van dit 'vreemde' water keerde weliswaar de vroegere natte toestand van de duinvalleien terug, maar niet de bijbehorende flora; het rivierwater is daarvoor veel te voedselrijk.

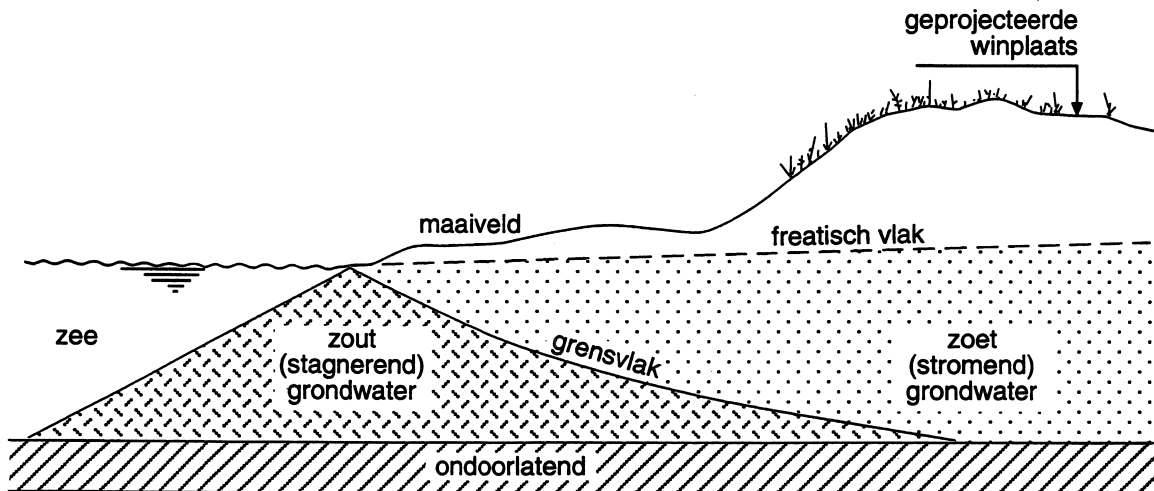
Wel werd door het aangelegde systeem een betrouwbare en blijvende watervoorziening bereikt. Veel ongewenste stoffen in het rivierwater worden bij de passage door de bodem geadsorbeerd of afgebroken.

Wegens de nadelige invloed op de duinflora overweegt men nu de infiltratie van het rivierwater niet langer aan het oppervlak te laten geschieden, maar op vrij grote diepte, door middel van persputten. Om verstopping van dergelijke putten te voorkomen is evenwel een zeer grondige voorzuivering van het te infiltreren water nodig.

Ook bij andere steden in West-Nederland trad een dergelijke ontwikkeling op. De Duinwaterleiding van 's Gravenhage begon in 1874 met de winning van duinwater bij Scheveningen en in 1955 met het transport van water dat bij Bergambacht uit de Lek werd ingelaten. Wegens de toenemende vervuiling van de Rijn is men in 1976 overgegaan op het gebruik van water uit de Afgedamde Maas in de gemeente Brakel, dat na defosfateren en voorzuivering in de duinen wordt gebracht en na een korte verblijftijd weer wordt teruggewonnen. De daarbij in de duinen gevormde voorraad grondwater dient daarbij als buffervoorraad voor tijden dat de Maas nauwelijks afvoer heeft (zoals in een droge zomer het geval is).

In andere landen komen overeenkomstige situaties voor. Door de geringe verdamping van onbegroeid zand zijn (kust)duinen goede verzamelaars van water, zelfs in streken met zeer weinig neerslag. Aan duingebieden kan dan ook in de regel goed water (zij het in beperkte hoeveelheden) worden onttrokken.

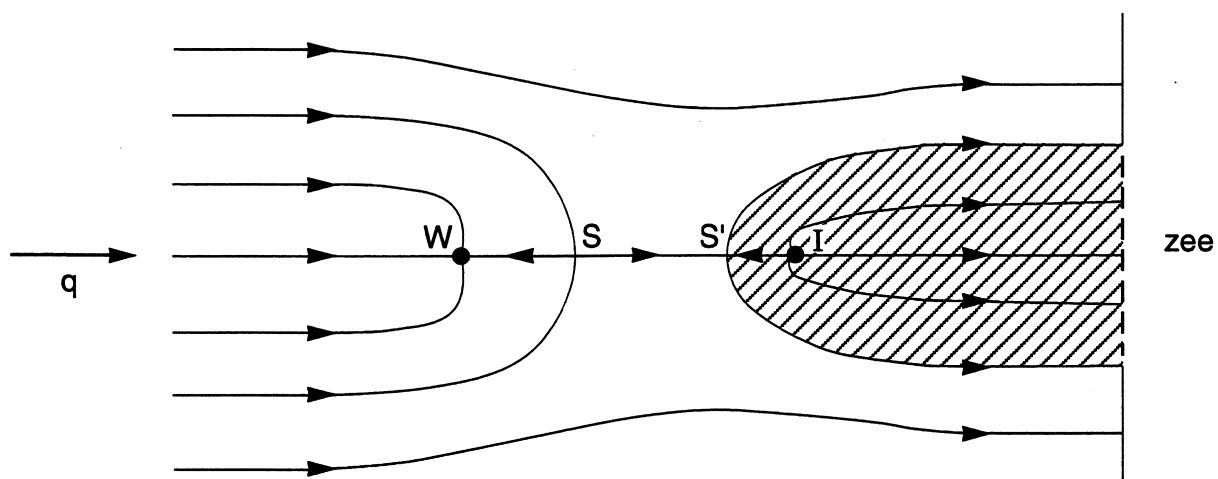
Ook in kustgebieden zonder duinen komt het dikwijls voor dat een aquifer, die in het binnenland wordt gevoed, zoet water naar zee voert. In een dergelijke aquifer vormt zich dan een zout-wig (Figuur 6.2-1), die bij onttrekking van zoet water zich landinwaarts gaat bewegen en die op den duur de winplaats kan bedreigen. Voorbeelden van dergelijke *zoutintrasie* zijn van vele kustgebieden bekend.



Figuur 6.2-1 Kustaquifer met zoutwig.

Zout-intrusie kan worden tegengegaan door tussen de winplaatsen en de kust zoet water te infiltreren. Doet men dit op de juiste wijze, dan kan men bereiken dat dit geïnfiltreerde water in zijn geheel naar zee stroomt. Van het zoete water uit het achterland kan dan echter een groter deel worden gewonnen dan eerst. Bij deze werkwijze liggen er stagnatiepunten die een hydrologische afscherming vormen tussen het geïnfiltreerde water en de winputten (Figuur 6.2-2). Het toegevoegde water mag daarom van slechte kwaliteit zijn, mits zoet.

In Israël infiltreert men voor deze afscherming van het zeewater het afvalwater van Tel Aviv in de kustduinen. Ver landinwaarts pompt men schoon zoet water op, afkomstig van infiltrerend regenwater in het binnenland.



Figuur 6.2-2 Winput (W) in een kustgebied, met infiltratieput (I) ter voorkoming van verzilting.

Bovenstaande werkwijze is een voorbeeld van een 'hydrologisch scherm'. Meestal is het ondoenlijk een watervoerende laag met een damwand of op andere wijze af te sluiten tegen de verspreiding van een verontreiniging. Door het tot stand brengen van stroming, met stagnatiepunten op de gewenste plaatsen, kan echter veel worden bereikt.

7 DE KWALITEIT VAN HET GRONDWATER IN NEDERLAND

7.1 Inleiding

De kwaliteit (de chemische samenstelling) van grondwater wordt bepaald door de kwaliteit van het infiltrerende water én door de biologische-, fysische- en chemische processen die plaatsvonden ná infiltratie in de bodem. De natuurlijke infiltratie wordt in de meeste gevallen gevoed door regenwater, maar kan ook uit zeewater en rivierwater komen. Daarnaast is bij sedimentaire afzettingen het zogenaamde formatiewater van belang. Formatiewater is het water dat aanwezig was tijdens de afzetting. Zo hebben mariene sedimenten van oorsprong uiteraard zeewater bevat en fluviatiele sedimenten rivierwater.

Het grondwater in grote delen van West-Nederland is deels van mariene oorsprong en daardoor niet geschikt voor menselijke en dierlijke consumptie. Vóórdat de stad Amsterdam in december 1853 begon met de distributie van duinwater, werd ruim twee eeuwen lang per schuit drinkwater van elders, onder andere uit de Vechtstreek, aangevoerd. De bierbrouwers hadden overigens al in 1480 besloten om niet langer gebruik te maken van het Amsterdamse grachtwater en de voor hen zo belangrijke grondstof van elders aan te voeren (Groen, 1978).

In zandstreken is het grondwater van nature meestal van uitstekende kwaliteit. Meinardi (1974, 1988) kenschetst de algemene chemische kenmerken van het water in de stuwwallen van de Veluwe als volgt:

- het Ca^{++} gehalte varieert van 2 tot 20 mg l^{-1} en het Mg^{++} gehalte bedraagt 1 à 2 mg l^{-1} ;
- het chloride gehalte ligt vrijwel steeds tussen 7 en 15 mg l^{-1} en het sulfaatgehalte tussen 5 en 20 mg l^{-1} ;
- het ijzergehalte is vaak zeer laag en meestal minder dan 1 mg l^{-1} .

De groei van de bevolking en het streven naar meer welvaart (economische groei) hebben in de laatste decennia van de twintigste eeuw een grote toename van de uitstoot van verontreinigende stoffen veroorzaakt. Daardoor wordt sinds ongeveer 1970, ook in Nederland de grondwaterkwaliteit ernstig bedreigd. Aanvankelijk waren het vooral puntbronnen die zorgen baarden (lozing van industrieel afvalwater, percolatiewater uit chemische afvalstorten en dergelijke). Hoewel deze gevaren nog niet zijn geweken, is tegenwoordig duidelijk dat de grootste bedreiging uitgaat van de zogenaamde diffuse bronnen.

De diffuse verontreinigingen worden onder andere veroorzaakt door intensieve landbouw- en veeteelt methoden. Zij veroorzaken een overschot aan dierlijke mest, terwijl ook het gebruik van

bestrijdingsmiddelen sterk is toegenomen. Rookgassen (dioxine) en verkeer leveren echter ook een bijdrage aan de diffuse verontreinigingen.

In de volgende paragraaf wordt een kort overzicht gegeven van enkele belangrijke verontreinigende stoffen. Deze kunnen overwegend afkomstig zijn uit diffuse bronnen of uit puntbronnen. Het is in het kader van dit college niet de bedoeling deze zeer uitgebreide materie volledig en uitvoerig te behandelen.

In de laatste paragraaf van dit hoofdstuk zal worden aangeduid, hoe men door hydrologische maatregelen de verspreiding van ongewenste stoffen in het grondwater kan tegengaan.

7.2 Verontreinigende stoffen in het grondwater

7.2.1 Stoffen voornamelijk afkomstig uit diffuse bronnen

- a) *Ijzer en mangaan* komen van nature vaak in ongewenst hoge gehalten voor in anaëroob grondwater, voornamelijk als ferro- en mangano-ion. Bij de winning van grondwater is dan ook veelal ontijzering of ontmanganing noodzakelijk. Dit geschiedt door het water in de lucht te versproeien, waarbij oxydatie optreedt; de gevormde ferri- en manganverbindingen worden daarna afgefilterd.

Zeer ijzerarm grondwater komt voor in de stuwwallen van de Veluwe (en elders). Hier ligt het freatisch vlak enkele tientallen meters beneden het maaiveld en als gevolg daarvan verblijft een infiltrerende waterdruppel enkele maanden tot jaren in de dikke onverzadigde zone van de bodem. Al die tijd is het in aanraking met zuurstof, waardoor vrijwel alle oxydeerbare bestanddelen worden omgezet.

- b) *Chloride* komt onder andere mee met de neerslag (cyclisch zout, uit zee afkomstig en in de lucht gebracht door verstuiven van zeewater bij harde wind). Het is ook afkomstig van bemesting, onder andere met kalizouten. Door dit laatste zijn de Cl⁻-gehalten in grondwater onder landbouwgebieden hoger dan onder natuurterreinen. Toch blijven de Cl⁻-gehalten, die aldus worden veroorzaakt, ver beneden de normen voor drinkwater en voor landbouwkundige toepassingen.

Over het voorkomen van brak tot zout grondwater in West-Nederland (transgressie van Calais) en in de duinen (zoet water boven zout) is reeds gesproken.

- c) *Nitraat* veroorzaakt thans problemen bij de drinkwatervoorziening. Te hoge giften aan dierlijke mest, vooral in de zandstreken van Nederland, geven na oxydatie in de bovengrond zoveel nitraat, dat dit lang niet geheel door het gewas kan worden benut. Het

overschot spoelt uit en bereikt het grondwater; daardoor kan de norm van $50 \text{ mg l}^{-1} \text{ NO}_3^-$ -ion, geldig voor drinkwater, worden overschreden.

Als in de bodem weinig reducerende stoffen aanwezig zijn, dan gedraagt nitraat zich als een conservatieve stof. Door organische stof en mogelijk ook door ferro-ionen kan NO_3^- echter worden gereduceerd tot stikstofgas, N_2 (denitrificatie). Doordat dit proces op de ene plaats wel, op de andere niet optreedt, is het voorkomen van nitraten in grondwater bijzonder onregelmatig. Men vindt de hoogste concentraties onder zwaar bemest bouwland (maisakkers) op zandgrond met een diepe grondwaterstand. Dan oefenen de reducerende processen weinig invloed uit.

Op klei- en veengronden en ook bij grasland met een ondiepe grondwaterstand zijn de gehalten veel lager, ook bij zware bemesting. Enkele pompstations worden thans door te hoge NO_3^- -gehalten met sluiting bedreigd. Een voorbeeld is pompstation Montferland, gelegen op een stuwwal, dat niet-gereduceerd grondwater wint.

Een goede en goedkope oplossing voor verwijdering van nitraat is onder andere ontwikkeld aan de Wageningse universiteit.

- d) *Kalium*, eveneens afkomstig van bemesting en vaak samengaan met hoge nitraatgehalten.

In tegenstelling tot NO_3^- wordt K^+ niet chemisch omgezet, maar het wordt wel in vrij sterke mate geadsorbeerd aan kleideeltjes en aan organische stof (uitwisseling met andere kationen). Het K^+ -ion is dan ook in klei- en veengronden weinig mobiel; in zandgronden komen soms zeer hoge gehalten voor.

- e) *Fosfaat* wordt in de bovengrond sterk vastgehouden, ook in zandgrond. Bij organische bemesting is een klein gedeelte van het fosfaat (ongeveer 1%) zeer mobiel; het is gebonden aan vrij kleine organische moleculen en ongeveer even beweeglijk als chloride.

Het meeste fosfaat wordt echter in de bodem gebonden aan Ca, Fe en Al. Sommige van deze reacties verlopen slechts langzaam, waardoor "pseudo-evenwichten" ontstaan. Op den duur echter geraakt de bodem verzadigd en treedt doorbraak op naar het grondwater. Deze "doorslag" van fosfaat is onder andere in de Haagse Waterleidingduinen waargenomen; hier is de afstand tussen de infiltratieplassen voor rivierwater en de winningsmiddelen slechts enkele tientallen meters en de verblijftijd in het duin vrij kort. Den Haag is daarop overgegaan tot defosfateren van het aangevoerde water.

- g) *Restanten van bestrijdingsmiddelen* of omzettingsproducten daarvan kunnen tot in het grondwater doordringen. Voorbeelden daarvan zijn bekend van Long Island (bij New York)

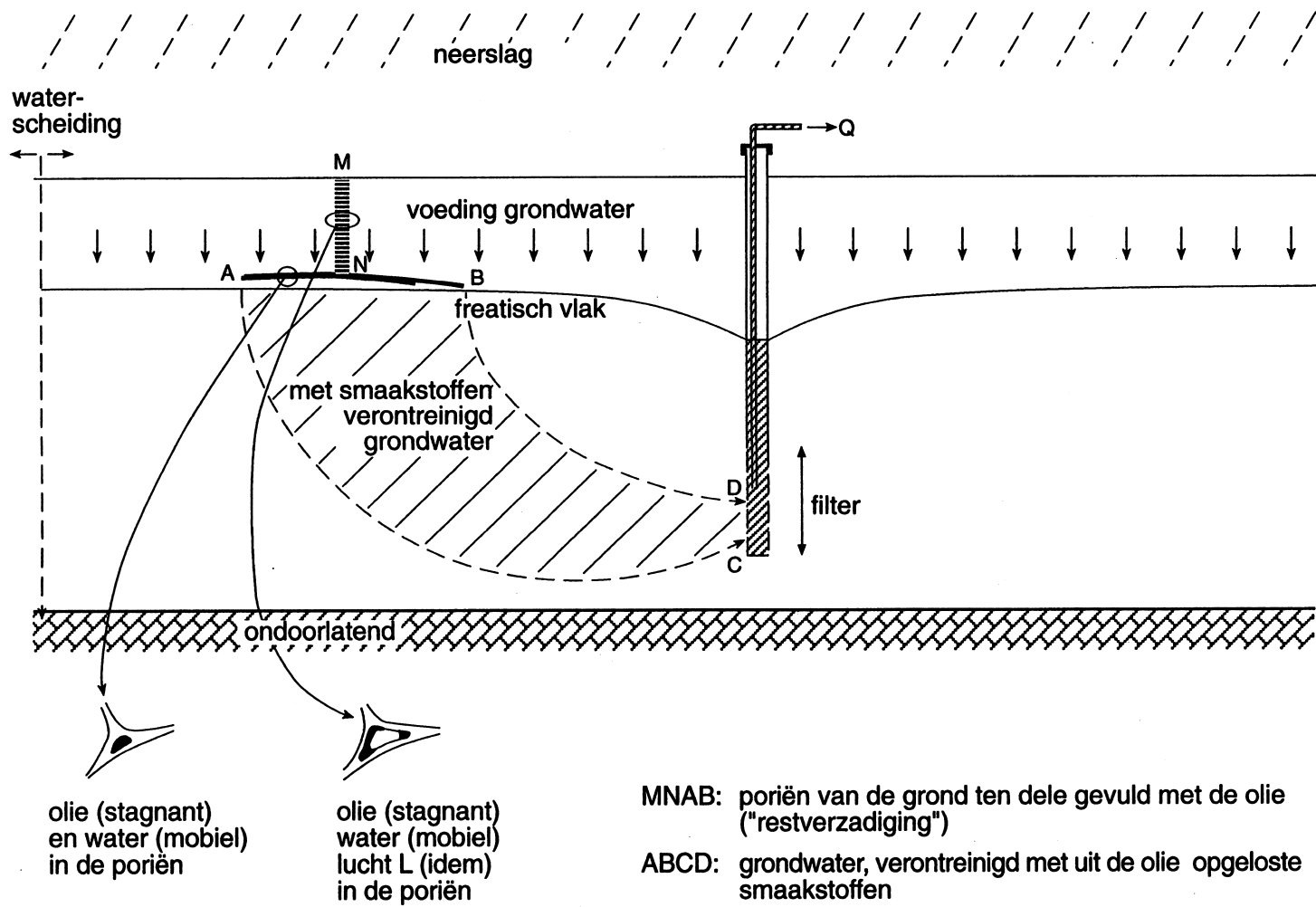
en van Drente, beide gebieden met een intensieve aardappelteelt. Nabij Emmen werd 1,2 dichloorpropanaan aangetroffen in winputten van 50-60 m diepte; de herkomst is een in 1984 verboden grondontsmettingsmiddel.

- h) *Tritium*, 3_1T is een zwaar isotoop van waterstof, dat zwak radioactief is en met een halveringstijd van 12,3 jaar vervalst. Sporen tritium komen van nature in regenwater voor. In de jaren zestig veroorzaakten proeven met atoomwapens in de atmosfeer een sterke verhoging van het gehalte aan HTO (zwaar water).
Het isotoop is een uitstekende merkstof, omdat het deel uitmaakt van het water zelf; het is veel gebruikt voor allerlei onderzoek naar grondwaterbewegingen. Door de vrij korte halveringstijd duidt de aanwezigheid van tritium op "jong" grondwater. In oud water (meer dan 100 jaar geleden geïnfiltreerd) komt het niet of nauwelijks meer voor.
- f) *Zuur*, H^+ -ion, komt op het aardoppervlak terecht door allerlei, meest antropogene processen, die leiden tot het ontstaan van "zure regen". Als de grond weinig bufferend vermogen heeft, dan wordt ook het grondwater beïnvloed. Merkbare verzuring komt voor in zuivere kwartszanden; in gebieden met zulke zanden is de pH van het grondwater nu merkbaar aan het dalen. Als er gemakkelijk verweerbare mineralen, kleideeltjes of kalk in de bodem voorkomen, is dit nog niet het geval.

7.2.2 *Stoffen, voornamelijk afkomstig uit puntbronnen*

- a) "*Tri*" (trichlooretheen) wordt veel gebruikt voor het ontvetten van metalen onder andere in de galvanische industrie. De stof wordt in de bodem en in het grondwater nauwelijks geadsorbeerd of afgebroken. Verontreiniging met tri heeft moeilijkheden gegeven bij een aantal waterwinplaatsen; soms zijn extra pompputten gemaakt, die moeten voorkomen dat verontreinigd grondwater tot de winplaats doordringt (hydrologische afscherming).
Door de grote vluchtigheid kan "tri" uit het gewonnen water worden verwijderd door het water intensief aan de lucht te versproeien.
- b) *Minerale olie* kan het grondwater bereiken door lekken in pijpleidingen, door ongelukken bij het transport en door morsen of lek bij benzinestations. De olie zakt snel in de bodem en zal zich, als het freatisch vlak wordt bereikt, juist boven dit vlak horizontaal gaan uitspreiden. Aan deze verbreiding komt een eind, wanneer de toestand van "restverzadiging" is bereikt. Bij deze restverzadiging aan olie komt in de poriën van de bodem zowel water als olie voor. Infiltrerend neerslagwater, dat de waterfase van deze verontreinigde zone passeert, neemt daarbij smaakstoffen op uit de oliefase en wordt daardoor ongeschikt voor gebruik als drinkwater (zie figuur 7.2-1).

Figuur 7.2-1 Verontreiniging van grondwater door minerale olie.



Bestrijding kan geschieden door de besmette grond zo spoedig mogelijk te verwijderen (liefst voordat de olie het freatisch vlak heeft bereikt) en uit te gloeien. Ook intensief contact van oliehoudende grond met de atmosfeer leidt tot afbraak van de olie door biologische omzettingen. In grondwater en vooral bij anaërobie is minerale olie zeer stabiel (anders zou ook de winning ervan niet mogelijk zijn).

- c) Stoffen afkomstig uit vuilstorten en dergelijke omvatten een grote verscheidenheid aan verbindingen, waaronder zeer schadelijke. Zware metalen zijn in de bodem weinig mobiel (het meest beweeglijk zijn Zn^{++} en Cd^{++}); op korte termijn vormen stoffen als cyanide (CN^- -ion) een grotere bedreiging. Voor vuilstorten geldt, dat ook hier het Cl^- -ion een goede indicator is voor de afstand waarover verontreinigd water zich heeft verspreid. Vrijwel alle andere stoffen lopen langzamer of worden omgezet in de bodem.

Verontreiniging door vuilstorten kan worden tegengegaan door het stort hetzij van een "dak" te voorzien (bijvoorbeeld een mengsel van zand en bentoniet, dat nagenoeg waterdicht is en dat bovendien voldoende bestand is tegen optredende zettingen), hetzij van een "bodem" (bijvoorbeeld een kunststof folie onder het stort). Door oude storten te beplanten met bomen kan men de hoeveelheid percolerend water verminderen (bos verdampt meer water dan kale grond of andere begroeiingstypen), maar niet tot nul reduceren.

7.3 De verontreiniging van het grondwater in Nederland

Door al deze oorzaken zijn nu in de Nederlandse zandgebieden de bovenste tientallen meters van het grondwater duidelijk antropogeen beïnvloed. Het neerslagoverschot bedraagt ongeveer 300 mm jr^{-1} . Als dit overschot verticaal infiltreert in een bodem met poriënfractie van 0.4 (geheel gevuld met grondwater), dan wordt elk jaar ongeveer 0.75 m van de grond ververst met nieuw water. Voor de duur van de sterke antropogene invloeden volgt dan een tijdspanne van enkele tientallen jaren: industrie, zware bemesting, verkeer en dergelijke namen vooral na 1950 sterk toe. Het Rijks Instituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiëne (R.I.V.M.) heeft in 1989 een rapport uitgebracht met betrekking tot de kwaliteit van het grondwater in Nederland (Van Duijvenbooden, 1989).

De conclusies van dit rapport worden op de volgende bladzijden integraal weergegeven.

CONCLUSIES uit het R.L.V.M. rapport**1 Algemeen**

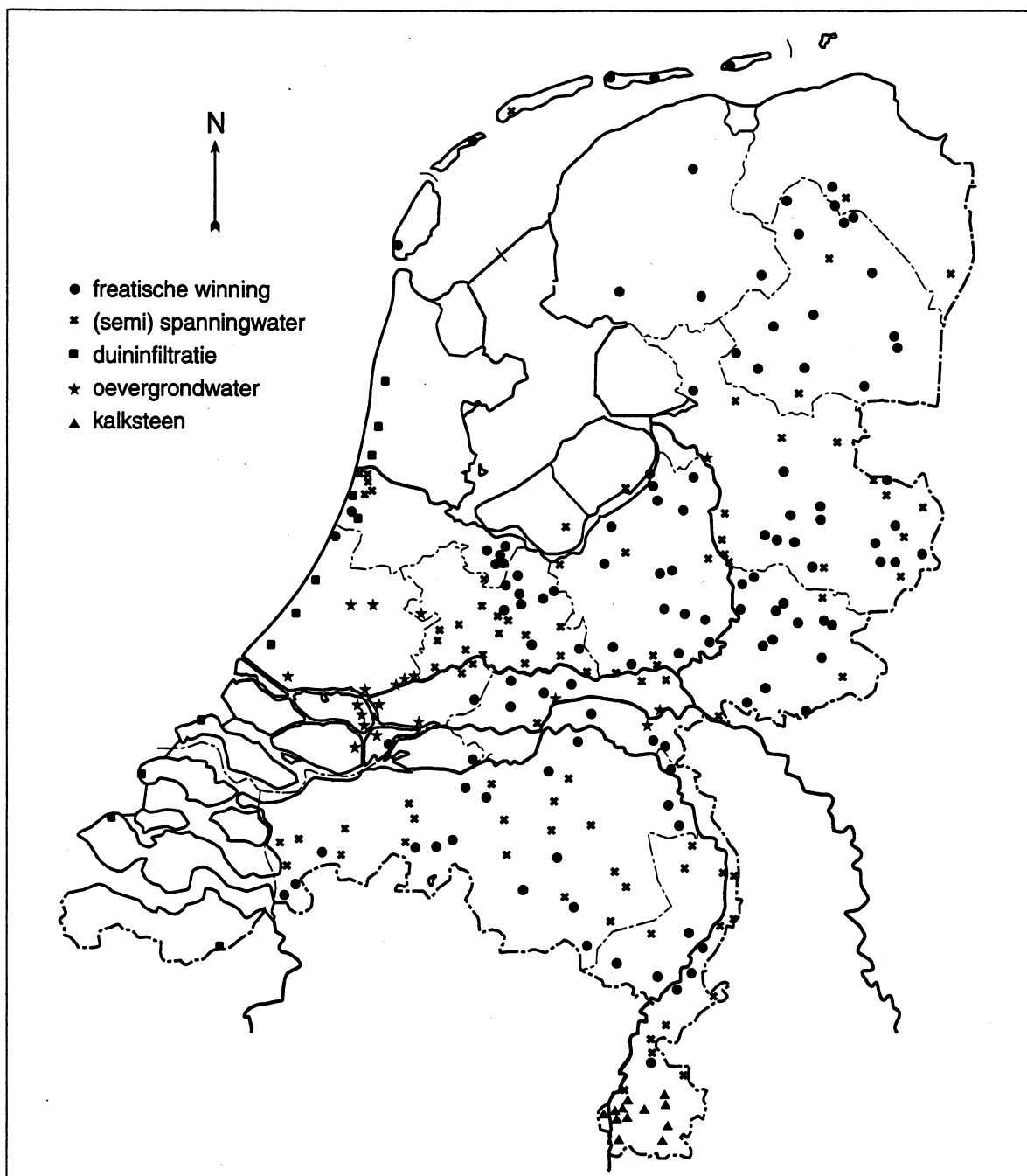
- Er bestaat een duidelijke relatie tussen de kwaliteit van het grondwater en het gebruik van de bodem. De mate waarin de effecten van het bodemgebruik merkbaar zijn, worden mede bepaald door de bodem- en geohydrologische gesteldheid.
- Voor zover sprake is van antropogene invloeden nemen deze met de diepte af; in de loop van de tijd zijn deze effecten wel op steeds grotere diepte merkbaar.
- In de gebieden waar grondwatervoeding plaatsvindt via het oppervlaktewater zijn de effecten van de verontreiniging van dit oppervlaktewater duidelijk in het grondwater terug te vinden.

2 Nitraat

- Onder de landbouwgronden op zand wordt in de bovenste meter van het grondwater de drinkwaternorm voor nitraat-N van 11.3 mg l^{-1} (=50 mg l^{-1} nitraat) veelvuldig overschreden; onder bouwland gemiddeld met een factor 4 à 6, onder maispercelen met een factor 10 en onder grasland met een factor 2. Bij ca. 70% van het areaal grasland is de $\text{NO}_3\text{-N}$ concentratie hoger dan de drinkwaternorm.
- Onder zandige kleigronden zijn vaak hoge nitraat-N concentraties aangetroffen. Het grondwater onder leemgronden blijkt ten aanzien van nitraat vrijwel even kwetsbaar als bij zandgronden. Bij niet-zandige kleigronden en veengronden bestaat in het algemeen geen nitraatprobleem.
- Onder bossen zijn in de bovenste meter van het grondwater hoge nitraat-concentraties aangetroffen. Dit is in het bijzonder het geval onder naaldbossen, waar de drinkwaternorm soms met een factor 2 wordt overschreden. Onder loofbossen zijn de nitraatconcentraties in het algemeen lager dan de drinkwaternorm.
- Alhoewel bij toenemende diepte lagere nitraatconcentraties worden gemeten, zijn tot op grote diepte hoge nitraatconcentraties aangetroffen. Onder zandbouwland is op 10 m-mv het gemiddelde 2 maal de drinkwaternorm. Op deze en nog grotere diepte stijgen de nitraatconcentraties in de tijd.
- De nitraatuitspoeling naar het grondwater wordt sterk beïnvloed door de grondwaterstand. De uitspoeling neemt toe met diepere grondwaterspiegel tot een maximum uitspoeling is

bereikt bij een grondwaterspiegel op ca. 2 m-mv. Verlaging van de grondwaterspiegel zal dan ook kunnen leiden tot een forse stijging van de nitraatuitspoeling.

- Bij tientallen waterwinplaatsen stijgen de nitraatgehalten. Bij meerdere waterwinplaatsen bevat het gewonnen grondwater nu reeds concentraties rond de drinkwaternorm. Uitgaande van de huidige waargenomen trend zal dit binnen 100 jaar voor circa 35 winningen het geval zijn. Scenarioberekeningen leiden tot een overeenkomstig resultaat. Uit de berekeningen volgt, dat vooral bij de freatische waterwinplaatsen in het oostelijk en zuidelijk zandgebied reeds op korte termijn sprake zal zijn van forse stijgingen van het nitraatgehalte in het gewonnen grondwater. Bij vele van deze winplaatsen zal mogelijk reeds rond het jaar 2000 de drinkwaternorm voor nitraat zijn overschreden (zie figuur 7.3-1).
- Bij een aantal waterwinplaatsen waar nitraatstijgingen worden verwacht, is vooral sprake van stijging van het sulfaatgehalte. Dit duidt er op, dat pyrietoxidatie een belangrijke oorzaak kan zijn voor denitrificatie in de watervoerende systemen.
- Uit diverse onderzoeken blijkt dat er óf duidelijk sprake is van denitrificatie in het watervoerend pakket met als gevolg geen of slechts beperkte nitraatproblemen op de waterwinplaatsen, óf dat er geen denitrificatie optreedt, waardoor op termijn bij een hoge N-belasting de drinkwaternorm op de winplaatsen zal worden overschreden. Nader onderzoek naar het al dan niet optreden van denitrificatie in watervoerende systemen zal bijdragen tot een meer evenwichtige schatting van de nitraatdreiging voor de waterwinplaatsen.
- Uit berekeningen blijkt, dat volledige effectuering van het Besluit Gebruik Dierlijke Meststoffen (BGDM) slechts in beperkte mate zal leiden tot verlaging van de nitraatlast van het grondwater. Alleen onder mais en bos zal sprake zijn van een significante verlaging van de nitraatconcentraties in het grondwater.
- Dit beperkte effect is onder andere het gevolg van het feit dat het BGDM slechts betrekking heeft op het gebruik van dierlijke mest. Daarnaast blijkt sprake te zijn van een zeer lage N-efficiency, met name in de melkveehouderij.
- Effectuering van het Besluit in combinatie met een meer efficiënt gebruik van dierlijke mest en beperking van de totale stikstofgift (inclusief kunstmest), in het bijzonder op grasland, leidt tot een situatie waarbij in de bovenste meter van het grondwater op termijn nog slechts op lokale schaal sprake zal zijn van overschrijding van de drinkwaternorm. Bij beperking van de totale N-gift in de melkveehouderij tot bijvoorbeeld 450 kg.ha⁻¹ zal slechts nog bij circa 5% van het graslandareaal in de zandgebieden de N-uitspoeling resulteren in NO_3^- - N concentraties in het grondwater boven de drinkwaternorm.



Figuur 7.3-1 Soorten grondwaterwinning van de waterleidingbedrijven in Nederland (naar Kreutz, 1990).

- Het effect van een N-efficiency-verbetering zal, gelet op de in de loop der tijd opgebouwde hoeveelheid organische N in de bouwvoor en de lange verblijftijden van het geïnfiltreerde grondwater (voor freatische waterwinningen veelal tenminste 25 à 50 jaar), pas op zeer lange termijn volledig doorwerken op de kwaliteit van het op de winplaatsen te onttrekken grondwater. De grote hoeveelheid nitraat die reeds onderweg is naar de winplaatsen zal nog tientallen jaren haar effect doen gelden. Bij enkele tientallen winplaatsen zal als gevolg daarvan, ook bij vermindering van de N-belasting ten minste tijdelijk (enkele tientallen jaren) nitratsuivering nodig zijn.
- Onduidelijkheid bestaat over de grootte van de depositie in bosgebieden. Dit belemmert een nauwkeurige voorspelling van de grondwaterkwaliteit in deze gebieden. Een groot deel van het bosareaal ligt in intrekgebieden van grondwaterwinplaatsen. Meer inzicht in de omvang van de depositie in bos- en natuurgebieden is dan ook wenselijk.

3 Kalium

- In de landbouwgebieden op zand zijn in de bovenste meter van het grondwater kaliumconcentraties aangetroffen van gemiddeld $2 \text{ à } 4 \times$ de drinkwaternorm van 12 mg l^{-1} . Kalium is een hoofdbestanddeel van dierlijke mest en wordt ook via kunstmest aan de bodem toegevoegd. Daarnaast worden hoge K^+ -concentraties gevonden indien sprake is van mariene beïnvloeding.
- In het diepere grondwater worden, vooral onder bouwland, vaak hoge K^+ -concentraties gemeten. Er is sprake van een K^+ -front dat zich naar de diepte verplaatst. Bij tal van waterwinplaatsen stijgt de K^+ -concentratie in het gewonnen water. Bij enkele waterwinplaatsen is de drinkwaternorm reeds overschreden. Uitgevoerde berekeningen geven aan dat dit aantal winplaatsen sterk zal toenemen.
- Effectuering van het Besluit Gebruik Dierlijke Meststoffen zal resulteren in een duidelijke verlaging van de K^+ -uitspoeling. Toch zal de uitspoeling aanleiding blijven geven tot K^+ -concentraties in het bovenste grondwater hoger dan de drinkwaternorm.
- Onder naaldbossen zijn hogere K^+ -concentraties waargenomen dan onder loofbossen. De waargenomen concentraties liggen voor bos- en natuurgebieden in het algemeen onder de drinkwaternorm.

4 Fosfaat

- In de zandgebieden is een duidelijke relatie aangetoond tussen het bodemgebruik en het totaal-P gehalte in het grondwater. Dit is niet of in mindere mate het geval voor ortho-P. De uitspoeling van P is echter beperkt. Van een aanzienlijke doorslag is zeker op regionale schaal thans nog geen sprake. De voor totaal-P waargenomen concentraties liggen afhankelijk van het bodemgebruik, globaal tussen 0.1 en 0.4 mg l⁻¹ (dus onder de referentiewaarde). Uit de meetnetcijfers blijkt dat de ortho-P gehalten globaal een factor 2 lager zijn. Ortho-P en totaal-P zijn onderling niet gecorreleerd. In Noord- en Midden-Limburg zijn aanzienlijk lagere ortho-P gehalten gemeten; gemiddeld 0.03 à 0.04 mg l⁻¹.
- In veengebieden worden door natuurlijke oorzaken P-gehalten waargenomen van vele mg l⁻¹.

5 Zuurgraad

- De afgelopen jaren is, blijkens de gegevens van het landelijk meetnet voor de grondwaterkwaliteit, verzuring van het grondwater opgetreden. Momenteel lijkt er sprake te zijn van een zekere stabilisatie. Bij de opgetreden verzuring speelt in de natuurgebieden de zure depositie waarschijnlijk een overwegende rol. In de landbouwgebieden kan de verzuring vooral worden toegeschreven aan effecten van een door het gebruik van meststoffen optredende verzouting, waarbij H⁺-ionen in de vaste fase worden verdrongen door andere uitgespoelde positief geladen ionen.
- Lage pH-waarden gaan veelal gepaard met hoge Al-concentraties in het grondwater. Bij pH-waarden rond de 4 worden vaak Al-concentraties van vele mg l⁻¹ gevonden. De norm voor drinkwater en oppervlaktewater is 0.2 mg l⁻¹.
- Effecten van verzuring op de grondwaterwinplaatsen zijn niet bekend. Inzicht in toekomstige bedreigingen voor de drinkwatervoorziening is er niet. Nader onderzoek hierover is zeker zinvol.

6 Spoorelementen

- Betreffende het voorkomen van spoorelementen in grondwater zijn slechts weinig gegevens voorhanden. Dit geldt in het bijzonder voor de bovenste meter van het grondwater. Meer meetgegevens zijn nodig om duidelijker verband te kunnen leggen met omgevingsfactoren

en bodembelasting.

- De meetgegevens laten voor diverse spoorelementen een relatie zien tussen de gevonden concentratie enerzijds en het bodemgebruik en de diepte beneden maaiveld anderzijds. De relatie met het bodemtype en de pH is veel minder duidelijk dan vaak wordt aangenomen.
- Gemiddeld is circa 10% van de waargenomen concentraties aan spoorelementen hoger dan de referentiewaarde. Voor chroom is dit percentage aanmerkelijk hoger.

7 Organische microverontreinigingen

- Voor de bovenste meter van het grondwater zijn nauwelijks gegevens over het voorkomen van organische microverbindingen voorhanden.
- Uit gegevens van het landelijk meetnet blijkt dat circa 5% van de meetpunten bij herhaling verhoogde VOCI gehalten vertoont. Deze verhoogde waarden worden gevonden in stedelijk gebied, onder bouwland (inclusief tuinbouw) en in gebieden met infiltratie vanuit het oppervlaktewater. De meest voorkomende individuele componenten zijn trichlooretheen en 1,2-dichloorpropaan.
- Bij een beperkt indicatief onderzoek bleek dat in de meetnetputten conform de verwachtingen niet, of slechts in zeer geringe concentraties chloor- en nitrofenolen en polycyclische koolwaterstoffen in het grondwater aanwezig waren.
- Vluchtige aromaten en vluchtige chloorkoolwaterstoffen blijken veelvuldig in het grondwater aantoonbaar. Een duidelijke relatie met bodemtype en bodemgebruik is evenwel niet te vinden. Naar verhouding liggen veel van de beïnvloede meetpunten in stedelijk gebied. Nader onderzoek naar de feitelijke situatie is zinvol.

8 Bestrijdingsmiddelen

- Tot dusverre zijn 19 bestrijdingsmiddelen in de bovenste meter van het grondwater aangetroffen. Voor het op winplaatsen onttrokken grondwater is dit het geval voor 6 bestrijdingsmiddelen.
- Het grondwateronderzoek bleef tot dusverre voornamelijk beperkt tot het bovenste grondwater in de meest kwetsbare zandgebieden. Uit modelonderzoek blijkt dat ook in kleigronden die arm zijn aan organisch materiaal, bestrijdingsmiddelen, zoals atrazin en dinoseb, kunnen uitspoelen. Gegevens over het diepere grondwater zijn er nauwelijks. In 1986 is een aantal putten van het landelijk meetnet onderzocht op het voorkomen van

organischloorpesticiden in het grondwater. Deze zijn niet aangetoond.

- In gebieden met snijmaisteelt kan bij gebruik van atrazin blijkens uitgevoerde berekeningen in 25-50% van het areaal in de bovenste meter van het grondwater een concentratie van meer dan $1 \mu\text{g l}^{-1}$ aan atrazin worden verwacht.
- Dinoseb kan in aardappelteeltgebieden op 25-90% van de percelen uitspoelen in concentraties boven de $10 \mu\text{g l}^{-1}$. Tot 9% van de gift kan uitspoelen.

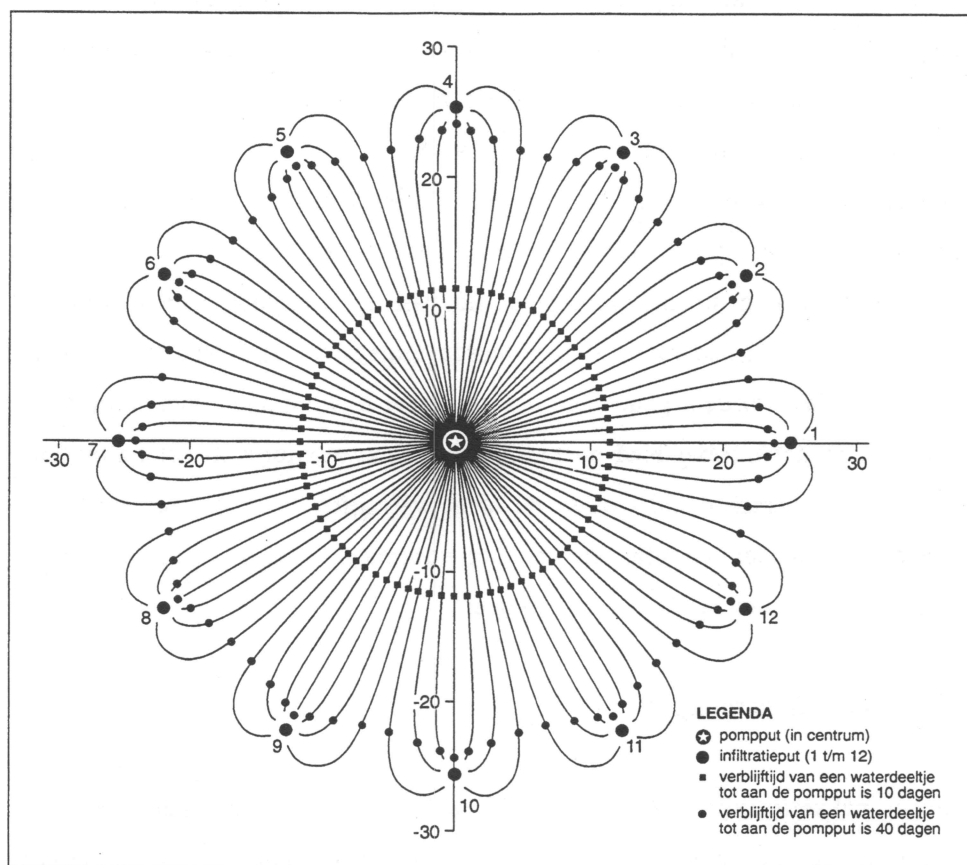
Momenteel is nog slechts weinig bekend van het voorkomen en gedrag van atrazin en dinoseb in het grondwater. Indien wordt uitgegaan van conservatief gedrag, moet er rekening mee worden gehouden dat op diverse winningen met veel aardappel- en/of maisteelt in het intrekgebied op termijn de drinkwaternorm in het onttrokken grondwater zal worden overschreden. Gezien de lange verblijftijden zullen bij een eventueel verbod van deze middelen de effecten van het voormalige gebruik nog tientallen jaren op de winplaatsen kunnen worden waargenomen.

7.4 Hydrologische afscherming

Watervoerende pakketten zijn in de regel zo dik (enkele tientallen tot enkele honderden meters) en zo uitgestrekt dat aan mechanische afscherming van een verontreiniging niet te denken valt.

Meer effectief is hydrologische afscherming; in het voorgaande zijn daarvan al enkele voorbeelden gegeven. Men tracht daarbij een zodanige stroming te veroorzaken, dat het verontreinigde grondwater niet kan doordringen tot gevoelige plaatsen (Bruggeman en Snelting, 1985).

Dit kan door infiltratie van water, maar ook door onttrekking. Het voordeligst is een combinatie van beide. Een voorbeeld van een combinatie van infiltratie en winning geeft figuur 7.4-1.



Figuur 7.4-1 Hydrologische afscherming van een verontreinigd gebied door middel van 12 infiltratieputten en één pompput (naar Bruggeman en Snelting, 1985).

BIJLAGE I

I.1 Arbeid en energie¹⁾

In 1686 publiceerde Newton zijn beroemde *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica* waarin de nu naar hem genoemde bewegingswetten worden beschreven. (Olenick, Apostol en Goodstein, 1985; Resnick, Halliday en Krane, 1992). In de klassieke mechanica, die gebaseerd is op de wetten van Newton, wordt veel aandacht besteed aan de beweging van een voorwerp. Als de eigenschappen van het voorwerp (massa, afmetingen etc.) alsmede de locatie en de beginsnelheid gegeven zijn in een bekende omgeving, dan is het mogelijk de beweging van het voorwerp te voorspellen.

In het dagelijkse leven behoeven we bij de studie van mechanische systemen alleen rekening te houden met de zwaartekracht én met krachten die uiteindelijk van elektromagnetische oorsprong zijn, zoals normaalkrachten, wrijvingskrachten en elastische krachten. De wrijving in een bewegende vloeistof vertoont veel gelijkenis met de wrijving bij vaste lichamen. De grootte van de wrijvingskracht tussen vaste lichamen is evenredig met de wrijvingscoëfficiënt μ , bij vloeistoffen speelt de viscositeit η een soortgelijke rol.

Als een voorwerp wordt verplaatst door een kracht, zeggen we dat de kracht arbeid verricht.

De arbeid (W) die een kracht verricht wanneer die werkt op een voorwerp, is gedefinieerd als het product van de grootte van de kracht (in de richting van de verplaatsing) en de afstand waarover het voorwerp wordt verplaatst.

Omdat een verplaatsing wordt gedefinieerd door grootte en richting kan zij worden weergegeven door een vector (een pijl met een gegeven lengte en richting). Een constante kracht F die op een massa werkt en daaraan een verplaatsing d geeft (zie figuur I.1-1), verricht dus een hoeveelheid arbeid die gelijk is aan:

$$W = |F| \cos \alpha |d| \quad (\text{I.1-1})$$

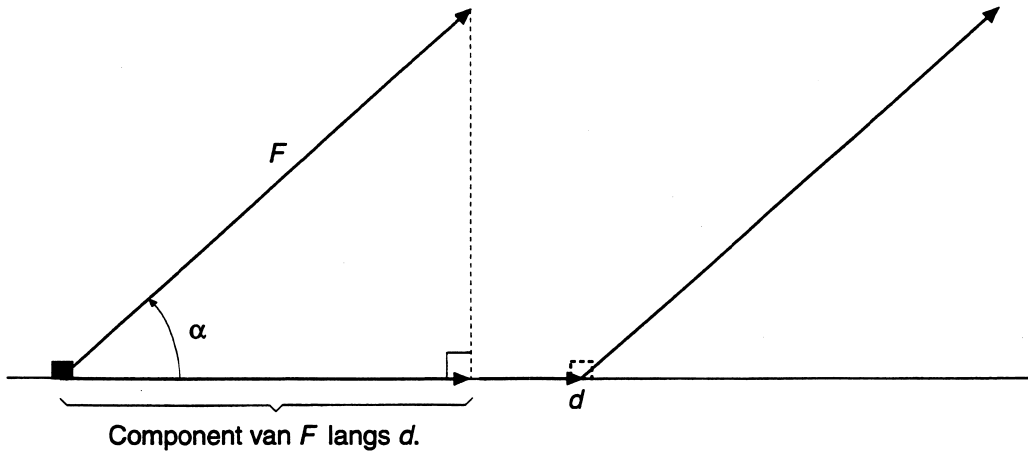
waarin $|F|$ de absolute waarde is van de krachtvector en $|d|$ de absolute waarde van de verplaatsingsvector. Vergelijking (I.1-1) is de definitie van het inwendig product van de vectoren F

¹⁾ In deze bijlage wordt een korte samenvatting gegeven van de begrippen arbeid en energie. Voor een goed begrip van deze stof is elementaire kennis van de mechanica vereist. Daarvoor wordt verwezen naar de vwo- en propedeuse leerboeken natuurkunde. Een heldere uiteenzetting van de grondslagen van de mechanica met oefenmogelijkheden, is onder andere te vinden in: *Klassieke Mechanica*, deel 1, Stichting Teleac, 1989. Een leerzame en zeer uitgebreide behandeling van de klassieke mechanica treft men aan in: *Physics*, deel 1, 4^{de} editie, 1992, auteurs: Resnick, Halliday en Krane, uitgever: Wiley and Sons, New-York.

en d . De arbeid kan daarom worden geschreven als:

$$W = F \cdot d \quad (\text{I.1-2})$$

De eenheid van arbeid (Joule) wordt verricht als een kracht van 1 Newton een voorwerp 1 meter verplaatst.



Figuur I.1-1 Een kracht F verricht arbeid bij verplaatsing.

Als de verplaatsing over enige afstand niet langs een rechte lijn geschiedt, of wanneer de kracht niet constant is maar een functie van de coördinaten, is de arbeid gelijk aan de *lijnintegraal* langs het pad van de verplaatsing.

$$W = \int_{l(B-E)} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} \quad (\text{I.1-3})$$

waarin $d\mathbf{r}$ de infinitesimale verplaatsingsvector is langs het pad l van beginpunt B naar eindpunt E. Omdat de zwaartekracht constant is en altijd in dezelfde richting werkt (in een standaard cartesiaans coördinatenstelsel is dat de negatieve z -richting), is het gemakkelijker de arbeid te schrijven als: het product van de kracht maal de verplaatsing in de richting van de kracht:

$$W_g = \int_{l(B-E)} \mathbf{F}_g \cdot \mathbf{e}_z dz = -mg \Delta z \quad (\text{I.1-4})$$

waarin $\mathbf{e}_z$ de eenheidsvector in de verticale richting is (positief naar boven).

In de klassieke mechanica wordt aangetoond dat het effect van arbeid op de beweging van een

voorwerp leidt tot één van de belangrijke behoudswetten:

De netto arbeid van alle krachten die op een voorwerp werken, is gelijk aan de verandering van de kinetische energie van het voorwerp.

Dit wordt ook wel de wet van arbeid en kinetische energie genoemd. (Resnick, Halliday en Krane, 1992). We kunnen dit eenvoudig schrijven als:

$$W_{\text{net}} = \Delta K = \frac{1}{2}m(v_E^2 - v_B^2) \quad (\text{I.1-5})$$

waarin ΔK de verandering van de kinetische energie is, en v_E en v_B de snelheid respectievelijk in punt E en punt B.

Kinetische energie is een scalaire grootheid, die nooit negatief kan zijn. De verandering van de kinetische energie kan uiteraard wel negatief zijn. Voor een constante kracht -zoals de zwaartekracht- volgt uit vergelijking (I.1-4) dat de arbeid onafhankelijk is van de afgelegde weg tussen twee punten. Als er behalve de zwaartekracht geen andere krachten werkzaam zijn, wordt het verschil in kinetische energie daarom alleen bepaald door het hoogteverschil. Keert een voorwerp langs een bepaalde weg terug naar zijn oorspronkelijke positie, dan is de lijnintegraal in vergelijking (I.1-4) een *kringintegraal*. De netto verplaatsing is nul en dus is de netto arbeid die door de zwaartekracht wordt verricht ook nul. We noemen de zwaartekracht (en andere krachten waarvoor geldt dat zij geen arbeid verrichten tijdens een heen- en terugreis) een *conservatieve kracht*. Voor een conservatieve kracht geldt dat de arbeid onafhankelijk is van de afgelegde weg (zie opgave I.1.4). Een voorbeeld van een niet-conservatieve kracht is de wrijvingskracht.

Potentiële energie is de energie die *een systeem* bezit als gevolg van zijn configuratie. In het algemeen geldt: een voorwerp heeft potentiële energie, als het zich in een omgeving bevindt waarin op het voorwerp een kracht werkt die de mogelijkheid heeft om arbeid te verrichten.

De positie van een voorwerp, in het systeem "aarde plus voorwerp", bepaalt hoeveel zwaartekrachtenergie het voorwerp bezit. Beweging van een voorwerp in het zwaarteveld betekent dat er arbeid wordt verricht door de zwaartekracht.

We definiëren het verschil in potentiële energie ΔU , als minus de arbeid die wordt uitgeoefend op het voorwerp door de conservatieve kracht.

$$\Delta U = -W_{\text{net}} \quad (\text{I.1-6})$$

Potentiële energie is dus uitsluitend verbonden met een conservatieve kracht.

Uit de laatste twee vergelijkingen volgt:

$$\Delta U + \Delta K = \Delta(U + K) = 0 \quad (\text{I.1-7})$$

Vergelijking (I.1-7) is de wiskundige formulering van de wet van het behoud van mechanische energie. Deze wet is van toepassing als er alleen conservatieve krachten werkzaam zijn. Uit (I.1-3) en (I.1-6) volgt:

$$\Delta U = U_E - U_B = - \int_{B \rightarrow E} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} \quad (\text{I.1-8})$$

Kiezen we nu de toestand in punt B als referentietoestand ($U_B = 0$), dan is U_E de potentiële energie. Zo hangt de *potentiële zwaarte-energie* alleen af van de positie van het voorwerp. De verandering van de potentiële zwaarte-energie is gelijk aan de zwaartekracht maal de verandering van de afstand van het voorwerp tot de aarde ($mg \Delta z$). Eigenlijk moet men in zo'n geval ook de verplaatsing van de aarde (door de kracht die het voorwerp uitoefent op de aarde) in rekening brengen, maar als gevolg van de grote massa van de aarde is die afstand te verwaarlozen en wordt de verandering van de potentiële zwaarte-energie van het systeem daardoor niet beïnvloed.

De potentiële energie is een relatieve waarde, een andere keus van de referentietoestand resulteert in een andere waarde van U . We kunnen slechts spreken van *verschil* in potentiële energie, ofwel: potentiële energie *ten opzichte van*. In één dimensie wordt vergelijking (I.1-8):

$$\Delta U = - \int_B^E F(x) dx \quad (\text{I.1-9})$$

en dus is de kracht:

$$F(x) = - \frac{dU(x)}{dx} \quad (\text{I.1-10})$$

De potentiaal wordt gedefinieerd als de potentiële energie per massa.

Is $f(x)$ de kracht per massa en ψ de potentiële energie per massa, dan is de relatie tussen kracht en potentiaal:

$$f(x) = -\frac{d\psi(x)}{dx} \quad (\text{I.1-11})$$

Met behulp van vectoralgebra kunnen we gemakkelijk aantonen dat in drie dimensies geldt:

$$\mathbf{f} = -\nabla\psi \quad (\text{I.1-12})$$

Met andere woorden: minus de gradiënt van de potentiaal is gelijk aan de conservatieve kracht per massa.

Opgaven

L1.1. Waarom verricht de zwaartekracht geen arbeid bij een verplaatsing in horizontale richting?

L1.2. Een steen met een massa van 4.5 kg valt van een hoogte van 10.5 m naar het aardoppervlak.

a. Hoe groot is de snelheid net voordat de steen de grond raakt? Luchtweerstand mag worden verwaarloosd, $g = 9.81 \text{ m s}^{-2}$. **b.** Hoeveel arbeid heeft de zwaartekracht verricht als de steen de grond raakt?

L1.3. Als een veer door een externe kracht wordt uitgerekt of ingedrukt, oefent de veer een tegengestelde kracht uit, die evenredig is met de afstand tot de evenwichtspositie: $F_v = -kx$.

a. Waarom het - teken? **b.** Stel dat de veerconstante k gelijk is aan 15.0 N cm^{-1} . Hoeveel arbeid is nodig om de veer 12 mm uit te rekken? **c.** Hoeveel arbeid is nodig om de veer nog 12 mm verder uit te rekken?

L1.4. Bewijs dat de arbeid van een conservatieve kracht onafhankelijk is van de afgelegde weg. Aanwijzing: bewijs eerst dat de arbeid van de kracht langs een pad van punt A naar punt B, W_{AB} , gelijk is aan minus de arbeid op de terugreis van B naar A langs hetzelfde pad, $-W_{BA}$.

L1.5. In een pretpark staat een achtbaan met twee verticale lussen. **a.** Kan de tweede lus net zo hoog zijn als de eerste? **b.** Hoeveel arbeid wordt er door de zwaartekracht verricht bij het doorlopen van een cirkelvormige lus (looping the loop)? **c.** Hoeveel arbeid wordt er door de centripetale kracht verricht bij het doorlopen van een cirkelvormige lus?

L1.6. Bewijs de wet van arbeid en kinetische energie voor een rechtlijnige beweging. Aanwijzing: schrijf de tweede wet van Newton als:

$$\mathbf{F}_{\text{net}} = m\mathbf{a} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = m \frac{d(\mathbf{e}_x v_x)}{dt} = \mathbf{e}_x m \frac{dv_x}{dt} = \mathbf{e}_x m \frac{dv_x}{dx} v_x$$

L1.7. Tijdens een bergwandeling klim je 240 m in een uur. Hoeveel vermogen heb je geleverd? Aanwijzing: vermogen is de hoeveelheid arbeid per seconde ($\text{J s}^{-1} = \text{Watt}$).

BIJLAGE II

II.1 De lineaire differentiaalvergelijking van de eerste orde

Algemene vorm:

$$\frac{dc}{dt} + A(t) c = B(t) \quad (\text{II.1-1})$$

waarbij A en B constanten zijn of functies van t .

Een eenvoudige oplossingsmethode is vermenigvuldigen met een "integrerende factor":

$$F(t) = e^{\int A(t) dt} \quad (\text{II.1-2})$$

Dit leidt in het linker lid tot:

$$\begin{aligned} \frac{dc}{dt} e^{\int A(t) dt} + A(t) c e^{\int A(t) dt} &= \\ &= \frac{d}{dt} \{c e^{\int A(t) dt}\} = \frac{d}{dt} \{c F(t)\} \end{aligned} \quad (\text{II.1-3})$$

waarin de productregel in omgekeerde volgorde werd gebruikt.

Hiermee is directe integratie mogelijk geworden:

$$c F(t) = \int B(t) dt \quad (\text{II.1-4})$$

De differentiaalvergelijking die volgt uit de zoutbalans van een goed gemengd reservoir is:

$$\frac{dc}{dt} + \frac{c}{T} = \frac{c_m}{T} \quad (\text{II.1-5})$$

en we kiezen als integrerende factor voor dit geval:

$$e^{\int d\eta T} = e^{\eta T} \quad (\text{II.1-6})$$

hieruit volgt:

$$\frac{dc}{d\eta} e^{\eta T} + \frac{1}{T} c e^{\eta T} = \frac{c_{\text{in}}}{T} e^{\eta T} \quad (\text{II.1-7})$$

$$\frac{d}{d\eta} \{c e^{\eta T}\} = \frac{c_{\text{in}}}{T} e^{\eta T} \quad (\text{II.1-8})$$

$$c e^{\eta T} = \frac{c_{\text{in}}}{T} T e^{\eta T} + \text{const.} \quad (\text{II.1-9})$$

Bij ontzilting geldt:

$$c_{\text{in}} = 0$$

zodat:

$$c e^{\eta T} = \text{constante} \quad (\text{II.1-10})$$

de randvoorwaarde $c = c_0$ voor $t=0$ levert:

$$\text{constante} = c_0$$

en

$$c = c_0 e^{-\eta T} \quad (\text{II.1-12})$$

bij verzilting geldt:

$$c_{\text{in}} \neq 0$$

zodat:

$$c e^{\eta T} = c_{\text{in}} e^{\eta T} + \text{constante} \quad (\text{II.1-13})$$

de randvoorwaarde $c = 0$ voor $t = 0$ levert:

$$c = c_{\text{in}} (1 - e^{-\eta T}) \quad (\text{II.1-14})$$

BIJLAGE III Ontziltng door diffusie

III.1.1 Differentiaalvergelijking en randvoorwaarden

De eendimensionale diffusievergelijking luidt:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_d^* \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (4.2-4)$$

Dit type differentiaalvergelijking beschrijft verschillende transportverschijnselen zoals:

- diffusie
- warmtestroming
- niet-stationaire grondwaterstroming.

Er zijn verschillende oplossingsmethoden. Wij gebruiken de *substitutie van Boltzmann*:

$$\lambda = x/\sqrt{t}$$

De randvoorwaarden zijn:

$x = 0$	$t > 0$	$c = 0$	voorwaarde aan grensvlak bodem-water
$x > 0$	$t = 0$	$c = c_0$	beginvoorwaarde
$x \rightarrow \infty$	t eindig	$c = c_0$	voorwaarde op grote diepte
x eindig	$t \rightarrow \infty$	$c = 0$	voorwaarde na lange tijd

III.1.2 Oplossing via substitutie van Boltzmann

- a) We kiezen een nieuwe variabele $\lambda = x/\sqrt{t}$ en gaan nu na of de concentratie $c(x,t)$ die van plaats en tijd afhangt, ook geschreven kan worden als een functie van λ alleen: $c = c(\lambda)$. Dit moet zowel voor de differentiaalvergelijking als voor de voorwaarden gelden. Het is van tevoren niet zeker of dit gelukt; als dit wel opgaat, dan wordt de partiële differentiaalvergelijking omgezet tot een gewone differentiaalvergelijking in λ , die veel gemakkelijker op te lossen is.

- b) Omdat c (naar wij hopen) alleen afhangt van λ zijn de afgeleiden $\frac{dc}{d\lambda}$ en $\frac{d^2c}{d\lambda^2}$ gewone afge-

leiden in plaats van partiële. Men mag dan de "kettingregel" voor differentialen gebruiken¹⁾:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{dc}{d\lambda} \cdot \frac{\partial \lambda}{\partial t} = \frac{dc}{d\lambda} \cdot \frac{-x}{2t\sqrt{t}} \quad (\text{III.1-1})$$

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{dc}{d\lambda} \cdot \frac{\partial \lambda}{\partial x} = \frac{dc}{d\lambda} \cdot \frac{1}{\sqrt{t}} \quad (\text{III.1-2})$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = \frac{d^2c}{d\lambda^2} \cdot \left(\frac{\partial \lambda}{\partial x}\right)^2 = \frac{d^2c}{d\lambda^2} \cdot \frac{1}{t} \quad (\text{III.1-3})$$

Ingevuld in: $\frac{\partial c}{\partial t} = D_d^* \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$ levert dit:

$$\frac{dc}{d\lambda} \cdot \frac{-x}{2t\sqrt{t}} = D_d^* \frac{d^2c}{d\lambda^2} \cdot \frac{1}{t} \text{ of } \frac{dc}{d\lambda} \cdot \frac{-x}{2\sqrt{t}} = D_d^* \frac{d^2c}{d\lambda^2} \quad (\text{III.1-4})$$

Omdat $x/\sqrt{t} = \lambda$ is dit gelijk aan:

$$-\frac{1}{2}\lambda \frac{dc}{d\lambda} = D_d^* \frac{d^2c}{d\lambda^2} \quad (\text{III.1-5})$$

De differentiaalvergelijking kan dus inderdaad geheel in λ worden geschreven.

- c) In ons geval geldt dit eveneens voor de randvoorwaarden:

$x = 0$	$t > 0$	$\lambda = 0$	$c = 0$		
$x > 0$	$t = 0$	$\lambda \rightarrow \infty$	$c = c_0$		zodat er slechts twee over-
$x \rightarrow \infty$	t eindig	$\lambda \rightarrow \infty$	$c = c_0$		blijven: $\lambda = 0, c = 0$
x eindig	$t \rightarrow \infty$	$\lambda = 0$	$c = 0$		en: $\lambda \rightarrow \infty, c = c_0$

¹⁾ Gebruik nooit ondoordacht de kettingregel, let op dat minstens één van de differentialen een gewone differentiaal is!

d) We zoeken nu de oplossing van:

$$\frac{d^2 c}{d\lambda^2} = - \frac{\lambda}{2 D_d^*} \cdot \frac{dc}{d\lambda} \quad (\text{III.1-6})$$

$$\begin{aligned} \text{met: } \lambda &= 0 & c &= 0 \\ \lambda &\rightarrow \infty & c &= c_0 \\ \lambda &= x/\sqrt{t} \end{aligned}$$

De vergelijking is van de tweede orde, maar omdat een term met c ontbreekt, kan zij door het stellen van $\frac{dc}{d\lambda} = p$ tot een eerste-orde vergelijking worden teruggebracht, waarin scheiding

van de variabelen mogelijk is:

$$\frac{dp}{d\lambda} = - \frac{\lambda}{2 D_d^*} \cdot p \text{ of } \frac{dp}{p} = - \frac{\lambda \cdot d\lambda}{2 D_d^*} \quad (\text{III.1-7})$$

Integratie leidt nu tot:

$$\ln p = - \frac{\lambda^2}{4 D_d^*} + \ln A \quad (\text{III.1-8})$$

waarin $\ln A$ de integratie-constante is.

$$p = A \exp(-\lambda^2/4 D_d^*) \quad (\text{III.1-9})$$

Nogmaals integreren levert:

$$c = \int p \, d\lambda = A \int_0^\lambda e^{-\lambda^2/4 D_d^*} \, d\lambda + B \text{ (constante)} \quad (\text{III.1-10})$$

De voorwaarde $\lambda = 0 \quad c = 0$ geeft $B = 0$. De integraal kan niet in elementaire functies worden uitgedrukt. Wel is vereenvoudiging mogelijk door te stellen $\zeta = \lambda/2\sqrt{D_d^*}$:

$$c = 2A\sqrt{D_d^*} \int_0^{\zeta} e^{-\zeta^2} d\zeta \quad (\text{III.1-11})$$

De voorwaarde $\lambda \rightarrow \infty$ $c = c_0$ leidt tot:

$$c_0 = 2A\sqrt{D_d^*} \int_0^{\infty} e^{-\zeta^2} d\zeta \quad (\text{III.1-12})$$

Omdat:

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-\zeta^2} d\zeta = 1 \text{ is } A = \frac{c_0}{\sqrt{\pi}D_d^*} \text{ en}$$

$$c = c_0 \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^m e^{-\zeta^2} d\zeta = c_0 \operatorname{erf} m \quad (\text{III.1-13})$$

waarin:

$$m = \zeta = \lambda/2\sqrt{D_d^*} = \frac{x}{2\sqrt{D_d^*t}}$$

$$\operatorname{erf} m = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^m e^{-\zeta^2} d\zeta \quad (\text{III.1-14})$$

III.2.1 De flux-voorwaarde bij $x = 0$

Het beginsel is dat ook bij het begin van de kolom ($x = 0$) behalve stroming ook nog dispersie actief is. Deze dispersie geeft een deelflux van opgeloste stof, die tegengesteld aan de invoer verloopt. Hierdoor is aan het oppervlak bij $x = 0$, ter grootte van A (m^2) de concentratie aan opgeloste stof niet gelijk aan die in het inkomende water: $c_{x=0} \neq c_{\text{in}}$.

Het vlak $x = 0$ heeft geen dikte; wij behoeven dus niet te rekenen met aanwezige voorraden of veranderingen daarin. Voor $x = 0$ geldt dus:

- in aan zout (door transport) $A \vee c_{\text{in}} = n_e A \vee_e c_{\text{in}}$

- uit " " (door transport) $A v c_{x=0} = n_e A v_e c_{x=0}$
- in " " (dispersie) $n_e A D_L \partial c / \partial x \big|_{x=0}$

Opstellen van de zoutbalans en delen door $n_e A v_e$ levert:

$$c \big|_{x=0} - \alpha_L \frac{\partial c}{\partial x} \bigg|_{x=0} = c_{in}$$

BIJLAGE IV Numerieke dispersie als vervanging voor fysische dispersie

IV.1 Stoftransport in een kolom

In deze bijlage wordt een methode behandeld om voor eendimensionale transportvraagstukken het probleem van de numerieke dispersie te ondervangen door in plaats van de convectie-dispersievergelijking de convectievergelijking op te lossen.

De convectie-dispersievergelijking voor de verplaatsing van een conservatieve stof in een eendimensionale verzadigde stroming met constante dichtheid en porositeit, of voor stationaire onverzadigde stroming luidt:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v_e \frac{\partial c}{\partial x} - \alpha_L v_e \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0 \quad (4.5-6)$$

Wordt alleen met convectie rekening gehouden dan is de vergelijking:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v_e \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad (3.2-5)$$

De gediscretiseerde vorm van (3.2-5) wordt gegeven door (5.3-7):

$$\frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} + v_{ex} \frac{c_i^n - c_{i-1}^n}{\Delta x} = 0 \quad (5.3-7)$$

In deze vergelijking werd de eerste afgeleide naar t benaderd door: $\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t}$.

Een nauwkeuriger benadering is echter: $\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial t^2}$

De tweede orde correctieterm van de laatste vergelijking zou dus aan (5.3-7) moeten worden toegevoegd. De tweede afgeleide $\frac{\partial^2 c}{\partial t^2}$ in die correctieterm kunnen we echter ook schrijven in

termen van de tweede afgeleide naar x , waardoor het mogelijk wordt een vergelijking te maken

met de convectie-dispersievergelijking. Daartoe schrijven we de tweede afgeleide naar t eerst als:

$$\frac{\partial^2 c}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) .$$

Nemen wij nu weer (3.2-5) als een goede benadering van (4.5-6), dan volgt:

$$\frac{\partial^2 c}{\partial t^2} = -v_{ex} \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial t} = -v_{ex} \frac{\partial}{\partial x} \left(-v_{ex} \frac{\partial c}{\partial x} \right) = v_{ex}^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (\text{IV.1-1})$$

In tweede benadering krijgen we dus voor de eerste afgeleide:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} - \frac{v_{ex}^2 \Delta t}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (\text{IV.1-2})$$

Uit de Taylorreeks voor c_{i-1}^n (ontwikkeld ten opzichte van c_i^n) volgt voor $\frac{\partial c}{\partial x}$:

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{c_i^n - c_{i-1}^n}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (\text{IV.1-3})$$

waarin nu de laatste term al in de juiste vorm staat.

Invullen in (3.2-5) leidt nu tot:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v_{ex} \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} - \frac{v_{ex}^2 \Delta t}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + v_{ex} \frac{c_i^n - c_{i-1}^n}{\Delta x} + \frac{v_{ex} \Delta x}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (\text{IV.1-4})$$

Omdat bij de numerieke oplossing wordt voldaan aan vergelijking (5.3-7), zijn de eerste en derde term ter rechterzijde samen nul, dus:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v_{ex} \frac{\partial c}{\partial x} = \left(\frac{v_{ex} \Delta x}{2} - \frac{v_{ex}^2 \Delta t}{2} \right) \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (\text{IV.1-5})$$

Om nu de convectie-dispersievergelijking (4.5-6) kloppend te krijgen moet:

$$(-\alpha_L v_{ex} + \frac{v_{ex}^2 \Delta x}{2} - v_{ex}^2 \frac{\Delta t}{2}) = 0 \quad \text{zijn of}$$

$$\Delta t = \frac{\Delta x - 2\alpha_L}{v_{ex}} \quad (\text{IV.1-6})$$

Door de stapgrootte van (IV.1-6) te kiezen wordt bij het oplossen van (5.3-7) tevens voldaan aan (4.5-6). Bij de numerieke oplossing wordt op deze manier de fysische dispersie meeberekend.

Dit betekent dus dat door numeriek oplossen van de (eenvoudiger) convectievergelijking (3.2-5) onder de voorwaarde (IV.1-6), ook dispersie wordt mee berekend. In werkelijkheid berekenen we dan de oplossing van de convectie-dispersievergelijking (4.5-6).

Er wordt met nadruk op gewezen, dat deze methode alleen toepasbaar is als de fluxdichtheid bekend (en constant) is, omdat anders de roosterafstand Δx zou fluctueren. Voor niet-stationaire problemen en voor twee-dimensionale vraagstukken is deze 'truc' dan ook niet geschikt.

Opgave IV.1. Waarom kan deze methode niet worden gebruikt voor twee- of driedimensionale stroming?

BIJLAGE V Lineaire systemen en convolutie

V.1 Cascademodel

Eerder is vermeld dat $2\alpha_L$ een 'afstand' voorstelt, waarover de longitudinale dispersie (coëfficiënt D_L) behorende bij de stroomsnelheid (v_e) een belangrijke vermenging veroorzaakt en waarbij:

$$\alpha_L = \frac{D_L}{v_e} \quad (4.3-2)$$

Wij kunnen daarom de grond (bij benadering) beschouwen als een reeks van goed gemengde reservoirs, die in serie geschakeld zijn (Figuur V.1-1). Elk reservoir ontvangt het effluent van het vorige, vermengt dat met het reeds aanwezige water (het in de bodemlaag aanwezige bodemvocht) en geeft dit mengsel door aan het volgende reservoir (bodemlaagje). Deze schakeling vormt een 'cascade': elk reservoir beïnvloedt alle volgende, maar heeft geen invloed op zijn voorgangers.

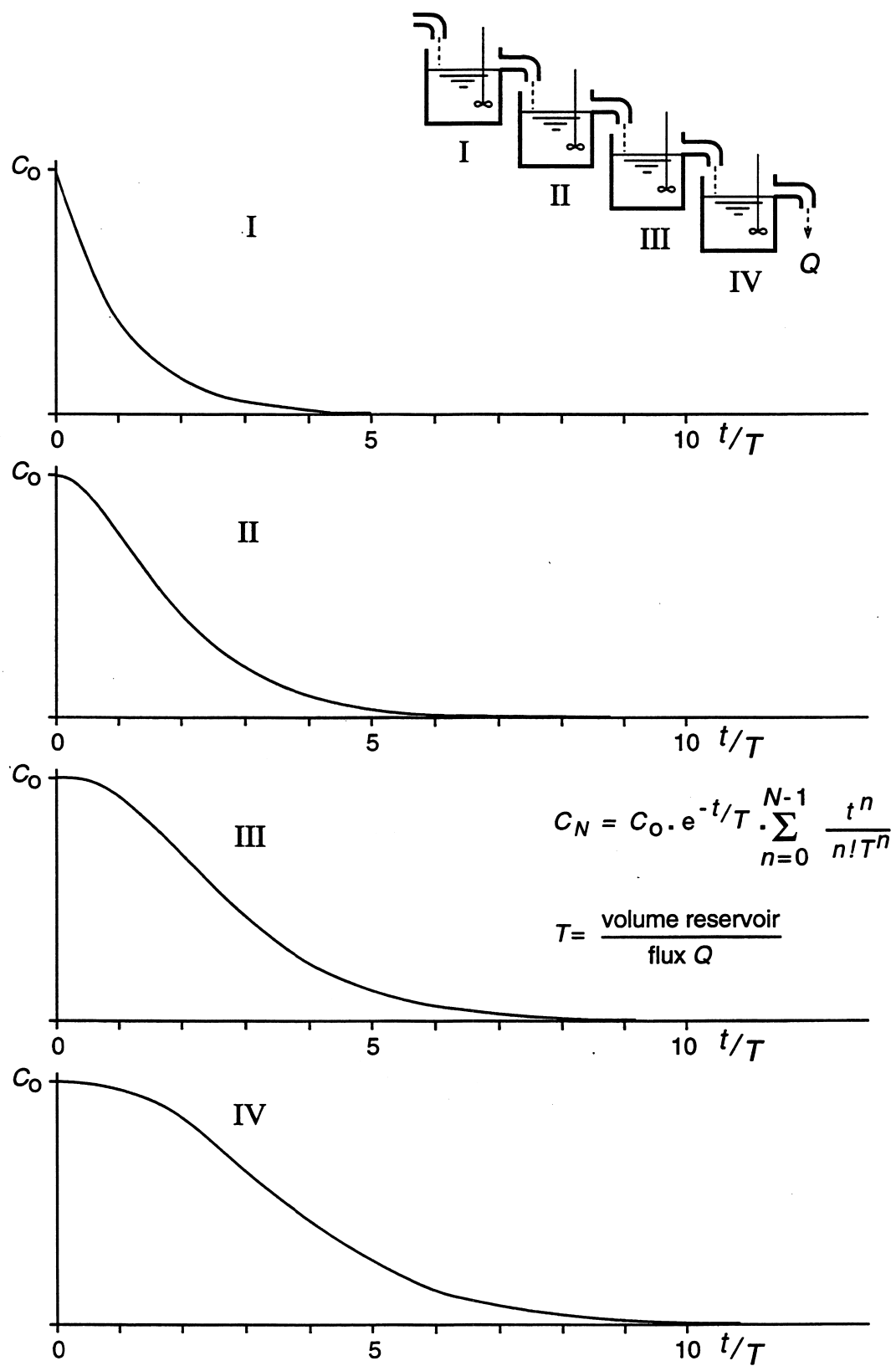
Dit model is een benadering, omdat in de grond de menging door dispersie overal, bij elke x , geschiedt, terwijl deze in het model plaats vindt in een aantal afzonderlijke reservoirs. De continue variabele x wordt daarbij opgedeeld in een aantal discrete stappen $\Delta x = 2\alpha_L$.

Stel dat alle reservoirs oorspronkelijk zout water bevatten, met concentratie c_0 . Op tijdstip $t = 0$ begint zoet water door de cascade te stromen, met fluxdichtheid v (m d^{-1}) over een oppervlak A (m^2); het debiet is dus Av ($\text{m}^3 \text{d}^{-1}$). De hoeveelheid bodemvocht in ieder van de reservoirs is gelijk aan: $2\alpha_L n_e A$ (m^3). In elk reservoir is de gemiddelde verblijftijd dus:

$$T = \frac{\text{volume reservoir}}{\text{doorstromend debiet}} = \frac{2 \alpha_L n_e A}{Av} = \frac{2\alpha_L}{v_e} \quad (\text{V.1-1})$$

In het eerste (goed gemengde) reservoir geldt dan vergelijking (4.1-9):

$$A_1 = \frac{c_1}{c_0} = e^{-t/T} \quad (\text{V.1-2})$$



Figuur V.1-1 Ontzilting van een cascade van vier reservoirs.

Het tweede reservoir ontvangt de afvoer uit het eerste; de concentratie daarvan, c_I , neemt exponentieel af met de tijd, van c_0 tot nul. Op zijn beurt wordt dit water weer gemengd met de inhoud van II, terwijl het mengsel wordt afgevoerd. Mathematisch staat een dergelijk proces bekend als 'convolutie'.

$$A_{II} = \frac{c_{II}}{c_0} = \left(1 + \frac{t}{1!T}\right) e^{-t/T} \text{ met } 1! \text{ (1-faculteit)} = 1 \quad (\text{V.1-3})$$

Voor de volgende lagen geldt:

$$A_{III} = \frac{c_{III}}{c_0} = \left(1 + \frac{t}{1!T} + \frac{t^2}{2!T^2}\right) e^{-t/T} \quad (\text{V.1-4})$$

$$A_{IV} = \frac{c_{IV}}{c_0} = \left(1 + \frac{t}{1!T} + \frac{t^2}{2!T^2} + \frac{t^3}{3!T^3}\right) e^{-t/T} \quad (\text{V.1-5})$$

$$A_N = \frac{c_N}{c_0} = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{1}{n!} \left(\frac{t}{T}\right)^n e^{-t/T} \text{ met } 0! = 1 \text{ (nul-faculteit)} \quad (\text{V.1-6})$$

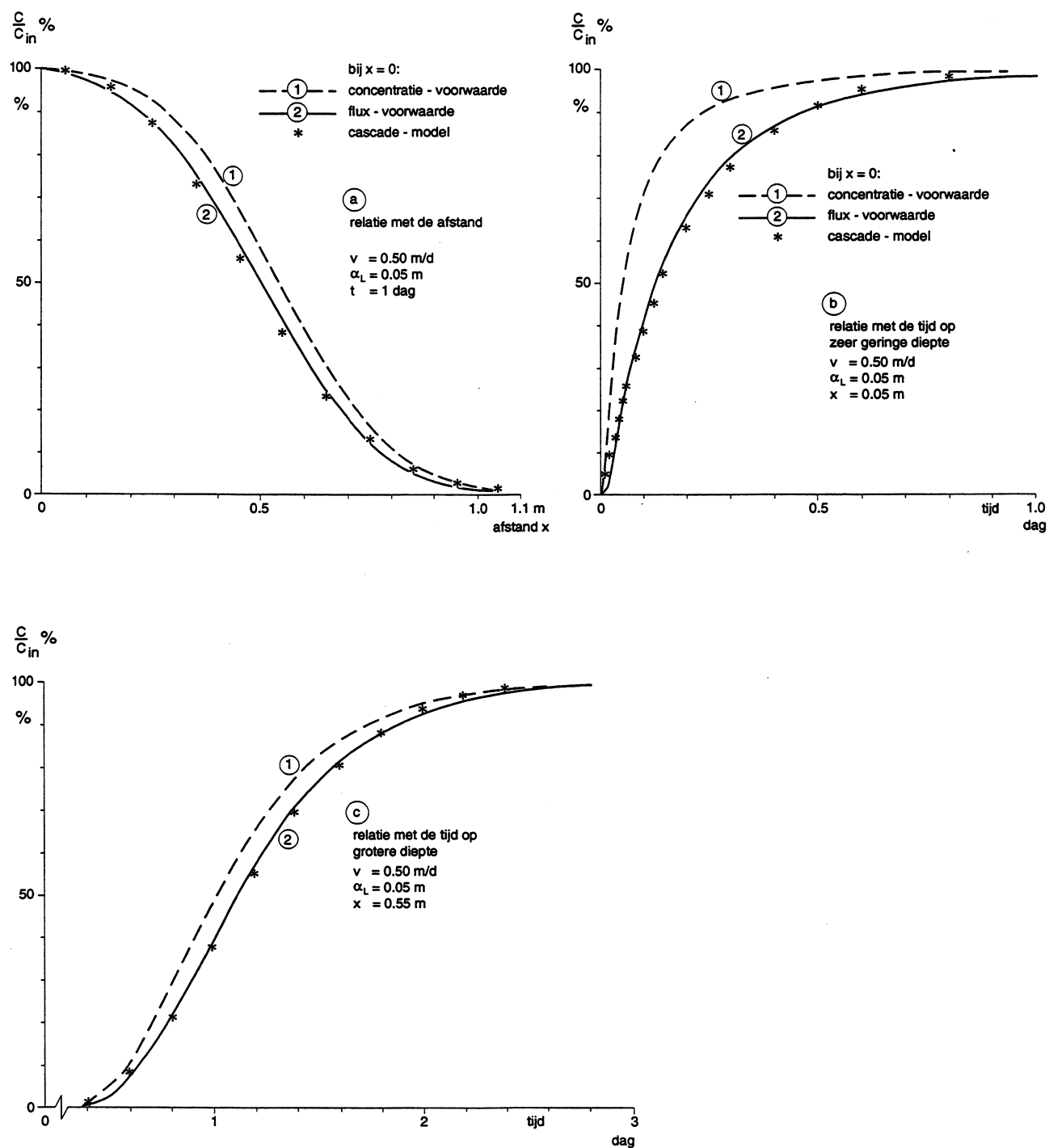
Voor verzilting van een schone kolom onder invloed van water met concentratie c_{in} geldt weer (zie paragraaf 4.6):

$$\frac{c_N}{c_{in}} = B_N \text{ met } B_N = 1 - A_N$$

en in het algemeen:

$$c_N = A_N c_0 + (1 - A_N) c_{in} \quad (\text{V.1-7})$$

Vergelijkt men de uitkomsten van dit model met die van paragraaf 4.6.2.1 en 4.6.2.2, dan blijkt er een zeer goede overeenkomst te zijn, vooral met de oplossingen voor de 'flux-voorwaarde'. Een voorbeeld geeft Figuur V.1-2 waarbij V.1-2a het verloop van de concentratie met de afstand x weergeeft op een bepaald tijdstip t en Figuur V.1-2b,c het verloop in de tijd op twee afstanden x .



Figuur V.1-2 Vergelijking van verschillende modellen voor een verziltende kolom.

Het cascademodel blijkt in de praktijk meer dan voldoende nauwkeurig te zijn; de grotere eenvoud is daarbij een voordeel.

Het beschreven model werkt met discrete stappen in de stroomrichting (afzonderlijke reservoirs), maar is continu in de tijd. In dit geval is $2\alpha_L$ de juiste maat voor de afmeting van de ruimtelijke stap, zie bijlage IV vergelijking (IV.1-6). Bij het cascademodel is de tijd continu, dus $\Delta t = 0$ en $\Delta x = 2\alpha_L$. Men moet dus reservoirs kiezen van afmetingen $2\alpha_L$.

V.2 Convolutie

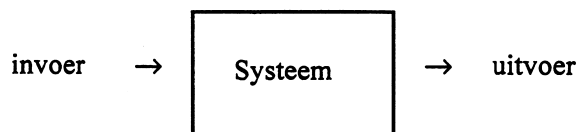
Een *systeem* staat in wisselwerking met zijn omgeving, ontvangt daarbij invoer (input) en brengt uitvoer (output) voort.

Er zijn lineaire en niet-lineaire systemen. Bij een *linear* systeem geeft tweemaal zoveel invoer ook dubbel zoveel uitvoer, terwijl twee afzonderlijke invoeren een uitvoer geven, die de som is van de responsies op elk van beide invoeren. Dit is het beginsel van *superpositie*.

Voorbeelden: een postzegelautomaat is een lineair systeem; bij betalen van vijf gulden (5×1.00) krijg je vijf postzegels van 1 gulden of, wegens $5.00 = 5 \times 0.80 + 1.00$) vijf van 80 en één van 100 cent.

Een kip is een niet-lineair systeem: tweemaal zoveel voer geeft niet tweemaal zoveel eieren. Bij te geringe invoer (ondervoeding) wordt het systeem instabiel (hoen gaat dood).

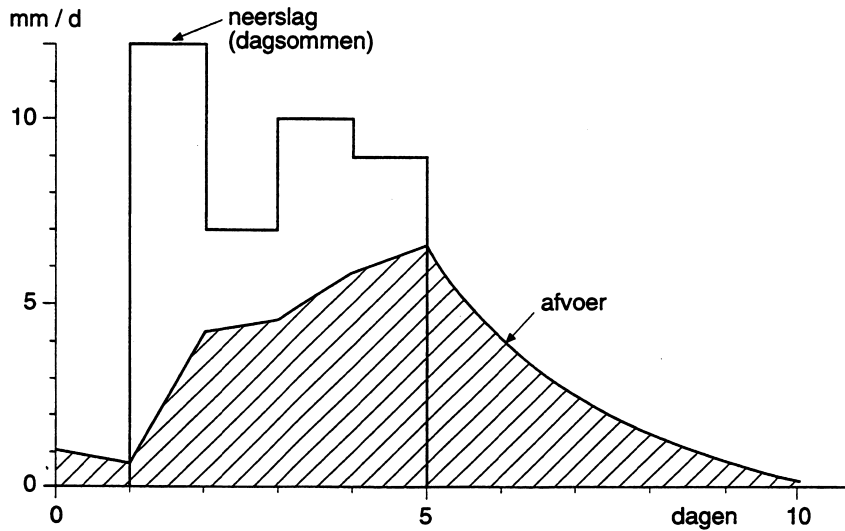
De meeste systemen, die in dit dictaat zijn beschreven, zijn bij benadering lineair. Een uitzondering is bijvoorbeeld een systeem met adsorptie volgens een concave of convexe isotherm.



De omzetting van invoer naar uitvoer gaat gepaard met transformatie: vertraging en vervorming van het ingangssignaal.

Zo geeft neerslag op een stroomgebied aanleiding tot afvoer. Drukt men beide uit in dezelfde eenheid (bijvoorbeeld mm/d over het stroomgebied), dan blijkt het volgende (Figuur V.2-1):

- de neerslag komt vertraagd tot afvoer;
- het verloop van de afvoer is gelijkmatiger dan het verloop van de neerslag: er treedt afvlakking (damping) op;
- de totale afgevoerde hoeveelheid water is kleiner dan de totale neerslag: er zijn verliezen, onder andere door verdamping.



Figuur V.2-1 Neerslag en afvoer: transformatie van invoer tot uitvoer.

Het eenvoudigste invoersignaal is een 'naaldpuls' of '*eenheids-impuls*': op het tijdstip $t=t_0$ wordt het systeem plotseling belast met een "eenheid" invoer (figuur V.2-2).

Voorbeelden hiervan zijn: het storten van 1 kg goed oplosbare stof in een rivier of een neerslag (in zeer korte tijd) van 1 mm, vallend op een stroomgebied.

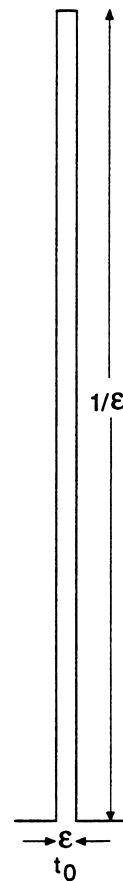
De wiskundige uitdrukking hiervoor is de 'deltafunctie van Dirac': een zeer kort durende, zeer intensieve toevoer van een hoeveelheid één (de '*eenheids-impuls*').

De delta-functie van Dirac is gedefinieerd als:

$$\delta(t_0) = 0 \quad \text{als } t < t_0 \quad (\text{geen invoer vóór tijd } t_0)$$

$$\delta(t_0) = 0 \quad \text{als } t > t_{0+\epsilon} \quad (\text{idem na tijd } t_{0+\epsilon})$$

$$\delta(t_0) = 1/\epsilon \quad \text{als } t_0 < t < t_0+\epsilon \quad \text{waarbij } \epsilon \rightarrow 0$$



Figuur V.2-2
Eenheidsimpuls

Door ϵ tot nul te laten naderen wordt de puls steeds smaller en hoger, terwijl toch het totale oppervlak (de hoeveelheid ingevoerde stof) gelijk blijft aan één:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(t) dt = 1 \quad (\text{V.2-1})$$

Van belang is nu de responsie van een (lineair) systeem op de invoer van een dergelijke naaldpuls. Dit antwoord wordt wel de "responsiefunctie" van het systeem genoemd.

Voorbeeld: een goed gemengd reservoir ontvangt op tijdstip "nul" een eenheidsnaaldpuls (1 kg verontreiniging):

$$c_{\text{in}} = 1 \cdot \delta(0) \quad \text{omdat nu } t_0 = 0$$

Als het reservoir een inhoud van 1 m³ heeft en een verblijftijd T , dan geldt op het tijdstip $t = 0$:

$$c = c_0 = 1 \text{ kg m}^{-3}$$

en op het tijdstip t bij verdere invoer met concentratie $c_i = 0$:

$$c = c_0 e^{-t/T} \text{ met } c_0 = 1 \text{ kg m}^{-3} \quad (\text{V.2-2})$$

zodat de responsiefunctie van dit systeem is:

$$F(t) = e^{-t/T} \quad (\text{V.2-3})$$

Men voegt nu in plaats van één eenheidsnaaldpuls, drie verschillende naaldpulsen toe van verschillende grootte:

- puls 1 op tijd $t = \tau_1 = 0$, die een concentratie verandering Δc_1 teweeg brengt
- puls 2 op tijd $t = \tau_2$, die de concentratie verandert met Δc_2
- puls 3 op tijd $t = \tau_3$, die de concentratie verandert met Δc_3

Op het moment van deze laatste invoer wordt de concentratie c gemeten op $t = \tau_3$.

Puls 1 is gedurende de gehele tijd t onderhevig geweest aan uitspoeling. Van de oorspronkelijke concentratie verandering Δc_1 is dus nog over:

$$\Delta c = \Delta c_1 e^{-(t-\tau_1)/T} = \Delta c_1 e^{-t/T} \quad (\text{V.2-4})$$

Puls 2 is gedurende de tijd $t-\tau_2$ onderhevig geweest aan uitspoeling.

Van de oorspronkelijke *concentratieverandering* Δc_2 is dus nog over:

$$\Delta c = \Delta c_2 e^{-(t-\tau_2)/T} \quad (\text{V.2-5})$$

Puls 3 is onderworpen geweest aan verandering gedurende de tijd $t-\tau_3$, zodat deze levert:

$$\Delta c = \Delta c_3 e^{-(t-\tau_3)/T} = \Delta c_3 e^{-(t-t)/T} = \Delta c_3 \quad (\text{V.2-6})$$

De concentratie verandering op het tijdstip t is dus (wegens de lineariteit) de som van deze drie bijdragen:

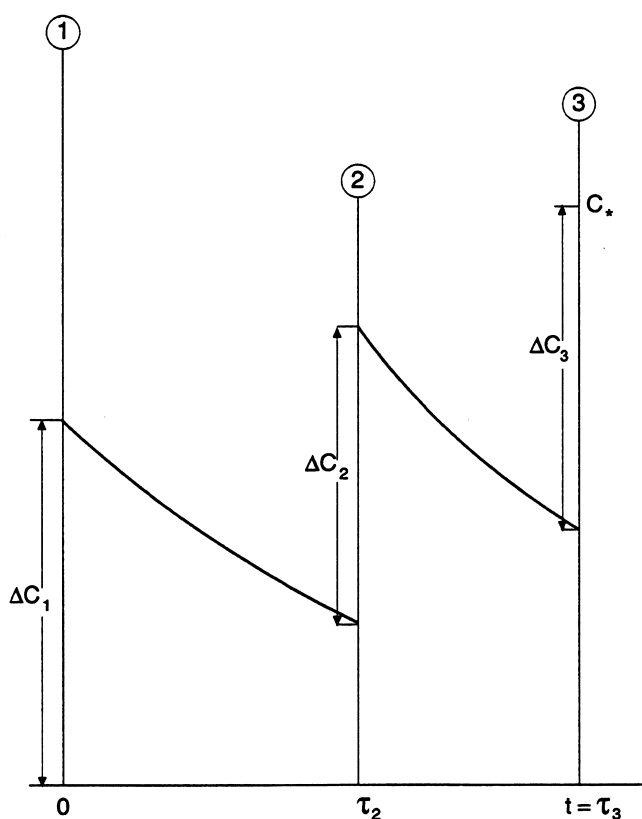
$$\Delta c_* = \Delta c_1 e^{-(t-0)/T} + \Delta c_2 e^{-(t-\tau_2)/T} + \Delta c_3 \quad (\text{V.2-7})$$

(zie figuur V.2-3).

Dit proces staat bekend als *convolutie*. Meestal zijn bij de invoer geen afzonderlijke naaldpulsen te onderscheiden, maar verloopt de ingevoerde concentratie volgens een continue functie. De som van de bijdragen wordt dan vervangen door een integraal, de *convolutie-integraal*:

$$c(t) = \int_{\tau=0}^t f(\tau) \cdot F(t-\tau) \cdot d\tau \quad (\text{V.2-8})$$

dat wil zeggen de *invoer* $f(\tau)$ *optredend op het tijdstip* τ is op het tijdstip van meting t , gedurende de tijd $t-\tau$ onderworpen geweest aan verandering binnen het systeem (vergelijk puls 2); deze invloed wordt beheerst door de *responsiefunctie* F , met als argument $t-\tau$ (de werkingsduur).



Figuur V.2-3 Invoer van drie naaldpulsen in een lineair systeem. De hoogte van de naaldpulsen symboliseert de grootte van hun bijdrage.

Elk tijdstip τ tussen $t = 0$ en het meettijdstip t geeft een dergelijke bijdrage; de som van al deze bijdragen wordt voorgesteld door de convolutie-integraal.

Als voorbeeld kiezen wij een cascade (serieschakeling) van gelijke, goed gemengde reservoirs (volume V_0), elk met verblijftijd T . Al deze reservoirs zijn oorspronkelijk met zoet water gevuld. Op tijd $t = 0$ ontvangt het eerste reservoir een hoeveelheid zout, die de concentratie in dit reservoir (en dus ook die van de afvoer, c_1) op de waarde c_0 brengt.

Omdat de responsiefunctie van dit reservoir $F(t) = e^{-t/T}$ is, geldt voor de afvoer:

$$c_1 = c_0 e^{-t/T} \quad (\text{V.2-9})$$

Deze afvoer is de invoer voor het tweede reservoir. Invoer van een flux q met concentratie c_1 in

reservoir II brengt per seconde een concentratie verandering $\frac{c_{II} q}{V_0} = \frac{c_I}{T}$ teweeg.

De afvoer van het tweede reservoir volgt dus uit convolutie van dit invoerverloop met de betreffende responsiefunctie:

$$c_{II} = \int_{\tau=0}^t f(\tau) \cdot F(t-\tau) d\tau = \int_{\tau=0}^t \frac{c_0 e^{-\tau/T}}{T} \cdot e^{-(t-\tau)/T} d\tau = \frac{c_0 e^{-t/T}}{T} \int_{\tau=0}^t d\tau \quad (V.2-10)$$

of:

$$c_{II}(t) = c_0 \frac{t e^{-t/T}}{T} \quad (V.2-11)$$

Door convolutie van deze invoer voor het derde reservoir met diens responsiefunctie volgt c_{III} :

$$c_{III} = \frac{c_0}{T} \int_{\tau=0}^t \frac{\tau e^{-\tau/T}}{T} e^{-(t-\tau)/T} d\tau = \frac{c_0 e^{-t/T}}{T^2} \int_{\tau=0}^t \tau d\tau \quad (V.2-12)$$

$$c_{III}(t) = \frac{c_0}{T^2} \frac{t^2}{2} e^{-t/T} \quad (V.2-13)$$

$$c_{IV}(t) = \frac{c_0}{T^3} \frac{t^3}{6} e^{-t/T} \quad (V.2-14)$$

enzovoort.

In dit geval zijn de convolutie-integralen van eenvoudige vorm en daardoor gemakkelijk te vinden. Vaak is deze uitwerking lastig.

Meestal wordt de oplossing verkregen via 'Laplace-transformatie'; in dit dictaat wordt daarop niet ingegaan.

LITERATUUR

- Akker, C. van den, 1982. Numerical analysis of the streamfunction in plane groundwaterflow. Proefschrift TH Delft (ook als RID-Mededeling 83-1).
- Bear, J. en A. Verruijt, 1987. Modeling groundwaterflow and pollution. Reidel, Dordrecht.
- Bear, J., 1993. Modelling of flow and contaminants in the subsoil. IGWMC Short course, Delft.
- Beers, W.J.F. van, 1958. The auger hole method. Bull. No. 1. International Inst. for Land Reclamation and Improvement, Wageningen. 32 p.
- Boekelman, R. en Van Dijk, 1995. Geohydrologie. Collegedictaat F15B, vakgroep Waterbeheer, Milieu en Gezondheidstechniek, T.U., Delft.
- Bolt, G.H. en M.G.M. Bruggenwert, 1978. Soil Chemistry. A. Basic Elements. Elsevier, Amsterdam.
- Bruggeman, G.A. en H. Snelting, 1985. Hydrologisch scherm als isolering van bodemverontreiniging. *H₂O* 18, 186-192.
- Churchill, R.V., 1960. Complex variables and applications. McGraw-Hill, New York.
- Comm. Hydrol. Onderz. - TNO, 1964. Steady flow of groundwater towards wells. Proc. and Inf. 10.
- Comm. Hydrol. Onderz. - TNO, 1986. Verklarende hydrologische woordenlijst. Rapporten en nota's, 16.
- Cultuurtechnisch Vademecum, 1988. Cultuurtechnische Vereniging, Utrecht.
- Dufour, F.C., 1998. Grondwater in Nederland. Ned. Inst. v. Toegepaste Geowetenschappen TNO - Delft.
- Duijvenbooden, W. van (red.), 1989. De kwaliteit van het grondwater in Nederland. R.I.V.M. Rapport nr. 7288820001.
- Dumm, L.D., 1954. Drain spacing formula. *Agr. Eng.* 35: 726-730.
- Ernst, L.F., 1950. A new formula for the calculation of the permeability factor with the auger hole method. T.N.O. Groningen. Translated from Dutch by H. Bouwer, Cornell Univ., Ithaca, N.Y. 1955.
- Fahmy, M.I., 1961. The influence of clay particles on the hydraulic conductivity of sandy soils. Proefschrift LH, Wageningen.
- Gardiner, C.W., 1990. Handbook of stochastic Methods, 2nd ed. Springer Verlag, Berlijn.
- Gee, M. de, 1995. Wiskunde in werking. Epsilon, Utrecht.
- Genuchten, M.T. van, en W.J. Alves, 1982. Analytical solutions of the one-dimensional convective-dispersive solute transport equation. USDA Techn. Bull. no. 1661.

- Groen, J.A., 1978. Een cent per emmer. Het Amsterdamse drinkwater door de eeuwen heen. Gemeentewaterleidingen, Amsterdam.
- Groen, K.P., 1997. Pesticide leaching in polders, Field and model studies on cracked clays and loamy sand. Proefschrift Universiteit Wageningen. Tevens verschenen in de serie Van Zee tot Land 62, Lelystad.
- Hooghoudt, S.B., 1934. Bijdragen tot de kennis van enige natuurkundige grootheden van de grond. Versl. Landbouwk. Onderz. no. 40B, deel 2: 215-345. 's-Gravenhage.
- Hooghoudt, S.B., 1936. Bijdragen tot de kennis van enige natuurkundige grootheden van de grond. Versl. Landbouwk. Onderz. no. 42(13).B, deel 4: 449-541. 's-Gravenhage.
- Keizer, M.G. en W.H. van Riemsdijk, 1997. Speciatie en transport. Collegedictaat Vakgroep Bodemkunde en Plantenvoeding, Universiteit Wageningen.
- Konikov, L.F. en J.D. Bredehoeft, 1978. Computermodel of two-dimensional solute transport and dispersion in groundwater. U.S. Geol. Survey techniques of water res. investigations. Book 7, Ch. C2.
- Koopmans, R.W.R., 1999. Vloeistofmechanica en grondwaterstroming. Collegedictaat Vakgroep Waterhuishouding, 06141005, Universiteit Wageningen.
- Koopmans, R.W.R., 1986. Numerieke oplossingen van grondwaterstromingen. Collegedictaat Vakgroep Waterhuishouding, 06140810, Universiteit Wageningen (herziene uitgave 1994).
- Koorevaar, P., G. Menelik en C. Dirksen, 1983. Elements of soil physics. Elsevier, Amsterdam.
- Kraijenhoff van de Leur, D.A., 1958. A study of non-steady groundwaterflow with special reference to a reservoir coefficient. *De Ingenieur*, 70: B87-B94.
- Kreutz, R.H.F., 1990. Drinkwatervoorziening in het landelijk gebied. *Landinrichting*, 30, maart 1990, pp. 26-30.
- Kruseman, G.P. en N.A. de Ridder, 1991. Analysis and evaluation of pumping test data. Second revised ed. ILRI Public. 47, Wageningen.
- Leijnse, A., 1998. Grootchalige modellering van grondwaterstroming en transport. Collegedictaat Vakgroep Waterhuishouding, Universiteit Wageningen.
- Leijnse, A., 1992. Three-dimensional modeling of coupled flow and transport in porous media. Ph.D thesis, Notre Dame University, Notre Dame, Indiana, USA.
- Luthin, J.W. en D. Kirkham, 1949. A piezometer method for measuring permeability of soil in situ below a water table. *Soil Sci.* 68: 349-358.
- Luthin, J.W., 1957. Drainage of agricultural lands, Amer. Soc. of Agronomy, Madison, Wisconsin.
- Meinardi, C.R., 1974. De chemische samenstelling van het grondwater van de Veluwe. RID mededeling 1974-4.

- Meinardi, C.R., 1988. Veranderingen in de samenstelling van het water in de Veluwe sprengen. H_2O , 3, pp. 52-56.
- Mercer, J.W. and C.R. Faust, 1981. Groundwater modeling. Nat. Well Association, U.S.A.
- Olenick, R.P., T.M. Apostol en D.L. Goodstein, 1985. The Mechanical Universe. Cambridge Univ. Press, Cambridge. In het Nederlands vertaald en uitgegeven door Stichting Teleac, 1989, onder de titel Klassieke Mechanica.
- Ommen, H.C. van, 1986. Influence of diffuse sources of contamination on the quality of outflowing groundwater including non-equilibrium adsorption and decomposition. J. of Hydrol. 88: 79-95.
- Ommen, H.C. van, 1988. Transport from diffuse sources of contamination and its application to a coupled unsaturated-saturated system. Proefschrift LUW.
- Ommen, H.C. van en W.H. van der Molen, 1988. Waterquality, The influence of mixing and transport processes. Collegedictaat Vakgroep Cultuurtechniek, 06058806, Universiteit Wageningen.
- Press, W.H., B.P. Flannery, S.A. Teukolsky en W.T. Vetterling, 1986, 1989, 1992, 1996. Numerical Recipes, The Art of Scientific Computing. Cambridge University Press, Cambridge.
- Price, M., 1985. Introducing Groundwater. Allen and Unwin, London.
- Remson, I., G.M. Hornberger en F.J. Molz, 1971. Numerical methods in subsurface hydrology. Wiley-Interscience, New York.
- Resnick, R., D. Halliday en K.S. Krane, 1992. Physics, 4^{de} editie. Wiley and Sons, New York.
- Rooij, G.H. de, 1996. Preferential flow in water repellent sandy soils. Proefschrift, LUW, Wageningen.
- Sanford, W.E. en L.F. Konikow, 1985. A two-constituent solute transport model for groundwater having variable density. U.S. Geol. Survey. Water-resources investigation report 85-4279.
- Torfs, P.J.J.F., 1994. Eindige elementen in de hydrologie. Collegedictaat Vakgroep Waterhuishouding, 06142305, Universiteit Wageningen.
- Verruijt, A., 1970, 1984. Theory of groundwater flow (1st and 2nd ed.). McMillan, New York, N.Y.
- Wang, H.F. en M.P. Anderson, 1982. Introduction to groundwater modeling, Finite difference and finite element methods. W.H. Freeman and Company, San Francisco.
- Weerts, A.H., 1994. Analytical models for chemical transport in the subsurface environment. Afstudeerscriptie, Vakgroep Waterhuishouding LUW.
- Zeeuw, J.W. de, en F. Hellinga, 1958. Neerslag en afvoer. Landbouwk. Tijdschrift 70: 406-421.

ANTWOORDEN VAN OPGAVEN

- 1.3.1. Maak een tekening en bewijs met behulp van meetkunde (trigonometrie).
- 1.3.2. a. Onzin. b. Het eerste is een scalair maal vector w , het tweede een scalair maal vector u .
- 1.4.2. 1960 Pa m^{-3}
- 1.5.3. Potentiële energie bestaat alleen voor conservatieve krachten.
- 1.5.4. Nee. Potentiaal of stijghoogte is in zulke gevallen een onbruikbare grootheid.
- 1.5.5. freatische laag: 0.003-0.0007 (gemiddeld ca. 0.0018); artesische laag: 0.00023
- 1.5.6. a. - 0.6 m b. 13.73 kPa c. - 5.88 kPa d. -0.6 m
- 1.5.7. $4 \cdot 10^{-5}$
- 1.6.1. a. $\Delta H \text{ m}$ (= J per Newton) b. wrijving (warmte)
- 1.6.2. Omdat het energieverlies in de slangen zeer klein is t.o.v. het verlies in het grondmonster.
- 1.6.3. ja
- 1.6.4. $5 \cdot 10^{-3}$, $\alpha = 53^\circ$
- 1.6.5. 400 d.
- 1.6.6. nee, $\frac{\Delta H}{d} = n_e$
- 1.6.7. eenheidsvector e_z
- 1.6.8. $1.55 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$
- 1.6.9. $4.5 \cdot 10^{-5} \text{ m}$ en $4.5 \cdot 10^{-6} \text{ m}$
- 1.7.1. Fluxdichtheid is een volume gemiddelde, poriesnelheid, waterdruk en concentratie zijn intrinsieke fase gemiddelden.
- 1.8.1. a. $k = \frac{L}{t} \ln \frac{(h_0 + L)}{(h + L)}$ b. 3.58 m d^{-1}
- 1.8.2. 3.8 m d^{-1}
- 2.2.2. Ja.
- 2.3.1. Omdat de afhankelijke variabele h , alleen voorkomt tot de macht één.
- 2.3.2. $k_x \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} + k_y \frac{\partial^2 H}{\partial y^2} + k_z \frac{\partial^2 H}{\partial z^2} = 0$
- 2.3.3. a. $\frac{\partial^2 H}{\partial x^2}$ b. lineair verloop c. $\frac{1}{2}h$
- 2.5.1. 5000 m^3

2.5.2. Zie antwoord vraag 2.3.2.

2.6.2. $\frac{dp}{dz} = -\rho g$, is hetzelfde als in stilstaand water.

$$2.6.3. \quad kD \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} + kD \frac{\partial^2 H}{\partial y^2} + R + W = S \frac{\partial H}{\partial t}$$

$$2.7.1. \quad \frac{1}{2} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} = 0$$

$$2.7.2. \quad h = \frac{(h_B - h_A)}{L} x + h_A$$

$$2.7.3. \quad \text{a. } h^2 = -\frac{Rx^2}{k} - \frac{(h_A^2 - h_B^2)x}{L} + \frac{RLx}{k} + h_A^2 \quad \text{b. } 10.1 \text{ m}$$

2.7.4. 10.1 m

2.7.5. $1.72 \text{ m}^3 \text{ d}^{-1}$

2.9.1. $a_1 = 1.1 \cdot 10^{-3}$, $a_2 = 1.7 \cdot 10^{-3}$, $a_3 = 3.3 \cdot 10^{-3}$, $a_4 = 3.9 \cdot 10^{-3}$, $a_5 = 3.9 \cdot 10^{-3}$, $a_6 = 4.0 \cdot 10^{-3}$
 $a_7 = 4.2 \cdot 10^{-3}$, $a_8 = 3.8 \cdot 10^{-3}$, $a_9 = 3.4 \cdot 10^{-3}$, $a_{10} = 3.1 \cdot 10^{-3} \text{ m d}^{-1}$.

$$3.3.1. \quad dx - v_{ex} dt = 0 \quad dy - v_{ey} dt = 0$$

$$3.3.2. \quad dr - v_{er} dt = 0$$

3.3.3. In vrijwel alle situaties is er al een "natuurlijke" stroming aanwezig, de put stroming wordt daarop gesuperponeerd.

$$3.4.2. \quad \text{a. Voor } t \leq t_1: \bar{c}(t) = c_i (1 - e^{-\frac{tR}{nD}}) \quad \text{b. Voor } t > t_1: \bar{c}(t) = c_i (e^{-\frac{(t-t_1)R}{nD}} - e^{-\frac{tR}{nD}})$$

$$3.4.3. \quad \bar{c}(t) = c_i (1 - e^{-\frac{Rt}{nD}})$$

4.3.1. Ja. Omdat waterdeeltjes allemaal gelijk zijn en niet van elkaar kunnen worden onderscheiden.

$$5.3.1. \quad \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i = \frac{2u_{(i+1)} - 2u_i}{\Delta x^2} - \frac{\Delta x}{3} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i - \dots$$

$$5.3.2. \quad -(1 + 2r)u_i^{n+1} + 2ru_{i+1}^{n+1} = -u_i^n - \frac{R\Delta t}{S}$$

5.4.1. a. Door de randvoorwaarde: óf u is bekend op de rand, en dus "verhuist" die waarde naar de rechterzijde van de vergelijking, óf de gradiënt loodrecht op de rand is bekend, waardoor een vergelijking als in vraag 5.3.2. ontstaat.

$$5.4.2. \quad ru_{i-1}^{n+1} - (1 + 2r)u_i^{n+1} + ru_{i+1}^{n+1} + ru_{j-1}^{n+1} - (1 + 2r)u_j^{n+1} + ru_{j+1}^{n+1} = -u_i^n - \frac{(R+W)\Delta t}{S}$$

I.1.1. Het inwendig product van F_g en dr is nul.

I.1.2. 14.35 m s^{-2}

I.1.3. a. Omdat de richting van de veerkracht tegenovergesteld is aan de richting van de verplaatsing vanuit de evenwichtstoestand. b. 0.043 J c. 0.13 J

I.1.5. a. Ja, als er maar begonnen wordt met voldoende potentiële energie. b. nul.

naam: _____

reg. nr.: _____

adres: _____

plaats: _____

telefoon: _____